Πανεπιστήμιο Αιγαίου

Τμήμα Επιστημών της Θάλασσας-Σχολή Περιβάλλοντος

Ανοικτό ακαδημαϊκό μάθημα

Μέθοδοι Προσομοίωσης και Εφαρμογές

Διδάσκοντες:Γ. Τσιρτσής, Καθηγητής
Δρ Β. Κολοβογιάννης, ΕΔΙΠ

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Άδειες Χρήσης

Χρηματοδότηση

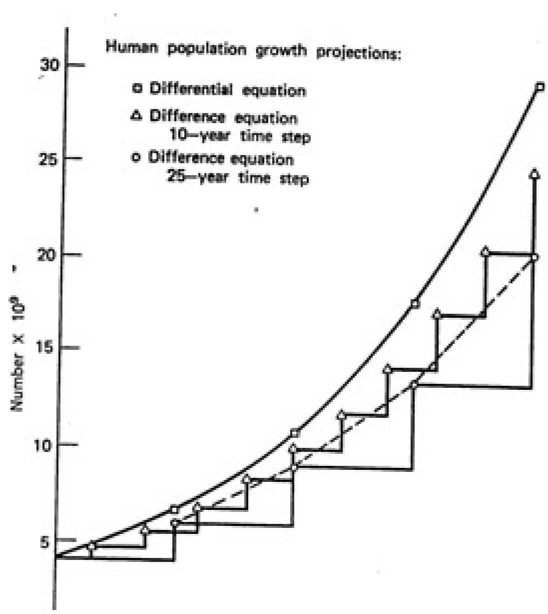
- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αιγαίου**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

3. ΕΚΤΕΛΕΣΗ ΜΟΝΤΕΛΩΝ ΜΗΔΕΝΙΚΗΣ ΔΙΑΣΤΑΣΗΣ – ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΣΥΝΗΘΩΝ ΔΙΑΦΟΡΙΚΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ (ΣΔΕ)

Το σύστημα διαφορικών εξισώσεων που περιγράφει ένα μαθηματικό μοντέλο λύνεται και προκύπτουν ως αποτέλεσμα οι συναρτήσεις μεταβολής των μεταβλητών κατάστασης στον χρόνο και στον χώρο. Η λύση του συστήματος μπορεί να είναι αναλυτική ή αριθμητική. Η αναλυτική μέθοδος λύσης παρέχει μεν την ακριβή λύση αλλά παρουσιάζει συγκεκριμένα μειονεκτήματα. Κατ’ αρχήν απαιτεί διαφορετική προσέγγιση κατά περίπτωση, γεγονός που προϋποθέτει την χρήση της ανθρώπινης λογικής στην λήψη αποφάσεων. Επίσης η εύρεση αναλυτικών λύσεων σε μερικές περιπτώσεις είναι εξαιρετικά δύσκολη ή και αδύνατη. Αντίθετα οι αριθμητικές μέθοδοι λύσης διαφορικών εξισώσεων είναι γενικές μέθοδοι που εφαρμόζονται σε κάθε περίπτωση χωρίς την μεσολάβηση δύσκολων λογικών αποφάσεων, γεγονός που τις καθιστά κατάλληλες για την εφαρμογή μέσω ηλεκτρονικού υπολογιστή. Το μειονέκτημα που παρουσιάζουν είναι ότι αποτελούν προσεγγιστικές λύσεις των ακριβών λύσεων.

Η αριθμητική λύση διαφορικών εξισώσεων βασίζεται στην διαίρεση του χρόνου και του χώρου σε μικρά υποδιαστήματα. Γνωρίζοντας τις αρχικές τιμές των μεταβλητών κατάστασης υπολογίζονται οι νέες τιμές μετά από ένα βήμα χρόνου με την χρήση εξισώσεων που γενικά βασίζονται στο ανάπτυγμα Taylor, από τις νέες τιμές οι επόμενες, έως το τέλος του χρόνου ολοκλήρωσης. Η επιτυχία στην προσέγγιση της αναλυτικής λύσης μέσω της αριθμητικής λύσης, σε μεγάλο βαθμό βασίζεται στην επιλογή μικρού διαστήματος χρόνου και χώρου. Ως παράδειγμα αναφέρεται η αριθμητική λύση του μοντέλου της εξέλιξης του ανθρώπινου πληθυσμού, αν θεωρηθεί ότι αυξάνεται εκθετικά. Η αριθμητική λύση με βήμα χρόνου 10 ετών προσεγγίζει περισσότερο την αναλυτική λύση σε σχέση με την αριθμητική λύση με βήμα χρόνου 25 ετών (Σχήμα 2.5).



Σχήμα 2.5. Λύσεις της διαφορικής εξίσωσης της εκθετικής ανάπτυξης του ανθρώπινου πληθυσμού: με την συνεχή καμπύλη γραμμή φαίνεται η αναλυτική λύση (ακριβής λύση) και με τις τεθλασμένες γραμμές η αριθμητική λύση με βήμα χρόνου 10 έτη (μικρά τρίγωνα) και η αριθμητική λύση με βήμα χρόνου 25 έτη (μικροί κύκλοι).

3.1. Αριθμητικές μέθοδοι προσομοίωσης συστήματος που μεταβάλλεται στο χρόνο

Όπως αναφέρθηκε σε προηγούμενες παραγράφους η ανάπτυξη ενός μοντέλου προσομοίωσης αναφέρεται στην ενδεχόμενη διαίρεση του υπό προσομοίωση συστήματος σε χωρικά διαμερίσματα, στην επιλογή των μεταβλητών κατάστασης, στην γραφή των διαφορικών εξισώσεων για κάθε χωρικό διαμέρισμα και τέλος στην επίλυση του συστήματος των εξισώσεων, με συνηθέστερο τελικό προϊόν την χρονική μεταβολή των μεταβλητών κατάστασης σε κάθε χωρικό διαμέρισμα. Στην απλούστερη περίπτωση μαθηματικού μοντέλου με ένα χωρικό διαμέρισμα, οι εξισώσεις μεταβολής των μεταβλητών κατάστασης είναι συνήθεις διαφορικές εξισώσεις και το πρόβλημα επίλυσης του συστήματος είναι ένα πρόβλημα αρχικών τιμών (Initial Value Problem, IVP).

3.2. Λύση προβλήματος αρχικών τιμών με μία μεταβλητή

Ένα μοντέλο ανάπτυξης του ανθρώπινου πληθυσμού που έχει χρησιμοποιηθεί ευρύτατα στην διεθνή βιβλιογραφία είναι το μοντέλο της εκθετικής αύξησης. Στο μοντέλο αυτό μοναδική μεταβλητή κατάστασης είναι ο ανθρώπινος πληθυσμός και η διαφορική εξίσωση που περιγράφει την μεταβολή του είναι: $\frac{dP}{dt}=kP$, όπου P ο ανθρώπινος πληθυσμός και k ο ρυθμός μεταβολής αυτού. Αν δοθεί η αρχική τιμή του πληθυσμού P_0 κάποια χρονική στιγμή (π.χ. το έτος 1970) και το διάστημα ολοκλήρωσης (π.χ. 30 έτη), το μοντέλο μπορεί να επιλυθεί και να προκύψει η χρονική μεταβολή της μεταβλητής κατάστασης. Η αναλυτική λύση της διαφορικής εξίσωσης είναι η ακριβής λύση και στην περίπτωση του παραδείγματος βρίσκεται εύκολα, αλλά γενικά η εύρεση αναλυτικών λύσεων είναι συχνά δύσκολη ή και αδύνατη. Για τον λόγο αυτό η επίλυση των εξισώσεων ενός μαθηματικού μοντέλου γίνεται κατά κανόνα με την χρήση αριθμητικών μεθόδων, που είναι γνωστές ως μέθοδοι διαφορών (Difference methods) ή μέθοδοι διακριτών μεταβλητών (Discrete variable methods). Οι μέθοδοι αυτές βασίζονται στην διαίρεση του διαστήματος ολοκλήρωσης σε υποδιαστήματα με την χρήση σημείων-κόμβων και στην εύρεση των τιμών των μεταβλητών κατάστασης στα σημεία διαίρεσης. Η κάθε τιμή προκύπτει από την προηγούμενη με βάση σχέσεις που διαφέρουν μεταξύ των μεθόδων αλλά βασίζονται συνήθως στην χρήση του αναπτύγματος Taylor (Mathews 1992). Οι αριθμητικές μέθοδοι εκφράζονται μέσω αλγορίθμων και η εφαρμογή τους γίνεται εύκολα σε ηλεκτρονικό υπολογιστή. Οι αριθμητικές μέθοδοι λύσης συνήθων διαφορικών εξισώσεων είναι πολλές και διαφέρουν στην ακρίβεια. Οι μέθοδοι που παρέχουν μεγαλύτερη ακρίβεια απαιτούν μεγαλύτερο υπολογιστικό χρόνο.

Θεώρημα Taylor. Έστω συνάρτηση *y(t)* συνεχής και παραγωγίσιμη μέχρι *N+1* τάξης στο διάστημα $[t_0, b]$. Το ανάπτυγμα Taylor τάξης *N* της συνάρτησης *y(t)* περί το σημείο $t_k \in [t_0, b]$ δίδεται από την σχέση $y(t_k+h)=y(t_k)+h\cdot T_N(t_k, y(t_k))+O(h^{N+1})$, όπου $T_N(t_k, y(t_k))=\sum_{j=1}^{N}\frac{y^{(j)}(t_k)}{j!}h^{j-1}$ με $y^{(j)}(t_k)=f^{(j-1)}(t_k, y(t_k))$ να δηλώνει την παράγωγο *j-1* τάξης της συνάρτησης *f* στην θέση t_k. Ο όρος $O(h^{N+1})$ εκφράζει τους όρους του αναπτύγματος Taylor μεγαλύτερης της *N* τάξης και είναι ανάλογος της ποσότητας στην παρένθεση, δηλαδή αρκετά μικρός, εφ’ όσον το βήμα *h* επιλέγεται συνήθως πολύ μικρό. Ο όρος αυτός εκφράζει επίσης την τάξη μεγέθους του τελικού γενικού σφάλματος κατά την χρήση της μεθόδου Taylor για την επίλυση ενός προβλήματος αρχικών τιμών. Επιλέγοντας μεγάλη τιμή του *N* η ακρίβεια της μεθόδου μπορεί να γίνει οσοδήποτε μεγάλη. Σοβαρό μειονέκτημα της μεθόδου όμως αποτελεί ο υπολογισμός των παραγώγων μεγαλύτερης τάξης ο οποίος μπορεί να είναι ιδιαίτερα δύσκολος και χρονοβόρος.

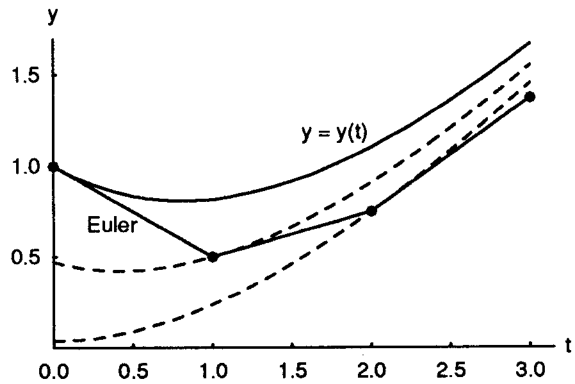
Η αριθμητική επίλυση της διαφορικής εξίσωσης ενός μοντέλου βασίζεται ακριβώς στο ανάπτυγμα Taylor. Αν $y(t_k)$ είναι η τιμή της μεταβλητής κατάστασης μία χρονική στιγμή t_k μπορεί με το ανάπτυγμα Taylor να βρεθεί η τιμή της μεταβλητής $y(t_k+h)$ τη στιγμή t_k+h μετά από χρονικό διάστημα h. Δηλαδή από την προηγούμενη τιμή βρίσκεται η επόμενη, ξεκινώντας από την αρχική τιμή της μεταβλητής y_0 στην αρχή των χρόνων. Οι διάφορες μέθοδοι επίλυσης διαφέρουν στον αριθμό των όρων του αναπτύγματος που χρησιμοποιούν άρα και στην ακρίβεια. Η απλούστερη μέθοδος που παρέχει όμως και το μεγαλύτερο σφάλμα, είναι η μέθοδος Euler.

Μέθοδος Euler. Έστω το πρόβλημα αρχικών συνθηκών $y' = f(t, y)$ για το οποίο αναζητείται λύση στο χρονικό διάστημα $[a, b]$ με $y(0)=y_0$. Αν σε ένα σύνολο σημείων t_k στο χρονικό διάστημα $[a, b]$ η ακριβής λύση της εξίσωσης έχει τιμές $y(t_k)$, θα αναζητηθεί στα αντίστοιχα σημεία ένα σύνολο τιμών y_k, όπου οι τιμές y_k θα προσεγγίζουν τις αντίστοιχες τιμές της αναλυτικής λύσης $y(t_k)$. Τα σημεία $\{(t_k, y_k)\}$ βρίσκονται ως εξής:

(α) Διαιρείται το διάστημα $[a, b]$ σε M ίσα υποδιαστήματα πλάτους $h = \dfrac{b-a}{M}$. Τα κομβικά σημεία διαίρεσης του διαστήματος (mesh points) έχουν τιμές $t_k=a+h\cdot k$ με $k=0, 1, \ldots, M$. Το εύρος των υποδιαστημάτων h καλείται βήμα (step size) και στην περίπτωση που η ανεξάρτητη μεταβλητή t είναι ο χρόνος καλείται βήμα χρόνου (time step).

(β) Θεωρώντας ότι οι συναρτήσεις $y(t)$, $y'(t)$ και $y''(t)$ είναι συνεχείς στο διάστημα $[a, b]$ χρησιμοποιείται το θεώρημα Taylor για την ανάπτυξη της $y(t)$ κατ' αρχήν περί το σημείο $t_0=a$, δηλαδή περί το αριστερό άκρο του διαστήματος ολοκλήρωσης. Για κάθε τιμή t πλησίον του t_0, ισχύει $y(t) = y(t_0) + y'(t_0)(t-t_0) + \dfrac{y''(c_1)(t-t_0)^2}{2}$, όπου c_1 είναι μία τιμή μεταξύ t_0 και t. Αν η παραπάνω σχέση χρησιμοποιηθεί για τον πρώτο κόμβο t_1, δηλαδή τεθεί $y'(t_0)=f(t_0, y(t_0))$ και $h=t_1-t_0$, προκύπτει $y(t_1) = y(t_0) + h\cdot f(t_0, y(t_0)) + \dfrac{y''(c_1)h^2}{2}$. Αν το βήμα h επιλεγεί αρκετά μικρό ο όρος δεύτερης τάξης στο δεύτερο μέλος μπορεί να αγνοηθεί και να προκύψει $y_1 = y_0 + h\cdot f(t_0, y_0)$, όπου y_1 μία προσέγγιση της ακριβούς λύσης την χρονική στιγμή t_1 και y_0 η αρχική τιμή της μεταβλητής y. Οι γενικές συντεταγμένες των σημείων ολοκλήρωσης στην παραπάνω μέθοδο έχουν τιμές $t_{k+1}=t_k+h$ και $y_{k+1}=y_k+h\cdot f(t_k, y_k)$ με $k=0, 1, \ldots, M-1$. Η εύρεση προσεγγιστικών λύσεων $\{(t_k, y_k)\}$ με την παραπάνω διαδικασία λέγεται μέθοδος Euler ή προσέγγιση Euler (Euler's approximation).

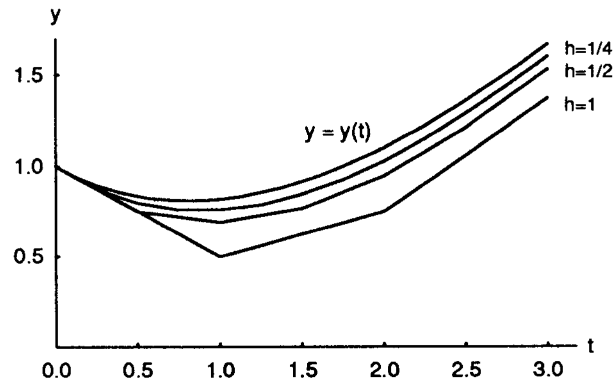
Το σφάλμα κατά την εφαρμογή της μεθόδου Euler για την εύρεση προσεγγιστικών λύσεων του προβλήματος αρχικών τιμών, επιδέχεται γεωμετρική ερμηνεία. Όταν υπολογίζεται το αόριστο ολοκλήρωμα μιας συνάρτησης $y'(t)$ στον χρόνο, προκύπτει μία οικογένεια καμπυλών $y(t)$ αντί μίας μοναδικής καμπύλης, εφ' όσον η ολοκλήρωση περιέχει την σταθερά ολοκλήρωσης που της παρέχει έναν βαθμό ελευθερίας. Στην περίπτωση όμως ενός προβλήματος αρχικών τιμών η σταθερά ολοκλήρωσης έχει συγκεκριμένη τιμή που υπολογίζεται από την αρχική τιμή της συνάρτησης $y(t_0)$ και κατά συνέπεια η λύση του προβλήματος συνίσταται στην εύρεση μίας συγκεκριμένης καμπύλης από την οικογένεια καμπυλών. Στο Σχήμα 3.1 φαίνεται με συνεχή γραμμή η καμπύλη $y(t)$ που παρέχει την ακριβή λύση ενός προβλήματος αρχικών τιμών με $y(0)=1$. Με την μέθοδο Euler ξεκινώντας από την αρχική τιμή *(t_0, y_0)* υπολογίζεται η κλίση στην θέση αυτή που είναι $m_0=f(t_0, y_0)$. Στην συνέχεια για την εύρεση του σημείου *(t_1, y_1)* γίνεται οριζόντια μετακίνηση κατά *h* και κατακόρυφη κατά $h \cdot f(t_0, y_0)$. Όπως φαίνεται από το Σχήμα, το σημείο *(t_1, y_1)* δεν βρίσκεται στην ίδια καμπύλη αλλά σε γειτονική καμπύλη της οικογένειας καμπυλών λύσεων της διαφορικής εξίσωσης και κατά συνέπεια αποτελεί προσεγγιστική λύση της ακριβούς λύσης της διαφορικής εξίσωσης.



Σχήμα 3.1. Γεωμετρική ερμηνεία του σφάλματος στην εύρεση προσεγγιστικών λύσεων προβλήματος αρχικών τιμών με την μέθοδο Euler.

Η εφαρμογή της μεθόδου Euler και γενικότερα των μεθόδων διαφορών για την επίλυση προβλημάτων αρχικών τιμών βασίζεται στην διαίρεση του διαστήματος ολοκλήρωσης σε υποδιαστήματα εύρους *h* με την χρήση κόμβων t_k και στον υπολογισμό των τιμών $y_{k+1}=y_k+h \cdot \Phi(t_k, y_k)$ στους κόμβους. Η συνάρτηση *Φ* καλείται γενικά στις μεθόδους διαφορών συνάρτηση αύξησης (increment function) και ειδικά η τιμή της στην μέθοδο Euler δόθηκε στις προηγούμενες παραγράφους. Όταν εφαρμόζονται οι μέθοδοι διαφορών για την εύρεση προσεγγιστικών λύσεων σε προβλήματα αρχικών τιμών, αναγνωρίζονται δύο είδη σφαλμάτων, τα σφάλματα διακριτότητας (discretization errors) και τα σφάλματα αποκοπής (round-off errors).

Αν $\{(t_k, y_k)\}$ με $k=0, 1, \ldots, M$ είναι οι προσεγγίσεις των λύσεων προβλήματος αρχικών τιμών και $y=y(t)$ είναι η ακριβής λύση ορίζεται το γενικό σφάλμα διακριτότητας (global discretization error) ως $e_k=y(t_k)-y_k$ με $k=1, 2, \ldots, M$. Εκφράζει την διαφορά μεταξύ της ακριβούς λύσης και της προσεγγιστικής λύσης με την μέθοδο διαφορών. Για την εκτίμηση του συνολικού σφάλματος σε μία προσεγγιστική λύση ενός προβλήματος αρχικών τιμών χρησιμοποιείται συνήθως το γενικό σφάλμα διακριτότητας στο τελευταίο βήμα που καλείται τελικό γενικό σφάλμα (Final Global Error, FGE). Για *M* υποδιαστήματα εύρους *h* του διαστήματος ολοκλήρωσης *[a, b],* το τελικό γενικό σφάλμα είναι $E(y(b),h)=\left|y(b)-y_M\right|$. Για την μέθοδο Euler το τελικό γενικό σφάλμα είναι ανάλογο του εύρους υποδιαστήματος *h,* δηλαδή μείωση του εύρους υποδιαστήματος στο μισό προκαλεί υποδιπλασιασμό του τελικού γενικού σφάλματος (Σχήμα 3.2).



Σχήμα 3.2. Σύγκριση των προσεγγίσεων Euler στο πρόβλημα αρχικών τιμών *y'=(t-y)/2* στο διάστημα *[0, 3]* με αρχική συνθήκη *y(0)=1*, για βήματα χρόνου 1, ½ και ¼.

Μέθοδοι Runge-Kutta. Οι μέθοδοι Runge-Kutta (Mathews 1992) βασίζονται στο ανάπτυγμα Taylor και χρησιμοποιούν περισσότερους όρους από την Euler. Όμως στους επιπλέον όρους που περιέχουν παραγώγους δεύτερης, τρίτης τάξης κλπ, χρησιμοποιούνται κατάλληλες προσεγγίσεις που τελικά δεν απαιτούν τον υπολογισμό των τιμών των παραγώγων. Τελικά δηλαδή επιτυγχάνουν ακρίβεια αντίστοιχη του αναπτύγματος Taylor με περισσότερους όρους από την Euler, χωρίς όμως να απαιτούν τον υπολογισμό παραγώγων.

Οι συνηθέστερα χρησιμοποιούμενες μέθοδοι Runge-Kutta είναι της δεύτερης τάξης, RK2 (αντίστοιχη του αναπτύγματος Taylor μέχρι και τον όρο με τη δεύτερη παaράγωγο) και της τέταρτης τάξης RK4 (αντίστοιχη του αναπτύγματος Taylor μέχρι και τον όρο με την τέταρτη παράγωγο). Αντί του υπολογισμού των παραγώγων, στις μεθόδους Runge-Kutta γίνονται πολλαπλοί υπολογισμοί της υπό ολοκλήρωση συνάρτησης σε κάθε βήμα ολοκλήρωσης. Η τεχνική αυτή αυξάνει τον αριθμό των υπολογισμών αλλά δεν απαιτεί δύσκολους υπολογισμούς όπως είναι οι υπολογισμοί των παραγώγων στις μεθόδους Taylor. Κατά συνέπεια οι μέθοδοι Runge-Kutta ενδείκνυνται για την επίλυση προβλημάτων αρχικών τιμών με τη χρήση ηλεκτρονικού υπολογιστή. Η περισσότερο διαδεδομένη μέθοδος είναι η Runge-Kutta τέταρτης τάξης (RK4) που παρέχει ικανοποιητική ακρίβεια, σταθερότητα και εκφράζεται εύκολα με την μορφή αλγορίθμου. Αν επιδιώκεται μεγαλύτερη ακρίβεια προτιμότερη είναι η μείωση του βήματος ολοκλήρωσης σε σχέση με την χρήση μεθόδου μεγαλύτερης τάξης.

Η μέθοδος Runge-Kutta τέταρτης τάξης προσομοιάζει την αντίστοιχης τάξης μέθοδο Taylor. Συγκεκριμένα ο άγνωστος όρος y_{k+1} γράφεται $y_{k+1} = y_k + w_1 \cdot k_1 + w_2 \cdot k_2 + w_3 \cdot k_3 + w_4 \cdot k_4$ με τους όρους $w_i \cdot k_i$ να χρησιμοποιούνται στην θέση των όρων που περιέχουν παραγώγους στο ανάπτυγμα Taylor τέταρτης τάξης. Οι ποσότητες k_1, k_2, k_3 και k_4 δίδονται από τις σχέσεις:

$$k_1 = h \cdot f(t_k, y_k)$$

$$k_2 = h \cdot f(t_k + a_1 \cdot h, y_k + b_1 \cdot k_1)$$

$$k_3 = h \cdot f\left(t_k + a_2 \cdot \mathrm{h}, \mathrm{y}_k + b_2 \cdot k_1 + b_3 \cdot k_2\right)$$

$$k_4 = h \cdot f\left(t_k + a_3 \cdot \mathrm{h}, \mathrm{y}_k + b_4 \cdot k_1 + b_5 \cdot k_2 + b_6 \cdot k_3\right)$$

. Οι Runge και Kutta εξισώνοντας τους όρους

$w_i \cdot k_i$ με τους αντίστοιχους όρους του αναπτύγματος Taylor τέταρτης τάξης δημιούργησαν σύστημα εξισώσεων για τον υπολογισμό των αγνώστων w_i, a_i και b_i. Από την επίλυση του συστήματος προκύπτουν οι παρακάτω τιμές για τους αγνώστους: $a_1=1/2$, $a_2=1/2$, $a_3=1$, $b_1=1/2$, $b_2=0$, $b_3=1/2$, $b_4=0$, $b_5=0$, $b_6=1$, $w_1=1/6$, $w_2=1/3$, $w_3=1/3$ και $w_4=1/6$. Οπότε τελικά ξεκινώντας από την αρχική συνθήκη (t_0, y_0) υπολογίζονται διαδοχικά οι τιμές y_{k+1} από την σχέση $y_{k+1}=y_k+\frac{h\cdot(f_1+2f_2+2f_3+f_4)}{6}$, όπου $f_1=f(t_k,y_k)$, $f_2=f\left(t_k+\frac{h}{2},y_k+\frac{h}{2}f_1\right)$, $f_3=f\left(t_k+\frac{h}{2},y_k+\frac{h}{2}f_2\right)$ και $f_4=f(t_k+h,y_k+h\cdot f_3)$.

Το τελικό γενικό σφάλμα στην επίλυση προβλήματος αρχικών τιμών με την μέθοδο Runge-Kutta τέταρτης τάξης είναι ανάλογο της τέταρτης δύναμης του h.

Η μέθοδος Runge-Kutta δεύτερης τάξης προσομοιάζει το ανάπτυγμα Taylor δεύτερης τάξης και το τελικό γενικό σφάλμα που παρέχει είναι ανάλογο της δεύτερης δύναμης του h. Αναπτύσσεται με την ίδια λογική και οδηγεί σε δύο τύπους λύσεων: Ο πρώτος τύπος παρέχει τον γενικό όρο y_{k+1} από την σχέση $y_{k+1}=y_k+\frac{h}{2}[f(t_k,y_k)+f(t_k+h,y_k+h\cdot f(t_k,y_k))]$. Ο δεύτερος τύπος λύσης παρέχει τον γενικό όρο $y_{k+1}=y_k+h\cdot f\left(t_k+\frac{h}{2},y_k+\frac{h}{2}f(t_k,y_k)\right)$ και η μέθοδος είναι γνωστή ως τροποποιημένη μέθοδος Euler-Cauchy (modified Euler-Cauchy method).

3.3. Λύση προβλήματος αρχικών τιμών με δύο ή περισσότερες μεταβλητές

Τα μοντέλα που αναπτύσσονται για την προσομοίωση φυσικών συστημάτων σπανίως περιέχουν μία μεταβλητή κατάστασης. Ενδεικτικά αναφέρονται τα μοντέλα τύπου Lotka-Volterra, που χρησιμοποιούνται συχνά στην μελέτη της δυναμικής πληθυσμών και περιγράφουν την εξέλιξη στον χρόνο ενός ζεύγους θηρευτή-θηράματος. Ένα μοντέλο του τύπου αυτού σε μαθηματική μορφή εκφράζεται με τις σχέσεις $x'=f(t,x,y)=x-x\cdot y-\frac{x^2}{10}$ και $y'=g(t,x,y)=y\cdot x-y-\frac{y^2}{10}$, όπου x και y οι μεταβλητές κατάστασης του μοντέλου (πχ θήραμα και θηρευτής). Όπως και στην περίπτωση των μοντέλων με μία μεταβλητή κατάστασης, αν δίδονται οι αρχικές συνθήκες, για παράδειγμα $x(0)=2$ και $y(0)=1$ και το διάστημα ολοκλήρωσης για παράδειγμα $0\le t\le 30$, το σύστημα μπορεί να επιλυθεί και να προκύψει η χρονική μεταβολή των μεταβλητών κατάστασης. Οι αριθμητικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται είναι αυτές που αναλυτικά περιγράφηκαν παραπάνω για την περίπτωση μοντέλων με μία μεταβλητή, με την διαφορά ότι η λύση στην περίπτωση αυτή δεν αφορά μία εξίσωση αλλά ένα σύστημα εξισώσεων.

Ως παράδειγμα δίδεται το γενικό πρόβλημα αρχικών τιμών με δύο μεταβλητές $\frac{dx}{dt}=f(t,x,y)$, $\frac{dy}{dt}=g(t,x,y)$ με $x(t_0)=x_0$ και $y(t_0)=y_0$ για το οποίο αναζητείται λύση στο διάστημα $[a, b]$. Το σύστημα αυτό μπορεί να λυθεί με οποιαδήποτε από τις μεθόδους αναπτύχθηκαν παραπάνω και ενδεικτικά παρουσιάζεται η λύση με την μέθοδο Runge-Kutta τέταρτης τάξης, που είναι και η συχνότερα χρησιμοποιούμενη μέθοδος.

Το διάστημα *[a, b]* υποδιαιρείται σε υποδιαστήματα εύρους *h* με την βοήθεια των κόμβων $t_{k+1}=t_k+h$. Οι γενικοί όροι της λύσης με την μέθοδο Runge-Kutta τέταρτης τάξης είναι

$x_{k+1}=x_k+\frac{h}{6}(f_1+2f_2+2f_3+f_4)$ και $y_{k+1}=y_k+\frac{h}{6}(g_1+2g_2+2g_3+g_4)$, όπου:

$f_1=f(t_k, x_k, y_k)$, $f_2=f(t_k+\frac{h}{2}, x_k+\frac{h}{2}f_1, y_k+\frac{h}{2}g_1)$, $f_3=f(t_k+\frac{h}{2}, x_k+\frac{h}{2}f_2, y_k+\frac{h}{2}g_2)$,

$f_4=f(t_k+h, x_k+h\cdot f_3, y_k+h\cdot g_3)$ και $g_1=g(t_k, x_k, y_k)$, $g_2=g(t_k+\frac{h}{2}, x_k+\frac{h}{2}f_1, y_k+\frac{h}{2}g_1)$,

$g_3=g(t_k+\frac{h}{2}, x_k+\frac{h}{2}f_2, y_k+\frac{h}{2}g_2)$ και $g_4=g(t_k+h, x_k+h\cdot f_3, y_k+h\cdot g_3)$.