Matematika III – 6. týden
Poznámky o numerických řešeních a parciálních diferenciálních rovnicích,

Jan Slovák

Masarykova univerzita
Fakulta informatiky

23. 10. 2013

Obsah přednášky

Kde je dobré číst?

- Zuzana Došlá, Roman Plch, Petr Sojka, Diferenciální počet funkcí více proměnných s programem Maple, MU Brno, 1999, 273 s.
- J. Slovák, M. Panák, M. Bulant, Matematika drsně a svižně, Muni Press, Brno 2013, v+773 s., elektronická edice `www.math.muni.cz/Matematika_drsne_svizne`
- Riley, K.F., Hobson, M.P., Bence, S.J. Mathematical Methods for Physics and Engineering, second edition, Cambridge University Press, Cambridge 2004, ISBN 0 521 89067 5, xxiii + 1232 pp.

Operátor $D(y) = a_k y^{(k)} + a_{k-1} y^{(k-1)} + \cdots + a_1 y + a_0 y$, kde $a_k \neq 0$.

$$D(e^{\lambda x}) = \left(a_k \lambda^k + a_{k-1} \lambda^{k-1} + \cdots + a_1 \lambda + a_0\right) e^{\lambda x}.$$

Parametr λ tedy vede na řešení lineární diferenciální rovnice s konstantními koeficienty $D(y) = 0$ tehdy a jen tehdy, když je λ kořenem tzv. *charakteristického polynomu* $a_k \lambda^k + \cdots + a_1 \lambda + a_0$.

Pokud má charakteristický polynom k různých kořenů, dostáváme bázi celého vektorového prostoru řešení. Pokud je λ násobný kořen, přímým výpočtem s využitím toho, že je pak také kořenem derivace charakteristického polynomu, dostaneme, že je řešením i funkce $x\,\mathrm{e}^{\lambda x}$. Podobně pak pro vyšší násobnost ℓ dostáváme ℓ různých řešení $\mathrm{e}^{\lambda}, x\,\mathrm{e}^{\lambda x}, \dots, x^{\ell}\,\mathrm{e}^{\lambda x}$.
Spočtěte si, že je to skutečně pravda! (cvičení na důkazy indukcí :-)

U obecné lineární diferenciální rovnice předepisujeme nenulovou hodnotu diferenciálního operátoru D. Opět úplně analogicky k úvahám o systémech lineárních rovnic nebo u lineárních diferenčních rovnic přímo vidíme, že obecné řešení takovéto (nehomogenní) rovnice

$$D(y)(x) = b(x)$$

pro nějakou pevně zadanou funkci $b(x)$ je součtem jednoho jakéhokoliv řešení této rovnice a množiny všech možných řešení příslušné homogenní rovnice $D(y)(x) = 0$. Celý prostor řešení je tedy opět pěkný konečněrozměrný afinní prostor, byť ukrytý v obrovském prostoru funkcí.

Partikulární řešení hledáme obvykle buď metodou neurčítých koeficientů, přičemž řešení předpokládáme ve tvaru podobném pravé straně (např. polynom u polynomů), nebo tzv. metodou variace konstant, kde uvažujeme obecné řešení homogenní rovnice, ve kterém konstanty považujeme za funkce a řešíme příslušný systém rovnic.

Kromě tak jednoduchých rovnic, jako jsou ty lineární s konstantními koeficienty se v praxi většinou setkáváme s postupy, jak přibližně spočíst řešení rovnice, se kterou pracujeme.
Už jsme podobné úvahy dělali všude tam, kde jsme se zabývali aproximacemi (tj. zejména lze doporučit porovnání s dřívějšími odstavci o splajnech, Taylorových polynomech a Fourierových řadách). S trochou odvahy můžeme také považovat diferenční a diferenciální rovnice za vzájemné aproximace. V jednom směru nahrazujeme diference diferenciály (např. u ekonomických nebo populačních modelů), ve druhém pak naopak.
Zastavíme se na chvilku u nahrazování derivací diferencemi. Nejdříve si však zavedeme obvyklé značení pro zápis odhadů chyb.

Definition

Pro funkci $f(x)$ v proměnné x řekneme, že je v okolí hromadného bodu x_0 svého definičního oboru **řádu velikosti** $O(\varphi(x))$ pro nějakou funkci $\varphi(x)$, jestliže existuje okolí U bodu x_0 a konstanta C taková, že

$$|f(x)| \leq C \cdot |\varphi(x)|$$

pro všechny $x \in U$. Limitní bod x_0 bývá často i nevlastní hodnota $\pm\infty$.

Nejobvyklejší příklady jsou $O(x^p)$ pro **polynomiální řád velikosti** a to v nule nebo v nekonečnu, $O(\ln x)$ pro **logaritmický řád velikosti** v nekonečnu atd. Všimněme si, že logaritmický řád velikosti nezávisí na volbě základu.
Dobrým příkladem je aproximace funkce jejím Taylorovým polynomem řádu k v bodě x_0. Taylorova věta pro funkce jedné proměnné říká, že chyba této aproximace je $O(h^{k+1})$, kde h je přírůstek argumentu $x - x_0 = h$.
Podobné úvahy jsme dělali i u Fourierových řad.

V případě obyčejných diferenciálních rovnic je nejjednodušším schématem aproximace tzv. Eulerovými polygony. Budeme ji prezentovat pro jednu obyčejnou rovnici s jednou nezávislou a jednou závislou veličinou. Úplně stejně ale funguje pro systémy rovnic, když skalární veličiny a jejich derivace v čase t nahradíme vektory závislé na času a jejich derivacemi.
Uvažujme tedy opět rovnici (pro jednoduchost a bez újmy na obecnosti prvního řádu)

$$y'(t) = f(t, y(t)).$$

Označme si diskrétní přírůstek času h, tj. $t_n = t_0 + nh$, a $y_n = y(t_n)$. Z Taylorovy věty (se zbytkem druhého řádu) a naší rovnice vyplývá, že

$$y_{n+1} = y_n + y'(t_n)h + O(h^2) = y_n + f(t_n, y_n)h + O(h^2).$$

Při numerickém řešení Eulerovou metodou postupujeme tak, že za přibližné řešení považujeme po částech lineární polygon definovaný body

$$y_{k+1} = y_k + f(t_k, y_k).$$

Jestliže tedy od t_0 do t_n uděláme n takových kroků o přírůstek h, bude očekávaný odhad celkové chyby vyplývající z lokálních nepřesností naší lineární aproximace nejvýše $nO(h^2)$, kde $n = (t_n - t_0)/h$, tj. chyba bude v řádu velikosti $O(h)$. Ve skutečnosti vstupují při výpočtu do hry ještě zaokrouhlovací chyby.

PDR prvního řádu

Budeme pro jednoduchost pracovat s rovnicemi

$$F((u, u_x, u_y, u_{xx}, u_{xy}, u_{yy}, \dots) = 0,$$

kde u je neznámá funkce dvou proměnných x a y a indexy naznačují parciální derivace. Už v tomto nejjednodušším případě ale nejsou k dispozici obecné věty o jednoznačnosti a existenci řešení v obdobě k obyčejným diferenciálním rovnicím.
Stejně jako u obyčejných rovnic přitom můžeme také uvažovat vektorové formulace (jak pro F tak pro u). Hovoříme pak také o systémech parciálních diferenciálních rovnic.
V praktickém užití se nejvíce objevují rovnice prvního a druhého řádu, tj. případy, kdy v definiční rovnici nevystupují parciální derivace řádů vyšších. Jde o velice složitou tématiku, která vyžaduje silné matematické nástroje a my se zde omezíme jen na několik jednoduchých poznámek a pozorování.

Začněme s tou nejjednoduší zajímavou možností – jedinou rovnicí pro skalární funkci $u(x, y)$ ve tvaru

$$a(u, x, y)u_x + b(u, x, y)u_y = 0,$$

kde a a b jsou známé funkce tří proměnných, u je hledané řešení. Zpravidla takový problém řešíme na nějaké oblasti $D \subset \mathbb{R}^2$ s hranicí ∂D (která bude v tomto případě krivkou).
Vcelku přirozený nápad je snažit se najít nějaké řešení podél jednotlivých křivek z vhodné soustavy, které nám vyplní celou oblast D.

Díky nulovosti pravé strany se přímo podbízí hleda křivky, na nichž bude řešení u konstantní. Pokud zároveň nebudou tyto křivky tečné k hranici ∂D, budeme umět minimálně na nějakém okolí rozšířit hraniční hodnotu u_0 konstantně podél takové křivky.
Derivací $u(c(t))$ podle t dostaneme

$$0 = \frac{d}{dt}u(c(t)) = u_x(c(t))\dot{x}(t) + u_y(c(t))\dot{y}(t),$$

což nám dává systém rovnic pro hledané křivky

$$\dot{x} = a(u, x(t), y(t)), \quad \dot{y} = b(u, x(t), y(t)).$$

Ten má pro dostatečně diferencovatelné funkce a, b a každou počáteční podmínku $x(0)$, $y(0)$ právě jedno řešení.
Zkonstruovaným křivkám se říká **charakteristiky** parciální diferenciální rovnice prvního řádu, příslušné soustavě obyčejných diferenciálních rovnic pak **charakteristické rovnice**.

V okamžiku, kdy přidáme pravou stranu rovnice funkci $f(x, y)$ a píšeme $z = u(x, y)$, dává stejný postup dodatečnou podmínku

$$\dot{x} = a(u, x(t), y(t)),\ \dot{y} = b(u, x(t), y(t)),\ \dot{z} = f(x(t), y(t))$$

opět řešení $z(t) = u(x(t), y(t))$ podél každé charakteristiky $c(t) = (x(t), y(t))$. Skutečně, z naší konstrukce je zaručeno jak $\dot{z} = f$, tak $\dot{z} = u_x\dot{x} + u_y\dot{y}$ a proto je naše rovnice podél charakteristik splněna. To ale obecně neznamená, že takto zkonstruované u je skutečně řešením původního problému. To musíme ověřit zkouškou.

Zkusme si úplně jednoduchý příklad s rovnicí

$$yu_x - xu_y = 0$$

a s počáteční podmínkou $u(x, 0) = x$. Příslušné charakteristické rovnice jsme už viděli:

$$\dot{x} = y, \qquad \dot{y} = -x.$$

Řešení s počáteční podmínkou $x(0) = R$, $y(0) = 0$ je tvaru

$$x(t) = R \sin t,\ y(t) = R \cos t, u(t) = R.$$

Takto je dobře definovaná funkce $u(x, y) = \varphi(r)$ (v polárních souřadnicích) jen lokálně. Jednak to obecně není diferencovatelná funkce v počátku souřadnic, také ale podél charakteristiky dojdeme z $(R, 0)$ do bodu $(-R, 0)$ a naše u již nemusí splňovat počáteční podmínky.