Obyčejné diferenciální rovnice

1 Úvod

Obyčejnou diferenciální rovnici N-tého řádu

$$f\left(x, y, y', y'', \ldots, y^{(N)}\right) = g(x)$$

převádíme na soustavu N diferenciálních rovnic 1. řádu. Provedeme substituce

$$y' \equiv z_1 \qquad y'' \equiv z_2 \qquad \ldots \qquad y^{(N-1)} \equiv z_{N-1}$$

a dostaneme soustavu

$$\begin{aligned} y' = z_1 \qquad z_1' = z_2 \qquad & \ldots \qquad z_{N-2}' = z_{N-1} \\ f(x, y, z_1, \ldots, & z_{N-1}, z_{N-1}') = g(x) \end{aligned}$$

Poslední rovnici lze obvykle rozřešit vzhledem k z_{N-1}', pak ji lze psát ve tvaru

$$z_{N-1}' = \tilde{g}(x, y, z_1, \ldots, z_{N-1}).$$

K jednoznačnosti řešení musí N rovnic prvního řádu (1 rovnice N-tého řádu) splňovat N podmínek.

Podle zadání podmínek rozlišujeme 2 základní úlohy

- **Počáteční problém** – $\forall$ podmínky jsou zadány v jednom bodu (mohu přímo sledovat řešení vycházející z tohoto bodu)
- **Okrajový problém** – $\forall$ podmínky nejsou zadány v jednom bodu – nejčastěji jsou podmínky zadány ve 2 bodech na okrajích, ale mohou být i jiné, např. integrální podmínky

2 Runge-Kuttovy metody pro řešení počátečního problému

2.1 Eulerova metoda

Systém rovnic vektorově

$$\frac{\mathrm{d}\,\vec{y}}{\mathrm{d}\,x} = \vec{f}(x,\,\vec{y})$$

Počáteční podmínky zadávají řešení v bodu x_0, řešení budeme hledat postupně v bodech $x_1,\,x_2,\ldots,x_n$. Přibližnou hodnotu řešení v bodě x_{k+1} nalezneme s pomocí 2 členů Taylorova rozvoje v bodě x_k. Označme $h_k = x_{k+1} - x_k$. Pak

$$\vec{y}_{k+1} \approx \vec{y}_k + h_k \cdot \left.\frac{\mathrm{d}\,\vec{y}}{\mathrm{d}\,x}\right|_{x_k} = \vec{y}_k + h_k \cdot \vec{f}(x_k,\,\vec{y}_k)$$

Nejnižší zanedbaný člen určuje odhad chyby k-tého kroku Eulerovy metody

$$\vec{\varepsilon}_k = \vec{y}(x_{k+1}) - \vec{y}_{k+1} \approx \frac{h_k^2}{2}\left.\frac{\mathrm{d}^2\,\vec{y}}{\mathrm{d}\,x^2}\right|_{x_k} = \frac{h_k^2}{2}\left.\frac{\mathrm{d}\,\vec{f}(x,\vec{y})}{\mathrm{d}\,x}\right|_{x_k} = \frac{h_k^2}{2}\left(\frac{\partial\vec{f}}{\partial x} + \sum_j f_j\,\frac{\partial\vec{f}}{\partial y_j}\right)$$

Chyba 1 kroku je tedy úměrná h^2, počet kroků v daném intervalu $x \in \langle a, b\rangle$ je $N = (b-a)/h$ a tedy celková chyba je úměrná

$$\|\vec{\varepsilon}\| \sim N \cdot h^2 \sim h$$

Eulerova metody je metoda 1. řádu (přesnosti). Je tedy málo přesná, vyžaduje velmi krátký krok, a proto se v praxi používá jen zřídka.

<u>*Pozn.*</u> Protože $\forall$ vzorce pro systém rovnic jsou jen jednoduchým vektorovým zobecněním vzorců pro 1 rovnici, budeme dále studovat řešení 1 diferenciální rovnice 1. řádu.

Konvergence Eulerovy metody

Nechť je diferenciální rovnice $y' = f(x, y)$ s počáteční podmínkou $y(x_0) = y_0$. Nechť v oblasti $D = \{(x, y),\ x_0 \le x \le X,\ |y - y_0| \le b\}$ je funkce $f(x, y)$ spojitá a ohraničená $|f(x, y)| < A$. Nechť dále $X - x_0 \le b/A$ a nechť na množině D $\exists L > 0$ takové, že platí **Lipschitzova podmínka**

$$|f(x, z) - f(x, y)| \le L|z - y| \quad .$$

Potom pro $h \to 0$ platí

1. posloupnost $y_n(x)$ konverguje k $\varphi(x)$,
2. $\varphi(x) \in \mathcal{C}^1$ je řešení diferenciální rovnice na $x_0 \le x \le X$,
3. neexistuje na $x_0 \le x \le X$ žádné jiné řešení vyhovující počáteční podmínce.

Pozn. Ke splnění Lipshitzovy podmínky stačí, aby funkce f měla v dané oblasti omezenou parciální derivaci podle y.

2.2 Metody Taylorova typu

Metody vyššího řádu, které by využívaly Taylorova rozvoje, se v praxi nepoužívají. Potřebují vyšší derivace y a tedy parciální derivace funkce f podle x a y. Např. Taylorova metoda 2. řádu by byla

$$\begin{aligned} y_{k+1} &= y_k + h_k\, f(x_k, y_k) + \frac{h_k^2}{2}\,\frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}\, x^2} = \\ &= y_k + h_k\, f(x_k, y_k) + \frac{h_k^2}{2}\left(\left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{(x_k, y_k)} + f(x_k, y_k)\cdot \left.\frac{\partial f}{\partial y}\right|_{(x_k, y_k)}\right) \end{aligned}$$

Pozn. Taylorův rozvoj je ale důležitý pro odvození jiných metod, stanovení jejich řádu apod.

2.3 Princip Runge–Kuttových metod

Jsou to v praxi velmi často používané metody. K nalezení řešení $y_{n+1} = y(x_{n+1})$ se využívá pouze předchozího bodu (x_n, y_n), nevyužívá bodů s indexem $k < n$. Takové metody nazýváme jednokrokové.

Metody Runge-Kutta jsou založeny na postupném zpřesňování hodnot v bodech mezi x_n a x_{n+1} včetně (obvykle se využívá bodu $x_n + h_n/2$). Výpočetní vzorec Runge–Kuttovy metody má tvar

$$y_{n+1} = y_n + h\Phi_{RK}(x_n, y_n, h) \quad ,$$

kde

$$\Phi_{RK}(x_n, y_n, h) = p_{r1}k_1(h) + p_{r2}k_2(h) + \ldots + p_{rr}k_r(h) \quad ,$$

a dále

$$\begin{aligned}
k_1(h) &= f(x_n, y_n) \\
k_2(h) &= f(x_n + \alpha_2 h, y_n + h\beta_{21}k_1) \\
&\vdots \\
k_r(h) &= f\left[x_n + \alpha_r h, y_n + h(\beta_{r1}k_1 + \beta_{r2}k_2 + \ldots + \beta_{r,r-1}k_{r-1})\right]
\end{aligned}$$

Pokud zvolíme $r = 1$, dostaneme Eulerovu metodu. Pro $r \leq 4$ se řád metody může rovnat r (chyba 1 kroku $\sim h^{r+1}$). Pro konstrukci metody 5. řádu je však zapotřebí alespoň $r = 6$.

2.4 Ukázka konstrukce – Runge–Kuttova metody 2. řádu

Zvolíme tedy $r = 2$ a můžeme odvodit

$$\begin{aligned}
\Phi_{RK}(x_n, y_n, h) &= p_{21}f(x_n, y_n) + p_{22}f(x_n + \alpha_2 h, y_n + \beta_{21}hf(x_n, y_n)) = \\
&= \Phi_{RK}(x_n, y_n, 0) + h\Phi'_{RK}(x_n, y_n, 0) + O(h^2) = \\
&= p_{21}f(x_n, y_n) + p_{22}f(x_n, y_n) + hp_{22}\left[f_x(x_n, y_n)\alpha_2 + \right. \\
&+ \left. f_y(x_n, y_n)\beta_{21}f(x_n, y_n)\right] + O(h^2) \quad ,
\end{aligned}$$

kde $f_x \equiv \partial f/\partial x$, $f_y \equiv \partial f/\partial y$ a Φ' je derivace Φ podle h.

Porovnáme výrazy u nulté a první mocniny h funkce Φ_{RK} s přírůstkem Φ_T $(y(x_n + h) = y(x_n) + h\Phi_T)$ vyjádřeným z Taylorova rozvoje

$$\Phi_T = f(x_n, y_n) + \frac{h}{2}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} + O(h^2) = f(x_n, y_n) + \frac{h}{2}(f_x + f \cdot f_y) + O(h^2)$$

a dostaneme

$$\begin{aligned} h^0 &: p_{21} + p_{22} = 1 \\ hf_x &: p_{22}\alpha_2 = \frac{1}{2} \\ hf_y &: p_{22}\beta_{21} = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Tato soustava má nekonečně mnoho řešení, ale logice Runge-Kuttových metod odpovídají následující 2 řešení řešení.

1. Řešení $\alpha_2 = 1$, $\beta_{21} = 1$ a $p_{21} = p_{22} = 1/2$ dává metodu analogickou lichoběžníkové metodě integrace. Zde je

$$k_2 = f\left(x_n + h, y_n + hf(x_n, y_n)\right) \qquad \text{a} \qquad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) \quad .$$

2. Řešení $\alpha_2 = \beta_{21} = 1/2$, $p_{21} = 0$ a $p_{22} = 1$ dává metodu analogickou obdélníkové metodě integrace. Zde je

$$k_2 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} f(x_n, y_n)\right) \qquad \text{a} \qquad y_{n+1} = y_n + hk_2 \quad .$$

2.5 Klasická Runge–Kuttova metoda čtvrtého řádu

Klasická Runge–Kuttova metoda čtvrtého řádu je jednou z nejpoužívanějších metod tohoto typu. K výpočtu jednoho kroku se používají tyto vztahy

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_n, y_n) \\ k_2 &= f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}\, k_1) \\ k_3 &= f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}\, k_2) \\ k_4 &= f(x_n + h, y_n + h\, k_3) \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{6}\,(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \end{aligned}$$

Chyba jednoho kroku metody je $\varepsilon_1 \sim h^5$, chyba metody v zadaném intervalu se zvětšuje lineárně s počtem kroků $N \sim h^{-1}$ a tedy $\varepsilon \sim h^4$.

2.6 Odhad chyby a automatická volba kroku

Existují 2 metody odhadu chyby pro automatickou volbu kroku

1. Srovnání výsledku 2 kroků o délce h s výsledkem 1 kroku o délce $2h$
2. Srovnání výsledku 2 Runge–Kuttových metod různého řádu $\rightarrow$ vnořené RK metody (viz následující odstavec)

Srovnáme výsledky získané se dvěma kroky h a s jedním krokem $2h$. V následujících vztazích je Δ odhad chyby.

$$\begin{aligned} y(x+2h) &= y_h + 2C\,h^5 + O(h^6) + \ldots \\ y(x+2h) &= y_{2h} + C\,(2h)^5 + O(h^6) + \ldots \\ \Delta &\equiv \frac{y_h - y_{2h}}{15} = 2C\,h^5 + O(h^6) \end{aligned}$$

Veličina Δ je tedy odhadem chyby y_h.

Je-li známa požadovaná maximální lokální chyba Δ_0 a při kroku h je odhadovaná chyba Δ, postupujeme takto:

- Je-li $|\Delta| \le |\Delta_0|$, krok přijmeme a zvětšíme velikost následujícího kroku. Protože $h \sim \sqrt[5]{\Delta}$, zvětšíme krok na

  $$h' = S\ h\ \sqrt[5]{\left|\frac{\Delta_0}{\Delta}\right|}\ ,$$

  kde $S \simeq 0.9$ je bezpečnostní faktor. Obvykle při zvětšování kroku omezujeme maximální velikost poměru h'/h (typicky $h'/h \le 4$).

- Je-li $|\Delta| > |\Delta_0|$, krok nelze přijmout, výpočet provedeme znovu. Při zmenšování kroku vezmeme v úvahu, že chyba kroku je násobena počtem kroků $N \sim h^{-1}$. Jde tedy o metodu 4-tého řádu a krok zmenšíme na

  $$h' = S\ h\ \sqrt[4]{\left|\frac{\Delta_0}{\Delta}\right|}\ .$$

Obvykle požadujeme lokální relativní chybu řešení $\leq \varepsilon$. Požadované relativní přesnosti zřejmě nelze dosáhnout pro $y = 0$. Při odhadu chyby proto přidáme odhad změny v 1 kroku a navíc přidáme malou povolenou absolutní chybu δ, protože nelze apriori vyloučit případ $y = y' = 0$. Pak vypočteme

$$\Delta_0 = \varepsilon \left(|y| + h \left| \frac{\mathrm{d}\, y}{\mathrm{d}\, x} \right| \right) + \delta = \varepsilon \left(|y| + h \, |f(x,y)| \right) + \delta$$

Pro soustavu rovnic jde vektor $\vec{\Delta}_0$, jeho složky Δ_{0i} určujeme stejným způsobem. Krok vybíráme tak, aby podmínka $\Delta_i < \Delta_{0i}$ platila pro $\forall$ složky řešení.

Zpřesnění výsledku Výsledek vypočtený RK metodou 4. řádu můžeme zpřesnit použitím vztahu

$$y(x+2h) = \frac{16}{15} y_h - \frac{1}{15} y_{2h} + O(h^6) = y_h + \Delta + O(h^6) \quad .$$

Tím získáme metodu 5. řádu přesnosti.

2.7 Vnořené (embedded) Runge–Kutta metody

Těmto metodám se říká i Runge–Kutta–Fehlbergovy, jde o modernější přístup k adaptivní volbě integračního kroku.

Pro metody více než 4 řádu, musíme použít více přibližných vyjádření derivace než je řád metody. Například pro metodu 5. řádu je nutno sestavit kombinaci

$$y_{n+1} = y_n + c_1\, k_1 + c_2\, k_2 + \ldots + c_6\, k_6 + O(h^6)$$

Lze ale zvolit taková $k_1, k_2, \ldots, k_6$, že z nich lze vytvořit i kombinaci, která dává metodu 4. řádu

$$y^*_{n+1} = y_n + c^*_1\, k_1 + c^*_2\, k_2 + \ldots + c^*_6\, k_6 + O(h^5)$$

Tato formule se nazývá vnořená. Chybu metody můžeme odhadnout vztahem

$$\Delta \equiv y_{n+1} - y^*_{n+1} = \sum_{i=1}^{6} (c_i - c^*_i) k_i \quad .$$

Použití vnořené formule podstatně zmenšuje počet nutných vyčíslení funkce $f(x,y)$.

Spojité Runge–Kuttovy metody (dense output)

Aby byla Runge–Kuttova metoda efektivní, používáme velká h. Z různých důvodů, například pro vykreslení grafu, potřebujeme často znát hodnoty v mezilehlých bodech. Do čtvrtého řádu metody včetně lze hodnoty v mezilehlých bodech spočítat Hermiteovou interpolací z hodnot y_i, $y_i' = f(x_i, y_i)$, y_{i+1} a $y_{i+1}' = f(x_{i+1}, y_{i+1})$.

Pro metody vyššího řádu používáme speciální metody pro spojité RK. Obvykle jsou k s v metodě použitým k_i přidány ještě další k_i, kde $i = s+1, \dots, s^*$, a rozdíl $s^* - s$ je roven dvěma nebo třem. Ty pak umožní, aby přesnost interpolace nebyla horší než přesnost integrace systému ODE.

2.8 Lokální a globální chyba Runge-Kuttových metod

Věta o lokální chybě Nechť je dána rovnice $y' = f(x, y)$, kde funkce f v okolí bodu (x_0, y_0) má $\forall$ spojité parciální derivace řádu $k \le p$. Nechť

$$y_1 = y(x_0) + h\Phi(x_0, y_0, h) = y(x_0) + h \sum_{i=1}^{r} p_{ri} k_i(x_0, y_0, h)$$

je krok RK metody p-tého řádu. Index $^{(p)}$ značí p-tou derivaci. Pak

$$\begin{aligned} |y_1 - y(x_0 + h)| \ &\le \ h^{p+1} \left(\frac{1}{(p+1)!} \max_{t \in (0,1)} \left| y^{(p+1)}(x_0 + t.h) \right| + \right. \\ &+ \ \left. \frac{1}{p!} \sum_{i=1}^{r} |p_{ri}| \max_{t \in (0,1)} \left| k_i^{(p)}(t.h) \right| \right) \end{aligned}$$

Věta o globální chybě Nechť pro lokální chybu RK metody platí

$$|y(x+h) - y(x) - h\ \Phi_{RK}[x, y(x), h]| \le C h^{p+1}$$

a nechť $\exists \Lambda > 0$ takové, že v nějakém okolí řešení platí

$$|\Phi_{RK}(x, z, h) - \Phi_{RK}(x, y, h)| \le \Lambda |z - y| \quad .$$

Pak pro přesnost numerického řešení y_N v bodě x_N platí

$$\delta = |y_N - y(x_N)| \le h^p \, \frac{C}{\Lambda} \{\exp[\Lambda(x_N - x_0)] - 1\}$$

2.9 Vlastnosti Runge–Kuttových metod

Runge–Kuttovy metody jsou velmi robustní – fungují téměř vždy, jsou velmi odolné k vlastnostem funkce f (absence derivace, příp. skoky). Jsou to samostartující metody (není třeba na začátku použít jiné metody). Jsou jednoduché a dostupné v numerických knihovnách. Hodí se zvlášť, pokud není vyžadována vysoká přesnost.

Nevýhodou je relativně vysoký počet výpočtů funkce f na jeden krok (při složitém výpočtu f je metoda pomalá). Nehodí se pro řešení tzv. stiff rovnic (rovnic se "silným tlumením").

Nespojitost funkce f

Funkce f je často nespojitá nebo má nespojité derivace. Například

$$y' = \begin{cases} f_I(x,y) & \text{pro } g(x,y) \geq 0 \\ f_{II}(x,y) & \text{pro } g(x,y) < 0 \end{cases}$$

Možné strategie řešení tohoto problému:

1. Ignorujeme nespojitost a doufáme, že si nastavení kroku poradí samo.
2. Použijeme tzv. singularity detecting codes.
3. Hledáme bod nespojitosti a restartujeme výpočet od tohoto bodu metodu. Postup obvykle zmenší chybou i počet kroků.

Některé obecnější pojmy

O libovolné jednokrokové metodě, pro kterou platí vztah $y_{i+1} = y_i + h\Phi(x_i, y_i, h)$, říkáme, že je **konzistentní**, pokud

$$\lim_{h\to 0} \Phi(x,y,h) = f(x,y) \quad \text{pro} \quad \forall(x,y) \quad .$$

Metoda je **regulární**, pokud existuje konstanta L, $(x,y) \in G$, $(x,\tilde{y}) \in G$ a $h \in \langle 0, H\rangle$ tak, že platí

$$|\Phi(x,y,h) - \Phi(x,\tilde{y},h)| \leq L|y-\tilde{y}| \quad .$$

Věta Každá jednokroková regulární a konzistentní metoda je konvergentní.

Vliv zaokrouhlovacích chyb

Katastrofické případy – Příliš malý krok $x_i + h = x_i$ v x. Příliš malý krok se může projevit i v y, které zůstane $y_i + (y_{i+1} - y_i) = y_i$ konstantní po mnoha krocích, ač bez zaokrouhlování může být změna y nezanedbatelná.

Kumulace chyb – Označme $\tilde{\alpha}$ chybu výpočtu Φ a chybu při přičtení změny $y(x, y)$ označme $\tilde{\beta}$. Pak tedy

$$y_{i+1} = y_i + h(\Phi(x_i, y_i, h) + \tilde{\alpha}) + \tilde{\beta} \quad .$$

Pokud provedeme N kroků o velikosti $N \sim \frac{1}{h}$, dosáhneme nejvýše (pokud mají všechny chyby stejné znaménko) celkové chyby

$$|E| \simeq N \left(h\,|\tilde{\alpha}| + |\tilde{\beta}|\right) \sim |\tilde{\alpha}| + \frac{|\tilde{\beta}|}{|h|} \quad .$$

Zaokrouhlovací chyby tedy rostou při zmenšování kroku h. Na druhé straně chyba metody roste při zvětšování h. Existuje tedy optimální krok h z hlediska přesnosti.

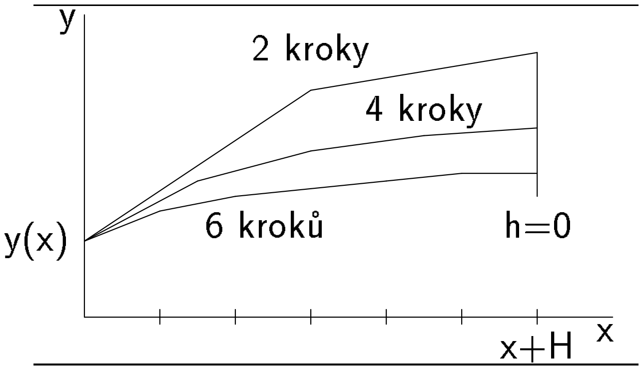
3 Bulirsch–Stoerova metoda

Je to moderní jednokroková metoda založená na Richardsonově extrapolaci na $h = 0$. Tím je podobná Rombergově integraci. Tato metoda se nehodí, pokud

- funkce f nejsou dostatečně hladké (např. pokud jsou zadané, tabulkou)
- má zadaná rovnice singulární bod.

Postupujeme takto:

1. Výpočet provedeme pro několik h, z nichž žádné není dost malé pro zadanou přesnost. Předpokládáme, že výsledek je analytickou funkcí h.
2. Pro výpočet jednotlivých kroků použijeme sudou metodu, kde chyba metody $\Delta_h \sim h^2$.
3. Výsledek extrapolujeme na $h = 0$ racionální lomenou funkcí h^2.



Obr. 1: Bulirsch–Stoerova metoda

Výpočet provádíme s posloupností počtu kroků $n = 2, 4, 6, 8, 12, 16, 24, \ldots$, tedy s posloupností, pro kterou platí $n_0 = 2$, $n_1 = 4$, $n_2 = 6$ a $n_j = 2n_{j-2}$ pro $j = 3, 4, \ldots$. Nejvyšší počet kroků se obvykle stanovuje jako $j = 10$, tedy $n_{10} = 96$. Extrapolaci provádíme z menšího počtu prvků, maximálně ze sedmi.

3.1 Výpočet jednotlivých kroků

Používáme modifikovanou metodu středního bodu. Máme rovnice

$$
\begin{aligned}
z_0 &\equiv y(x) \\
z_1 &= z_0 + hf(x, z_0) \\
&\vdots \\
z_{m+1} &= z_{m-1} + 2hf(x + mh, z_m), \quad \text{kde} \quad m = 1, 2, \ldots, n-1
\end{aligned}
$$

Potom

$$y(x+H) \approx y_n = \frac{1}{2}[z_n + z_{n-1} + hf(x+H, z_n)]$$

Chyba metody je dána vztahem

$$\Delta = y_n - y(x+H) = \sum \alpha_i h^{2i} \quad ,$$

Jde tedy o metodu 2. řádu, rozvoj chyby obsahuje pouze sudé mocniny h. Pokud extrapolujeme ze 2 výsledků pro n_k a n_{k-1} dostaneme metodu čtvrtého řádu přesnosti ($O(h^4)$). Při extrapolaci ze 7 výsledků získáme čtrnáctý řád přesnosti.

Bullirsch-Stoerova metoda je metoda vysokého řádu. Hodí se, pokud je požadována vysoká přesnost řešení a funkce $\vec{f}$ je hladká. Nehodí se pro stiff rovnice.

4 Vícekrokové metody

Vícekrokové metody vyžívají k výpočtu y v bodu x_{n+1} nejen hodnoty a derivace v x_n, ale i v bodech předchozích. Takové metody tedy nejsou samostartující, ale snižují počet nutných vyčíslení funkce f.

Obecně můžeme vyjádřit vícekrokovou metodu ve tvaru

$$y_{i+1} = \sum_{j=1}^{k} a_j y_{i+1-j} + h \sum_{j=0}^{k} b_j f_{i+1-j} \quad .$$

Pokud je $b_0 = 0$, metodu nazýváme **explicitní**. V případě $b_0 \neq 0$ se jedná o metodu **implicitní**, musíme tedy řešit v obecnosti nelineární rovnici pro y_{i+1} (systém nelineárních rovnic pro $\vec{y}_{i+1}$).

4.1 Adamsovy metody

Velmi známé jsou Adamsovy metody založené na integraci Lagrangeova extrapolačního (nebo interpolačního) polynomu. Jediný nenulový koeficient a je koeficient $a_1 = 1$. Interpolována je tedy jen derivace a tedy je použito více koeficientů b_j.

Adams–Bashforthovy metody

Jsou to explicitní metody $b_0 = 0$. Jako příklad uvedeme metodu 4. řádu

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24}\left(55y'_i - 59y'_{i-1} + 37y'_{i-2} - 9y'_{i-3}\right) + O(h^5) \quad ,$$

kde $y'_k = f(x_k, y_k)$.

Adams–Moultonovy metody

Jsou to implicitní metody. Metoda 4. řádu má tvar

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24}\left(9y'_{I+1} + 19y'_i - 5y'_{i-1} + y'_{i-2}\right) + O(h^5) \quad .$$

Máme tedy $y'_{i+1} = f(x_{i+1}, y_{i+1})$, tedy y_{i+1} je dáno rovnicí (systém rovnic). Výhodou implicitní metody je lepší stabilita (možnost delšího kroku), ale přímo ji většinou nelze použít.

4.2 Metoda prediktor–korektor

Postup má tyto kroky:

1. **Prediktor** (P) - odhadneme $\tilde{y}_{i+1}$ explicitní metodou (Adams–Bashforthovou).
2. **Evaluace** (E) - vypočteme $\tilde{y}'_{i+1} = f(x_{i+1}, \tilde{y}_{i+1})$.
3. **Korektor** (K) - implicitní metodou s $\tilde{y}'_{i+1}$ určíme y_{i+1}.
4. **Evaluace** (E') - vypočteme $y'_{i+1} = f(x_{i+1}, y_{i+1})$.

Obecně lze postupovat podle schématu P(EK)^{m}E', ale obvykle pokládáme $m = 1$. Automatická změna kroku je zde složitější, ale v knihovnách je implementována. Výhodou této metody je především její rychlost, funkční hodnotu vyčíslujeme jen dvakrát (ne čtyřikrát). Její nevýhody jsou především to, že není samostartující, je citlivější na vlastnosti funkce f a není vhodná pro stiff-rovnice.

4.3 Konvergence vícekrokových metod

<u>**Konzistence**</u> - Vícekroková metoda je konzistentní, pokud je alespoň 1. řádu přesnosti.
Metoda je konzistentní právě tehdy, jestliže

$$\sum_{j=1}^{k} a_j = 1 \qquad \wedge \qquad \sum_{j=0}^{k} b_j = \sum_{j=1}^{k} j\, a_j$$

Vícekroková metoda

$$y_{i+1} = \sum_{j=1}^{k} a_j y_{i+1-j} + h \sum_{j=0}^{k} b_j f_{i+1-j} \quad .$$

má charakteristický polynom

$$\lambda^k - a_k \lambda^{k-1} - \ldots - a_1 = 0 \quad .$$

Pokud je metoda <u>**konzistentní**</u>, pak je alespoň jeden kořen $\lambda_1 = 1$.

<u>**D-stabilní metoda**</u> (stabilní v limitě kroku $h \to 0$), má $\forall\, i = 1, \ldots, m$ vlastní čísla (kořeny charakteristického polynomu) $|\lambda_i| \leq 1$ a ty, pro které je $|\lambda_i| = 1$, jsou jednoduché kořeny.

<u>*Pozn.*</u> Každá konzistentní metoda má jeden z kořenů charakteristického polynomu $\lambda = 1$.

__Věta__ Pokud je vícekroková metoda konzistentní a D-stabilní, pak je konvergentní.

Pozn. Adamsovy metody jsou D-stabilní, mají charakteristický polynom $\lambda^k - \lambda^{k-1} = 0$, tedy $\lambda_1 = 1$ a $\lambda_2 = \ldots = \lambda_m = 0$.

5 Špatně podmíněné úlohy

Máme-li diferenciální rovnici $y'' = y$ s počátečními podmínkami $y(0) = 1$ a $y'(0) = -1$, dostaneme analytické řešení $y = e^{-x}$. Úloha s počátečními podmínkami $y(0) = 1 + \varepsilon$ a $y'(0) = -1 + \varepsilon$ má ovšem řešení $y = e^{-x} + \varepsilon e^x$. Při libovolně malém nenulovém ε, existuje takové x, od kterého převažuje rostoucí "parazitní" složka. Protože se při numerickém řešení úlohy nevyhnutelně dopouštíme nepřesností, objeví se v něm rostoucí složka a po určité době převáží.

6 Stiff rovnice (rovnice se silným tlumením)

Jsou to rovnice, které v sobě obsahují útlum s charakteristickým časem $\tau_1 \ll \tau_{i \neq 1}$ – jiné charakteristické časy úlohy. I když pro $\tau \gg \tau_1$ je rychle se tlumící složka zanedbatelně malá, přesto je u dosud popsaných metod nutno užívat krok $h \lesssim \tau_1$. Takové rovnice nazýváme __stiff__ (rovnice se silným tlumením).

Nejjednodušší stiff rovnice jsou druhého řádu, například

$$y'' + 101y' + 100y = 0 \quad ,$$

která má řešení ve tvaru

$$y = c_1 \exp(-100\, x) + c_2 \exp(-x) \quad .$$

kde $\tau_1 = 0.01 \ll \tau_2 = 1$. Pro obvyklé metody musí být krok $h \lesssim 0.01$.

Příčinu potíží si ukážeme na ještě jednodušší rovnici

$$y' = -100y + 100 \quad \text{s podm.} \quad y(0) = y_0 \ ,$$

která má analytické řešení $y = (y_0 - 1) \cdot \exp(-100\,x) + 1$. Řešíme-li ji numericky Eulerovou metodou, máme řešení

$$y_{n+1} = y_n + h(-100y_n + 100) \quad \text{, tedy} \quad y_n = (y_0 - 1)(1 - 100h)^n + 1$$

Je-li $h > 0.02$, první člen v absolutní hodnotě roste a řešení je zcela chybné. Obvyklá Eulerova metoda je metoda explicitní. Implicitní metody zde dovolují podstatně prodloužit krok.

Implicitní Eulerova metoda

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1})$$

má pro danou rovnici tvar

$$y_{n+1} = y_n + h(-100y_{n+1} + 100) \quad \Rightarrow \quad y_n = 1 + \frac{y_0 - 1}{(1 + 100h)^n}$$

Zde řešení konverguje k 1 pro libovolně velké h.

Metody, které dovolují prodloužit krok pro stiff rovnice se nazývají **stiff stabilní**. Průkopníkem těchto metod byl C. W. Gear (1971).

6.1 Stabilita pro konečný krok

Uvažujeme pro jednoduchost jen jednu rovnici $y' = f(x, y)$, která má hladké řešení $\varphi(x)$. Spočítáme numericky řešení y_i v bodech x_i. Chceme, aby pro $\forall\ i \in \mathcal{N}$ byla chyba Δ numerického řešení omezená

$$|\Delta_i| = |y_i - \varphi(x_i)| < K \ .$$

Dosadíme do diferenciální rovnice

$$y'(x) = f(x, y) = f(x, \varphi(x)) + \left.\frac{\partial f}{\partial y}\right|_{(x,\varphi(x))} (y(x) - \varphi(x)) + \ldots \ ,$$

Odtud pro derivaci chyby platí

$$\Delta'(x) = \left.\frac{\partial f}{\partial y}\right|_{(x,\varphi(x))} \cdot \Delta + \ldots \approx J(x)\,\Delta(x) \ .$$

Přibližně můžeme brát J jako konstantní a pak

$$\Delta' = J\Delta \quad \text{a} \quad \Delta_{m+1} = R(hJ)\Delta_m \ ,$$

kde $R(hJ) = R(z)$ je dáno metodou numerického řešení diferenciální rovnice. Pro Eulerovu metodu je $R(z) = 1 + z$. Aby bylo $|\Delta_m| < K$ pro $\forall\, m \in \mathcal{N}$, musí být $|R(z)| < 1$. Pro Eulerovu metodu musí být $|z - (-1)| < 1$.

Pro systém rovnic je chyba vektor $\vec{\Delta}$ a jeho derivace je dána maticí $\mathbf{J}$. Je tedy

$$\vec{\Delta}' = \mathbf{J}\vec{\Delta} \quad .$$

Nechť $\mathbf{J}$ není defektní a existuje tedy pro $\forall\, \lambda_i$, $i = 1, 2, \ldots, n$ vlastní vektor $\vec{\nu}_i$. Potom lze vyjádřit

$$\vec{\Delta}_0 = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \vec{\nu}_i$$

Pak lze chybu v m-tém kroku zapsat ve tvaru

$$\vec{\Delta}_m = \sum_{i=1}^{n} \left[R(h\lambda_i)\right]^m \alpha_i \vec{\nu}_i \quad .$$

Pak chyba je omezená v limitě $\lim\limits_{m\to\infty} \|\vec{\Delta}_m\| < k$ právě tehdy, když pro $\forall\, i = 1, 2, \ldots, n$ je, že

$$\forall\ z_i = h\lambda_i \in \mathcal{S} \quad ; \quad S \equiv \{z;\ |R(z)| \leq 1\} \quad .$$

Z této podmínky mohu najít maximální krok h takový, že absolutní chyba metody nebude postupně narůstat (metoda je stabilní pro daný krok).

Pozn. Pro Eulerovu metodu je $\mathcal{S} = \{z \ \in \mathcal{C}; |z - (-1)| \leq 1\}$.

Def. Metoda je **A-stabilní**, jestliže je

$$\mathcal{S} \supset \mathcal{C}^- = \{z \ \in \mathcal{C}\,;\ \mathrm{Re}(z) \leq 0\}$$

Pozn. A-stabilní metoda je stabilní pro $\forall$ délky kroku h.

Implicitní Eulerova metoda je A-stabilní.
Zde $R(z) = 1/(1 - z)$ a tedy $|R(z) \leq 1|$ na množině (vnějšek kruhu) $|z - 1| \geq 1 \Rightarrow \mathcal{S} \supset \mathcal{C}^-$.

Pozn. V praxi se obvykle užívají implicitní metody vyššího řádu.

6.2 Semiimplicitní Eulerova metoda

Implicitní metody jsou vhodné pro lineární diferenciální rovnice, kde pro výpočet $\vec{y}_{i+1}$ je nutno řešit systém lineárních rovnic. Řešit systém nelineárních rovnic je ale obtížné, proto rovnice pro $\vec{y}_{i+1}$ linearizujeme. Takové metody nazýváme **semiimplicitní**.

Linearizujeme implicitní Eulerovu metodu $\vec{y}_{n+1} = \vec{y}_n + h\vec{f}(x_{n+1}, \vec{y}_{n+1})$ a dostaneme

$$\vec{f}(x_{n+1}, \vec{y}_{n+1}) = \vec{f}(x_{n+1}, \vec{y}_n) + \left.\frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{y}}\right|_{x_{n+1}, \vec{y}_n} (\vec{y}_{n+1} - \vec{y}_n) \quad ,$$

kde parciální derivace vektoru je matice $\partial f_i / \partial x_j$. Odtud potom

$$\vec{y}_{n+1} = \vec{y}_n + h \left[\mathbf{I} - h \left.\frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{y}}\right|_{x_{n+1}, \vec{y}_n} \right]^{-1} \cdot \vec{f}(x_{n+1}, y_n) \quad .$$

Mocnina -1 znamená inverzní matici. V každém kroku tedy řešíme systém lineárních rovnic.

Pozn. Semiimplicitní metody nejsou A-stabilní, ale dovolují podstatně delší krok než explicitní metody.

6.3 Řešení stiff problémů

1. **Rosenbrockovy metody** jsou semiimplicitní zobecnění Runge–Kuttových metod.
2. Semiimplicitní zobecnění Bulirsch–Stoerovy metody.
3. **Vícekroková Gearovy metody** jsou semiimplicitním zobecněním metod prediktor–korektor.

7 Okrajová úloha

Podmínky nejsou zadány v 1. bodu, jsou obvykle zadány ve 2 bodech, i když i jiná formulace podmínky (např. integrální) je možná.

Nechť jsou podmínky zadány ve 2 bodech (rovnice alespoň 2. řádu nebo nejméně 2 rovnice 1. řádu). Máme-li rovnici N-tého řádu, n_1 podmínek je zadáno v bodě a a n_2 podmínek v bodě b, kde $n_1 + n_2 = N$. Nejčastější jsou podmínky s tvarem $y(a) = \alpha_0$, $y'(a) = \alpha_1$ nebo $c_1 y(a) + c_2 y'(a) = \alpha_2$.

Základní metody řešení okrajových úloh jsou

- metoda střelby
- metoda sítí (konečných diferencí)
- variační metody

7.1 Metoda střelby

Máme n_1 podmínek v bodu a, n_2 podmínek v bodu b. Zkusmo zvolíme n_2 dodatečných podmínek v bodu a a řešíme počáteční úlohu. Řešení v bodu b dosadíme do n_2 původních podmínek, a podle výsledku měníme dodatečné podmínky v bodu a tak, abychom se trefili do podmínek v bodu b. Musíme tedy řešit n_2 obecně nelineárních rovnic. Pokud je $n_2 = 1$, jde jen o 1 rovnici a úloha je podstatně snažší.

Název je vlastně od střelby na cíl, která je popsána 4 diferenciálními rovnicemi

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\,x}{\mathrm{d}\,t} &= v\ \cos\theta & \frac{\mathrm{d}\,v}{\mathrm{d}\,t} &= -\frac{1}{2\,m} c \varrho s\ v^2 - g\sin\theta \\
\frac{\mathrm{d}\,y}{\mathrm{d}\,t} &= v\ \sin\theta & \frac{\mathrm{d}\,\theta}{\mathrm{d}\,t} &= -\frac{g}{v}\cos\theta
\end{aligned}
$$

a okrajovými podmínkami

$$x(0) = y(0) = 0 \quad v(0) = v_0 \quad y(x_c) = 0$$

Střelec volí náměr – úhel $\theta(0)$, tak aby zasáhl cíl. Pokud cíl mine opraví odhad $\theta(0)$ a zkouší to znovu. Musíme tedy řešit jednu nelineární rovnici pro $\theta_0 = \theta(0)$

$$y(x_c, \theta_0) = 0$$

Výpočet funkční hodnoty pro $\forall\, \theta_0$ vyžaduje řešení počátečního problému pro obyčejné diferenciální rovnice.

Pozn. Pokud je nutno řešit více nelineárních rovnic, používá se Newton–Raphsonova metoda, kde se parciální derivace počítají numericky.

7.2 Metoda sítí (konečných diferencí)

Položme $x_0 \equiv a$ a $x_{N+1} \equiv b$. Vložíme mezi a a b body $x_1, \ldots, x_n$. Budeme hledat aproximaci řešení v uvedených bodech. Nejjednodušší je ekvidistantní krok $\Delta x_k = x_{k+1} - x_k = (b-a)/(N+1) = h$. Derivace lze nahradit konečnými diferencemi různě. Například

$$v'(x) \approx \frac{v(x+h) - v(x)}{h}$$

a protože platí

$$v'(x) - \left[\frac{v(x+h) - v(x)}{h}\right] = \frac{1}{2} v''(x) h + O(h^2),$$

máme metodu prvního řádu přesnosti. Pokud ovšem nahradíme derivaci vztahem

$$v'(x) \approx \frac{v(x+h) - v(x-h)}{2h},$$

dostaneme metodu druhého řádu, protože platí

$$v'(x) - \left[\frac{v(x+h) - v(x-h)}{2h}\right] = -\frac{h^2}{3!} v'''(x) h + O(h^4).$$

Pro druhou derivaci platí vztah druhého řádu přesnosti

$$v''(x) = \frac{v(x+h) - 2v(x) + v(x-h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} v^{(4)}(x) + O(h^4).$$

Ukázka pro lineární diferenciální rovnici

$$a(x)v'' + b(x)v' + c(x)v = d(x) \qquad x \in \langle 0, 1 \rangle \qquad v(0) = \alpha \quad v(1) = \beta$$

Tuto rovnici lze pro všechna $i = 1, \ldots, N$ aproximovat diferenční rovnicí

$$a_i \frac{v_{i+1} - 2v_i + v_{i-1}}{h^2} + b_i \frac{v_{i+1} - v_{i-1}}{2h} + c_i v_i = d_i.$$

Tuto rovnici můžeme pro $i = 1, \dots, N$ upravit na tvar

$$\underbrace{(-a_i + b_i\frac{h}{2})}_{r_i}\, v_{i-1} + \underbrace{(2a_i - c_i h^2)}_{p_i}\, v_i + \underbrace{(-a_i - b_i\frac{h}{2})}_{q_i}\, v_{i+1} = -h^2 d_i.$$

Potom řešíme soustavu lineárních rovnic pro v_i

$$\begin{bmatrix} p_1 & q_1 & 0 & & \dots & & 0 \\ r_2 & p_2 & q_2 & & & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & & & & r_{n-1} & p_{n-1} & q_{n-1} \\ 0 & & \dots & & 0 & r_n & p_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_{n-1} \\ v_n \end{bmatrix} = -h^2 \begin{bmatrix} d_1 + r_1\frac{\alpha}{h^2} \\ d_2 \\ \dots \\ d_{n-1} \\ d_n + q_n\frac{\beta}{h^2} \end{bmatrix}.$$

Lze dokázat, že pokud $h \to 0$, pak pro $\forall\ i = 1, \dots, N$ platí $|v_i - v(x_i)| \to 0$.

<u>*Pozn.*</u> Pokud okrajové podmínky obsahují derivace, musíme je též aproximovat. Ke zvýšení řádu této aproximace často užíváme virtuálních bodů x_{-1} a x_{N+2}.

<u>*Pozn.*</u> Při řešení okrajových úloh pro obyčejné diferenciální rovnice metodou sítí je nutno řešit systémy lineárních rovnic s pásovou maticí.

7.3 Variační metody

Místo hledání řešení v určitých bodech, hledají variační metody řešení v jisté třídě funkcí, pokud je $\varphi_k(x)$ úplný systém funkcí, lze řešení napsat

$$y(x) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \varphi_k(x)$$

a zbývá najít neznáme koeficienty a_k. Samozřejmě se pak omezíme na konečný počet funkcí.

Převedeme okrajové podmínky na homogenní a obyčejnou diferenciální rovnici napíšeme ve tvaru

$$A\ y(x) = f(x) \qquad L_m^{(a)}\, y = 0 \qquad L_m^{(b)}\, y = 0$$

kde A je diferenciální operátor. Zvolíme bázové funkce $\varphi_k(x)$ takové, že $\forall$ splňují okrajové podmínky. V prostoru funkcí zavedeme skalární součin, často $(u, v) = \int_a^b u(x)\, v(x)\ \mathrm{d}x$.

<u>*Pozn.*</u> Většina metod je určena pro lineární operátory A, ale např. Galerkinovu metodu lze užít i pro nelineární operátory.

Galerkinova metoda

$$A\ y = f \qquad \Rightarrow (Ay - f, \varphi_j) = 0 \qquad \forall \quad j = 1, \ldots, n$$

Uvažujeme přibližné řešení ve tvaru

$$y_n = \sum_{k=1}^{n} a_k \varphi_k$$

Po dosazení získáme systém rovnic pro koeficienty a_k

$$(Ay_n - f, \varphi_j) = \int_a^b (Ay_n - f)\varphi_j \ \mathrm{d}x = \int_a^b \left(A[\sum_{k=1}^{n} a_k \varphi_k] - f, \varphi_j \right) \ \mathrm{d}x \ = 0$$

Metoda konečných prvků (finite element method) je variační metoda, která užívá speciální bázové funkce, z nichž každá je nenulová jen v určitém krátkém intervalu. Bázové funkce pro **metodu konečných prvků** mohou být například:

$$\begin{aligned}
\varphi_i &= 0 && \text{pro} && x \le x_{i-1} \\
\varphi_i &= 1 - \frac{x_i - x}{x_i - x_{i-1}} && \text{pro} && x_{i-1} \le x \le x_i \\
\varphi_i &= 1 - \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} && \text{pro} && x_i \le x \le x_{i+1} \\
\varphi_i &= 0 && \text{pro} && x_{i+1} \le x
\end{aligned}$$

Uvedený tvar bázových funkcí lze použít, pokud diferenciální rovnice obsahují maximálně 2. derivaci, jinak je třeba volit hladší bázové funkce (např. zvonové spliny).