Pokročilé numerické metody II
1. přednáška

Základní pojmy
Jednokrokové metody
Eulerovy metody

Jiří Zelinka

Literatura

- Rektorys, K.: Variační metody v inženýrských problémech a v problémech matematické fyziky. Vyd. 6., opr. české 2. Praha: Academia, 1999. 602 s. ISBN 8020007148.
- Vitásek, E.: Základy teorie numerických metod pro řešení diferenciálních rovnic. 1. vyd. Praha: Academia, 1994. 409 s. ISBN 8020002812.
- Ralston, A.: Základy numerické matematiky. Translated by Milan Práger - Emil Vitásek. 2. čes. vyd. Praha: Academia, 1978.
- Mathews, J.H., Fink, K.D.: Numerical methods using MATLAB, Pearson Prentice Hall, 2003
- Stoer, J., Bulirsch R.: Introduction to Numerical Analysis, Spriger, 1992

Obsah přednášky

1. Obyčejné diferenciální rovnice
   - jednokrokové metody
   - vícekrokové metody
   - okrajové úlohy
     - metoda střelby
     - diferenční metody
2. Variační metody (ODR i PDR)
3. Diferenční metody pro PDR
   - eliptické rovnice
   - časově závislé rovnice

Následující část je převzata z 6. kapitoly výukových materiálů Numerické metody Jaromíra Kuben a Pavlíny Račkové, Univerzita obrany.

Kapitola 6

Numerické řešení obyčejných diferenciálních rovnic

Cíle

Po prostudování této kapitoly budete schopni vysvětlit:

- co je to obyčejná diferenciální rovnice (ODR) prvního řádu v implicitním resp. explicitním tvaru a co je její řešení,
- jak vypadá Cauchyova počáteční úloha pro ODR prvního řádu,
- proč je nutné hledat řešení počáteční úlohy numericky a jaký je princip numerického řešení,

- jaký je rozdíl mezi jednokrokovými a vícekrokovými metodami,
- jaký je obecný tvar jednokrokové explicitní a implicitní metody,
- co je to lokální a globální chyba, řád, konvergence a A-stabilita jednokrokové metody,
- co jsou to metody Rungeho-Kutty a jaký je jejich princip,
- jaký je obecný tvar lineární vícekrokové explicitní a implicitní metody,
- co je to lokální a globální chyba, řád, konvergence a A-stabilita lineární vícekrokové metody,
- co jsou Adamsovy-Bashforthovy a Adamsovy-Moultonovy metody a metody zpětného derivování a jaký je princip jejich odvození,
- co jsou metody prediktor-korektor,
- čemu se říká tuhé problémy a na co je nutné dbát při jejich řešení,
- jak se výsledky pro jednu ODR prvního řádu přenesou na soustavy ODR prvního řádu,
- jak přepíšeme jednu ODR vyššího řádu na soustavu ODR prvního řádu.

Jde o jednu z nejdůležitějších úloh numerické matematiky, protože diferenciální rovnice patří k nejvýznamnějším matematickým modelům reálných problémů. Přitom pouze malá část obyčejných diferenciálních rovnic má řešení, které lze vyjádřit v uzavřeném tvaru, tj. pomocí elementárních funkcí.

6.1 Obyčejné diferenciální rovnice 1. řádu

6.1.1 Základní vlastnosti obyčejných diferenciálních rovnic 1. řádu

Připomeneme si základní poznatky z tzv. *kvalitativní teorie* obyčejných diferenciálních rovnic. Podrobněji viz [34].

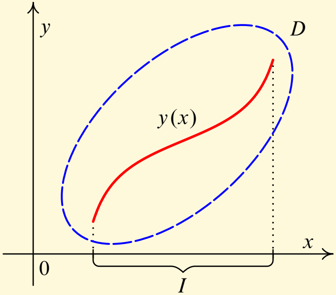
- Rovnice $F(x, y, y') = 0$ se nazývá *obyčejná diferenciální rovnice prvního řádu v implicitním tvaru* s neznámou funkcí $y(x)$ nezávisle proměnné x. Příkladem takové rovnice je

$$\ln(x^2 - yy' + y^2) - (y')^3 + x\sin(xyy') - \sqrt{y - y'} = 0.$$

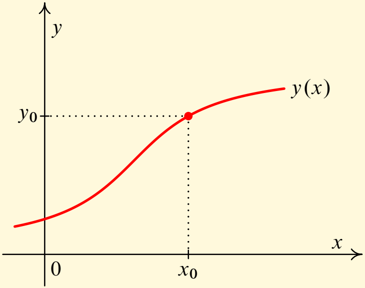
- Pro vyšetřování rovnic je důležitý případ, kdy se dá osamostatnit první derivace y', tj. rovnice má tvar
$$y' = f(x, y). \tag{6.1}$$
O takové rovnici říkáme, že je v *explicitním tvaru*. O funkci $f(x, y)$ předpokládáme, že je definována na nějaké otevřené množině $D \subset R^2$.
Příklady takových rovnic jsou
$$y' = x^2 + y^2, \quad y' = \frac{y}{x}, \quad y' = y^2, \quad y' = \sin xy, \quad y' = \sqrt{x^2 - y^2} \quad \text{apod.}$$

- *Řešením* je funkce $y(x)$ definovaná na *intervalu* I, která splňuje rovnici (6.1). Musí tedy platit, že $[x, y(x)] \in D$ pro $x \in I$ (jinými slovy, graf funkce $y(x)$ leží v množině D — viz obr. 6.1 a)) a $y'(x) = f(x, y(x))$ pro každé $x \in I$.

- V každém bodě $[x, y(x)]$ grafu řešení tedy platí, že tečna ke grafu v tomto bodě má směrnici rovnou číslu $f(x, y(x))$. Protože funkci $f(x, y)$ známe, můžeme sestrojit (teoreticky) v každém bodě $[x, y]$ vázaný vektor, jehož směrnice je $f(x, y)$. Graf řešení se musí v každém bodě, kterým prochází, dotýkat tohoto vektoru. Tyto vektory tvoří *směrové pole* diferenciální rovnice. Na obr. 6.2, 6.3 a 6.4 jsou znázorněna směrová pole



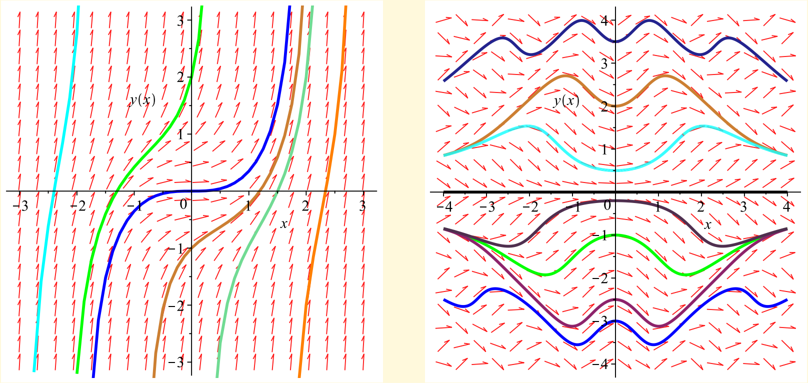
a) Řešení diferenciální rovnice



b) Cauchyova počáteční úloha

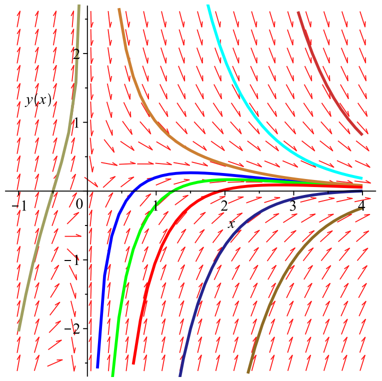
Obr. 6.1

a několik řešení šesti diferenciálních rovnic. Všimněte si, že u rovnic na obr. 6.3 a) až 6.4 b) není množina D rovna celé rovině $\mathbb{R}^2$ (určete definiční obory pravých stran těchto rovnic).

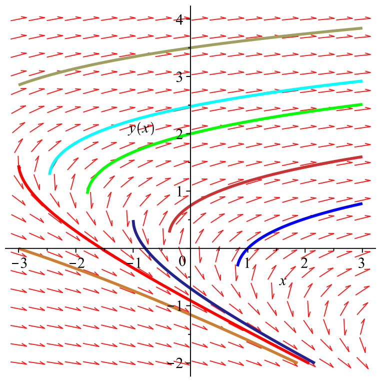


a) $y' = x^2 + y^2$ b) $y' = \sin(xy)$

Obr. 6.2: Směrová pole a řešení diferenciálních rovnic — část 1

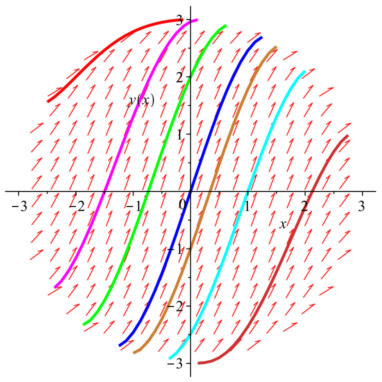


a) $y' = 2\mathrm{e}^{-x} - (1 + 1/x)y$

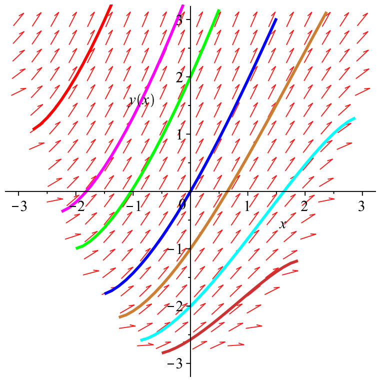


b) $y' = 1/(x + 2y)$

Obr. 6.3: Směrová pole a řešení diferenciálních rovnic — část 2



a) $y' = \sqrt{9 - x^2 - y^2}$



b) $y' = \sqrt{y - x^2/2 + 3}$

Obr. 6.4: Směrová pole a řešení diferenciálních rovnic — část 3

- Rovnice $y' = f(x, y)$ má obvykle nekonečně mnoho řešení. Hledáme tedy řešení, které splňuje nějakou dodatečnou podmínku. Tato podmínka by měla jednoznačně určit jediné řešení.
  My budeme hledat řešení, jehož graf prochází zadaným bodem $[x_0, y_0]$. Chceme tedy, aby platila tzv. *počáteční podmínka* $y(x_0) = y_0$ — viz obr. 6.1 b). Úloha, kterou budeme řešit, má tudíž tvar

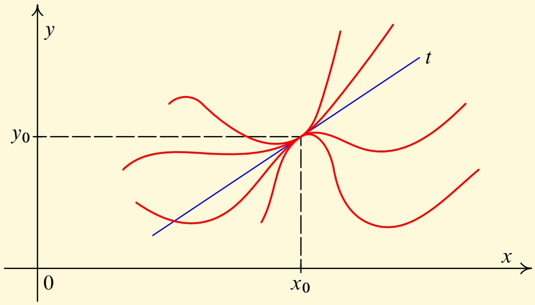
$$\boxed{\begin{aligned} y'(x) &= f(x, y(x)), \\ y(x_0) &= y_0. \end{aligned}} \tag{6.2}$$

  Říká se jí obvykle *Cauchyova počáteční úloha*.

- Připomeňme si, jaké vlastnosti funkce $f(x, y)$ zaručují, že Cauchyova počáteční úloha (6.2) má řešení a že toto řešení je jediné.

  1) Z teorie obyčejných diferenciálních rovnic je známo, že *spojitost funkce* $f(x, y)$ zaručuje existenci řešení počáteční úlohy.
     Toto řešení ale nemusí být jediné. Pak říkáme, že v bodě $[x_0, y_0]$ je porušena jednoznačnost. Protože všechna řešení počáteční úlohy (6.2) musí mít v bodě $[x_0, y_0]$

společnou tečnu t, musí dojít k jakémusi „rozvětvení“ — viz obr. 6.5. Numerické hledání řešení je pak velmi problematické.



Obr. 6.5: Porušení jednoznačnosti v bodě $[x_0, y_0]$

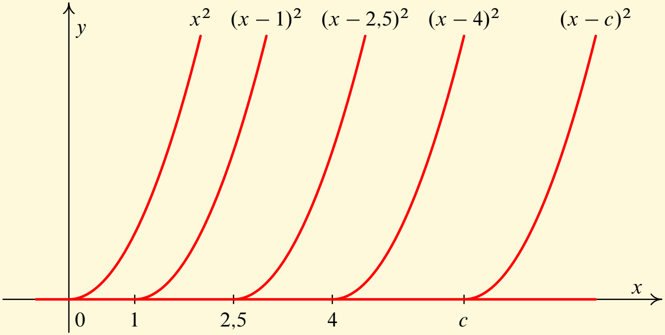
Např. počáteční úloha $y' = 2\sqrt{|y|}$, $y(0) = 0$, má spojitou pravou stranu $f(x, y) = 2\sqrt{|y|}$ v množině $D = \mathbb{R}^2$. Uvedená úloha má ale nekonečně mnoho řešení.

Jedním je nulová funkce $y(x) \equiv 0$, dalšími řešeními jsou funkce

$$y_c = \begin{cases} (x-c)^2, & x \geqq c, \\ 0, & x < c, \end{cases}$$

kde $c \in \mathbb{R}_0^+$ je libovolné číslo. Řešení jsou znázorněna na obr. 6.6. Že jde opravdu o řešení, se snadno ověří dosazením do rovnice.

2) Standardní vlastností, která zaručuje, že počáteční úloha (6.2) má jediné řešení, je *Lipschitzova podmínka* (existuje konstanta $L > 0$ taková, že je v množině D splněna nerovnost $|f(x, y_1) - f(x, y_2)| \leqq L|y_1 - y_2|$; stačí, aby tato vlastnost platila lokálně). K platnosti této podmínky stačí, aby v okolí bodu $[x_0, y_0]$ byla *spojitá parciální derivace* $\frac{\partial}{\partial y} f(x, y)$. Tuto podmínku rovnice, se kterými se v aplikacích setkáváme, většinou splňují.



Obr. 6.6: Řešení úlohy $y' = 2\sqrt{|y|}$, $y(0) = 0$

Systémy diferenciálních rovnic

$$
\begin{array}{rcll}
y_1' & = & f_1(x, y_1, \dots, y_n), & \quad y_1(x_0) = y_{10} \\
y_2' & = & f_2(x, y_1, \dots, y_n), & \quad y_2(x_0) = y_{20} \\
 & \vdots & & \\
y_n' & = & f_n(x, y_1, \dots, y_n), & \quad y_n(x_0) = y_{n0}
\end{array}
$$

Zápis jednou rovnicí

$$Y' = F(x, Y), \quad Y(x_0) = Y_0,$$

Y, F jsou vektory.

Rovnice vyšších řádů

$$y^{(n)} = f(x, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)}),$$

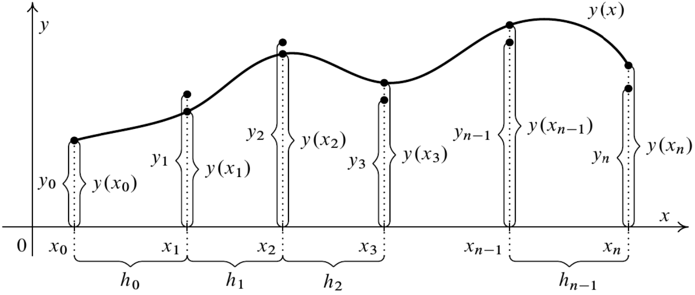
jsou dány počáteční podmínky $y(x_0)$, $y(x_0)$,…, $y^{(n-1)}(x_0)$.
Lze převést na systém DR.

Numerické řešení počátečního problému

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0$$

Numerické řešení hledáme v bodech (uzlech)
$x_0 < x_1 < \cdots < x_n$, $h_i = x_{i+1} - x_i$,
zpravidla používáme ekvidistantní uzly, tj. $h_i = h$, $\forall i$.

Označení: y_i je hodnota numerického řešení v bodě x_i, tj. $y_i \approx y(x_i)$.



Obecná explicitní jednokroková metoda

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot \Phi(x_i, h, y_i)$$

Funkce Φ se nazývá přírůstková funkce, závisí i na f.
Poznámka: Φ může záviset i na y_{i+1}, pak se jedná **implicitní** metodu.

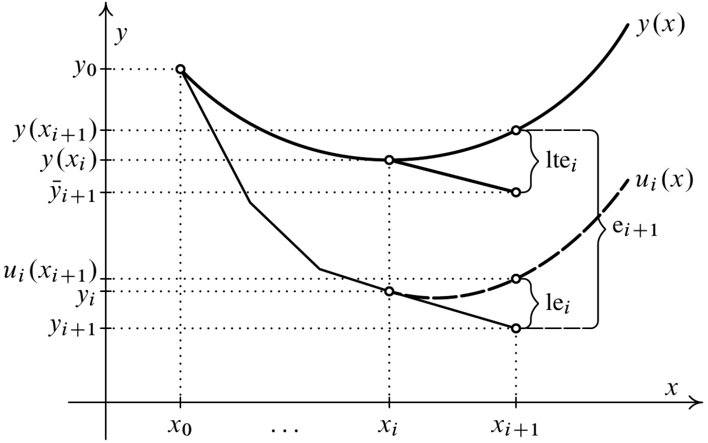
Lokální diskretizační chyba

Jedná se o chybu metody v jednom kroku, pokud bychom použili přesné hodnoty řešení. Označení: lte_i
$lte_i = y(x_{i+1}) - y(x_i) - h\Phi(x_i, y(x_i), h, y(x_{i+1}))$

Lokální chyba

Bodem (x_i, y_i) prochází nějaké řešení u_i diferenciální rovnice, lokální chyba le_i je dána chybou metody pro u_i:
$le_i = u_i(x_{i+1}) - y_{i+1}$

Globální chyba $e_i = y(x_i) - y_i$.



y
$y(x)$
y_0
$y(x_{i+1})$
$y(x_i)$
$\bar{y}_{i+1}$
lte_i
$u_i(x)$
e_{i+1}
$u_i(x_{i+1})$
y_i
y_{i+1}
le_i
x
x_0
$\dots$
x_i
x_{i+1}

Řád a konvergence metody

Číslo p nazýváme **řádem metody**, jestliže lte_i je $O(h^{p+1})$.

Věta

Jestliže $lte_i = O(h^{p+1})$ a funkce Φ je spojitá a lipschitzovská v y, tj. existuje konstanta M, že
$|\Phi(x, h, \tilde{y}) - \Phi(x, h, \hat{y})| \leq M|\tilde{y} - \hat{y}|$,
pak $e_i = O(h^p)$.

Lemma: Jestliže pro posloupnost $a_0, a_1, \dots$ platí $|a_{i+1}| \leq (1 + \lambda)|a_i| + B$, $\lambda, B > 0$, pak $|a_n| \leq e^{\lambda n}|a_0| + B\frac{e^{\lambda n}-1}{\lambda}$.

Metoda se nazývá **konvergentní v bodě** $x(= x_n)$, jestliže pro $h \to 0$, $n \to \infty$, $nh = x_n - x_0$ platí $y_n \to y(x)$.

Metoda se nazývá konvergentní na intervalu $[a, b]$, (zpravidla $a = x_0$), jestliže je konvergentní $\forall x \in [a, b]$.

Poznámka: konvergence zpravidla plyne z řádu globální chyby.

Explicitní Eulerova metoda

Taylorův rozvoj:
$y(x+h) = y(x)+hy'(x)+O(h^2) = y(x)+hf(x,y(x))+O(h^2)$,
tedy
$y(x_{i+1}) = y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)) + O(h^2)$.
Zanedbáním chybového členu a použitím přibližných hodnot dostaneme **Eulerovu explicitní metodu:**

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i)$$

Současně vidíme, že $lte_i = O(h^2)$, takže metoda je řádu 1.

Dá se ukázat, že i $le_i = O(h^2)$ a $lte_i - le_i = O(h^3)$.

Dále je $\Phi(x,h,y) = f(x,y)$, takže pokud funkce f splňuje předpoklady Picardovy věty o existenci a jednoznačnosti řešení rovnice, pak globální chyba je $O(h)$ a metoda je konvergentní.

Implicitní Eulerova metoda

Taylorův rozvoj:
$y(x) = y(x+h) - hy'(x+h) + O(h^2) =$
$= y(x+h) - hf(x+h, y(x+h)) + O(h^2),$
tedy
$y(x_i) = y(x_{i+1}) - hf(x_{i+1}, y(x_{i+1})) + O(h^2).$
Zanedbáním chybového členu, převedením na druhou stranu rovnice a použitím přibližných hodnot dostaneme **Eulerovu implicitní metodu:**

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_{i+1})$$

Opět platí $lte_i = O(h^2)$, podobně jsou další vlastnosti (řád globální chyby a konvergence metody) stejné jako u explicitní metody.

V každém kroku Eulerovy implicitní metody ovšem musíme řešit nelineární rovnici.

Lichoběžníková metoda

Integrální tvar ODR:

$$y(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x} f(t, y(t))dt$$

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(t, y(t))dt$$

Lichoběžníkové pravidlo pro numerický výpočet integrálu:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{2}h[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})]$$

Chyba lichoběžníkového pravidla je $O(h^3)$, takže i lokální diskretizační chyba pro lichoběžníkovou metodu je $O(h^3)$, tedy metoda je řádu 2 a je konvergentní.

Metoda prediktor–korektor

Iterační řešení implicitní metody

Prediktor – explicitní Eulerova metoda – počáteční iterace:
$y_{i+1}^{(0)} = y_i + hf(x_i, y_i)$

Korektor – implicitní Eulerova metoda – zpřesňování iterace:
$y_{i+1}^{(j+1)} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1}^{(j)})$
– podobně s lichoběžníkovou metodou

Metoda konverguje pro dostatečně malé h.

Stabilita

Zkoumáme, co se děje pro konstantní h a $n \to \infty$.

Pro testovací úlohu $y' = \lambda y$, $y(0) = 1$, $\lambda \in \mathbb{C}$, $\mathcal{R}(\lambda) < 0$ je řešení $y(x) = e^{\lambda x}$. Pro něj platí $|y(x_{n+1})| < |y(x_n)|$, proto požadujeme aby

$$|y_{n+1}| < |y_n|.$$

Pro obecnou jednokrokovou metodu a testovací úlohu dostaneme vztah

$$y_{n+1} = R(z) y_n,$$

kde R se nazývá **funkce stability**, $z = \lambda h$. Zajímá nás tedy podmínka $|R(z)| < 1$.

Oblast (absolutní) stability: $\Omega = \{z \in \mathbb{C} : |R(z)| < 1\}$.

Interval stability: reálná část oblasti stability.

Stabilita

Metoda se nazývá **absolutně stabilní** (A–stabilní), pokud Ω obsahuje všechna záporná reálná čísla.

Metoda se nazývá **L–stabilní**, jestliže je A–stabilní a $\lim\limits_{|z|\to\infty} R(z) = 0$.

Oblast stability pro explicitní Eulerovu metodu: $|z - (-1)| < 1$.

Implicitní Eulerova metoda a lichoběžníková metoda jsou absolutně stabilní, implicitní Eulerova metoda je dokonce L–stabilní.