1. CAUCHYHO ÚLOHA PRO OBYČEJNÉ DIFERENCIÁLNÍ ROVNICE.

1.1. Formulace úlohy.

Budeme se zabývat řešením počáteční úlohy pro diferenciální rovnici

(1) $$y' = f(x,y), \quad y(a) = y_0 .$$

Budeme předpokládat, že

1° funkce $f(x,y)$ je definována a spojitá v páse $G : a \leq x \leq b$, $-\infty < y < \infty$, kde a,b jsou konečná čísla

2° existuje konstanta $L > 0$ taková, že pro každé $x \in [a,b]$ a libovolnou dvojici y,z platí

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

Za těchto podmínek existuje právě jedna funkce, která je spojitá na intervalu $[a,b]$, má tam spojitou derivaci a vyhovuje diferenciální rovnici (1). Podmínka 2° se nazývá Lipschitzova podmínka. Má-li funkce f spojitou a ohraničenou parciální derivaci f_y v G : $|f_y| \leq L < \infty$, pak podmínka 2 je splněna, neboť z věty o střední hodnotě plyne

$$|f(x,y) - f(x,z)| = |f_y(x,\eta)|\,.\,|y - z| \leq L\ |y - z| .$$

Obecněji můžeme rovnici (1) pokládat za vektorový zápis systému N-rovnic prvního řádu, kde y, y_0, f jsou vektory s N složkami. Mnoho z toho, co odvodíme, bude platit nejen pro jednu rovnici, nýbrž i pro systém.

Při odvození metod pro numerické řešení diferenciálních rovnic bude důležité zabývat se těmito otázkami:

1) Jak velké chyby se dopouštíme v každém kroku výpočtu (ať jde o chybu metody nebo o chybu zaokrouhlovací), jak tato chyba ovlivní výsledky v následujících krocích. Tento jev se studuje obvykle pod hlavičkou stability, přičemž stabilní metodou se rozumí taková metoda, ve které chyby, kterých se dopustíme v jednom kroku, nemají tendenci se zvětšovat v dalších krocích.
2) S problémem chyb a jejich šířením souvisí problém, jak stanovit chybu v dané fázi výpočtu jako funkci vypočítaných výsledků.
3) Otázka začátku řešení. Rovnice (1) obsahuje počáteční podmínku v bodě $x = x_0$. Ale mnoho metod potřebuje pro výpočet hodnoty funkce y v daném bodě znalost hodnot funkce y v několika jiných bodech. Často je tedy potřeba pomocných prostředků pro začátek řešení.
4) Rychlost metody. Doba pro výpočet velkých soustav ($N \geq 10$) může být značná i na velice rychlých počítačích. Proto při volbě konkrétní

metody musíme přihlížet i k rychlosti výpočtu.

Jev stability se nesmí zaměňovat s <u>vnitřní nestabilitou</u>, která je vlastností diferenciálních rovnic samotných. Např. systém

$$y_1' = y_2$$
$$y_2' = y_1 ,$$

který má obecné řešení $y_1 = a_1 e^x + a_2 e^{-x}$, $y_2 = a_1 e^x - a_2 e^{-x}$ je vnitřně nestabilní vzhledem k počátečním podmínkám $y_1(0) = -y_2(0) = 1$. V tomto případě $a_1 = 0$, $a_2 = 1$. Ale libovolně malá porucha počátečních podmínek se projeví tím, že se a_1 stane nenulovým a to se projeví i v řešení, kde člen e^x převládne. Protože chyba způsobená libovolnou numerickou metodou má za následek, že numerické řešení v každém bodě x_i splňuje diferenciální rovnici s porušenými počátečními podmínkami, není možné získat přesné numerické řešení této soustavy s uvedenými počátečními podmínkami.

1.2. <u>Metody numerické integrace.</u>

V následujících odstavcích si všimneme numerických metod řešení diferenciální rovnice $y' = f(x,y)$, pomocí kterých hledáme řešení jen na zvolené množině hodnot nezávisle proměnné x z intervalu $[a,b]$: $a = x_0 < x_1 < \dots < x_N = b$, které nazýváme <u>uzly</u>. Diferenciální rovnici (1) převedeme na integrální integrací v mezích od x_n do x_{n+1}:

$$(2) \qquad y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(t,y(t))dt, \quad y(x_0) = y_0 ,$$

$$n = 0,1,\dots,N-1.$$

Většina uvedených numerických metod se liší různým přístupem k výpočtu integrálu v (2).

Nejdříve zavedeme některá označení. Nechť $Y(x)$ je přesné řešení a $y(x)$ přibližné řešení naší úlohy. Pak položme:

$$Y_i = Y(x_i) \qquad\qquad y_i = y(x_i)$$
$$Y_i' = f(x_i,Y_i) = \left.\frac{dY}{dx}\right|_{x=x_i} \qquad y_i' = f(x_i,y_i)$$
$$h = x_{i+1} - x_i$$

Interval h mezi uzly zůstává obvykle konstantní (v tom případě říkáme, že uzly jsou <u>ekvidistantní</u>) a nazývá se krokem numerické integrace. Lze jej však změnit, jestliže se z rozboru chyb ukáže, že je to žádoucí.

Je nutno si také dobře ujasnit otázku chyb. U interpolace se z přesných funkčních hodnot počítá přibližná hodnota v jiném bodě. U diferenciálních rovnic se z přibližných funkčních hodnot počítá další přibližná hodnota. Dochází zde tedy ke kumulaci chyb.

Nejjednodušší a klasickou metodou integrace rovnice $Y' = f(x,Y)$, $Y(x_0) = Y_0$ je Eulerova metoda:

$$(3) \qquad y_{n+1} = y_n + h \, . \, f(x_n,y_n) , \qquad y_0 = Y_0 .$$

Tuto metodu, na které si osvětlíme některé základní pojmy, obdržíme z integrální rovnice (2) přibližným nahrazením integrandu $f(t,Y)$ polynomem nultého stupně na intervalu $[x_n, x_{n+1}]$, tj. hodnotou $f(x_n,y_n)$.

<u>Definice.</u> Funkce $f(x)$ se nazývá řádu $g(x) > 0$, jestliže existuje konstanta $M > 0$ taková, že na průniku definičních oborů funkcí g, f platí

$$|f(x)| \leq M \, . \, g(x) .$$

Označení $f(x) = O(g(x))$.

Při numerické realizaci Eulerovy metody vzhledem k zaokrouhlování nesplníme rovnici (3), nýbrž rovnici

$$\tilde{y}_{n+1} = \tilde{y}_n + h\, f(x_n,\tilde{y}_n) + r_n ,$$

kde r_n je zaokrouhlovací chyba.

<u>Definice</u>. Veličině $Y_n - y_n$ se říká <u>chyba metody</u>, veličině $Y_n - \tilde{y}_n$ <u>akumulovaná</u> (celková) <u>chyba</u>. Jestliže platí pro libovolné $x \in [a,b]$

$$\lim_{h\to 0^+} Y_n - y_n = 0 , \qquad n.h = x - x_0 ,$$

pak se příslušná metoda nazývá <u>konvergentní</u>. Vztah $Y_n - y_n = O(h^p)$ nám dává <u>rychlost konvergence</u>.

<u>Věta 1</u>. Je-li y_n řešení rekurentního vztahu (3) a Y_n přesné řešení rovnice (1), pak platí odhad

$$|Y_n - y_n| \leq w(h) \, . \, \frac{e^{L(x_n-a)} - 1}{L} ;$$

$$w(d) = \sup_{|x_1-x_2| \leq d} |Y'(x_1) - Y'(x_2)|$$

je modul spojitosti první derivace, $L > 0$ je Lipschitzova konstanta.

Poznámka. Ze spojitosti funkce $Y'(x)$ plyne, že

$$\lim_{h\to 0^+} w(h) = 0$$

a tedy Eulerova metoda je konvergentní.

Důkaz. Podle věty o střední hodnotě platí $(n \geq 1)$

$$Y_{n+1} = Y_n + h \, . \, Y'(x_n + \theta . h) .$$

Označíme-li $e_n = Y_n - y_n$, pak odečteme-li tuto rovnici od (3) obdržíme:

$$e_{n+1} = e_n + h\,(Y'(x_n + \theta . h) - f(x_n,y_n))$$
$$e_{n+1} = e_n + h.(f(x_n,Y_n) - f(x_n,y_n)) - h.(Y_n' - Y'(x_n + \theta h)).$$

Odtud (za využití Lipschitzovy podmínky)

$$|e_{n+1}| \leqq |e_n| + h.L\,|e_n| + h.w(h)$$

$$|e_{n+1}| \leqq (1 + hL)\,|e_n| + h\,w(h).$$

Tvrzení věty dokážeme indukcí. Pro $n = 0$ věta platí, neboť z počátečních podmínek plyne $|e_o| = |Y_o - y_o| = 0$. Obecný krok: Z poslední nerovnosti a indukčního předpokladu plyne

$$|e_{n+1}| \leqq (1 + hL).w(h).\frac{e^{L(x_n-a)}-1}{L} + hw(h) \leqq$$

$$\leqq w(h)\,.\left[e^{hL}\,e^{L(x_n-a)}\cdot\frac{1}{L} - \frac{1}{L} - h + h\right] =$$

$$= w(h).\frac{e^{L(x_{n+1}-a)}-1}{L},$$

čímž je věta dokázána.

Eulerova metoda je nejjednodušší metodou jedné třídy numerických metod, které se nazývají Adamsovy metody. Jejich základem je následující úvaha. Předpokládejme, že jsme nějakým způsobem vypočítali přibližné hodnoty $y_o,\ldots,y_n$ řešení Y rovnice (1), které odpovídají ekvidistantním uzlům $x_o,\ldots,x_n$. Přibližnou hodnotu y_{n+1} lze vypočítat ze vzorce

(4) $$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,Y(x))dx\,,$$

kde funkci f nahradíme interpolačním polynomem, který v bodech $x = x_j$, $j = n-p,\ n-p+1,\ldots,n$ nabývá hodnot $f_j = f(x_j,y_j)$. Poznamenejme, že tento interpolační polynom se jen přibližně shoduje s interpolačním polynomem funkce $f(x,Y(x))$, protože obecně $y_j \neq Y_j$. Použijme pro aproximaci funkce f Newtonův interpolační polynom vzad

$$f(x,y(x)) = f_n + \binom{t}{1}\Delta f_{n-1} + \ldots + \binom{t+p-1}{p}\Delta^p f_{n-p}\,.$$

$$x = x_n + t\,h\,.$$

Dosadíme toto vyjádření do (4) a provedeme v integrálu substituci $x = x_n + th$:

$$y_{n+1} = y_n + h\int_0^1 \left[f_n + t\,\Delta f_{n-1} + \ldots + \binom{t+p-1}{p}\Delta^p f_{n-p}\right] dt\,.$$

Tedy

$$y_{n+1} = y_n + h\left[f_n + b_1\Delta f_{n-1} + \ldots + b_p\Delta^p f_{n-p}\right],$$

kde

$$b_j = \int_0^1 \binom{t+j-1}{j}\,dt = \frac{1}{j!}\int_0^1 t(t+1)\ldots(t+j-1)dt\,.$$

Tento vzorec se nazývá <u>Adamsův extrapolační vzorec</u>. Koeficienty b_j nezávisí ani na funkci f ani na kroku h a lze je jednou provždy spočítat a jsou tabelovány. Hodnoty prvních pěti jsou následující:

k	1	2	3	4	5
b_k	1/2	5/12	3/8	251/720	95/288

Vzorec se nazývá extrapolační, protože jej používáme pro výpočet hodnoty ve vnějším bodě interpolace.

Aproximujeme-li funkci f Lagrangeovým interpolačním polynomem, lze stejným postupem ukázat, že Adamsův extrapolační vzorec má tvar

(5) $$y_{n+1} = y_n + h\,.\sum_{j=o}^{p} b_{pj}\,f_{n-j}$$

$$b_{pj} = \frac{(-1)^j}{j!(p-j)!}\int_o^1 \frac{t(t+1)\ldots(t+p)}{t+j}\,dt\,.$$

Nahradíme-li funkci f ve vzorci (4) interpolačním polynomem s uzly $x_{n-p}, x_{n-p+1},\ldots,x_n,x_{n+1}$, lze odvodit stejným způsobem <u>Adamsův interpolační vzorec</u>:

$$y_{n+1} = y_n + h(f_{n+1} + C_1\Delta f_n + \ldots + C_{p+1}\Delta^{p+1} f_{n-p})\,,$$

$$C_j = \frac{1}{j!}\int_{-1}^{0} t\,(t+1)\,\ldots\,(t+j-1)dt\,.$$

Koeficienty C_j jsou opět nezávislé na funkci f a kroku h a jsou tabelovány

j	1	2	3	4	5
C_j	-1/2	-1/12	-1/24	-19/720	-3/160

Tento vzorec ovšem nedává explicitní řešení. Je to nelineární rovnice pro y_{n+1}, která se obvykle řeší iteracemi. Jako počáteční přiblížení můžeme volit hodnotu spočítanou např. Adamsovým extrapolačním vzorcem. Výhodou interpolačního vzorce je jeho větší přesnost.

Jiné vyjádření Adamsova interpolačního vzorce:

(6) $$y_{n+1} = y_n + h\,.\sum_{j=-1}^{p} C_{pj}\,f_{n-j}$$

$$C_{pj} = \frac{(-1)^{j+1}}{(j+1)!(p-j)!}\int_o^1 \frac{(t-1)t(t+1)\ldots(t+p)}{t+j}\,dt\,.$$

Jak vidíme z vyjádření (5),(6) je možno oba Adamsovy vzorce zapsat ve tvaru

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=-1}^{p} b_i\,y'_{n-i}\,. \qquad y'_i = f(x_i,y_i)\,,$$

kde b_i jsou vhodné koeficienty a $b_{-1} = 0$ pro Adamsův interpolační vzorec. Můžeme tedy zobecnit tuto třídu metod a uvažovat metody tvaru

(7) $$y_{n+1} = \sum_{i=o}^{p} a_i\,y_{n-i} + h\sum_{i=-1}^{p} b_i\,y'_{n-i}\,.$$

K výpočtu hodnoty y_{n+1} se používají funkční hodnoty a derivace v předcházejících $(p+1)$ uzlech. Tyto metody se nazývají vícekrokové, přitom předpokládáme, že $a_{n-p} \neq 0$ nebo $b_{n-p} \neq 0$, jinak bychom mohli zmenšit číslo p. Jestliže $b_{-1} = 0$, pak se metoda (7) nazývá explicitní a hodnotu y_{n+1} lze přímo vypočítat. Jestliže $b_{-1} \neq 0$, pak metodu (7) nazýváme implicitní a je to implicitní rovnice pro neznámou y_{n+1}, kterou je nutno řešit iterací.

Koeficienty a_i, b_i určíme tak, aby formule (7) byla přesná pro všechny polynomy až do určitého stupně. Nebudeme však často určovat tyto koeficienty tak, abychom dosáhli přesnosti formule pro polynomy maximálního stupně. Necháme některé volné parametry a ty určíme tak, aby např. chyba byla co nejmenší nebo aby některé koeficienty byly nulové nebo aby vlastnosti šíření chyb byly co nejvýhodnější.

Požadujeme-li, aby metoda (7) byla přesná pro polynomy do stupně r včetně, pak koeficienty jsou vzájemně vázány $r+1$ podmínkami, které obdržíme tak, že do vzorce (7) dosadíme funkce $y(x) = x^j$, $j = 0,1,\dots,r$, tj. podmínkami

(8)
$$\begin{cases} \sum\limits_{i=o}^{p} a_i = 1, \qquad - \sum\limits_{i=o}^{p} i\, a_i + \sum\limits_{i=-1}^{p} b_i = 1 \\ \sum\limits_{i=o}^{p} (-i)^j a_i + j \sum\limits_{i=-1}^{p} (-i)^{j-1} b_i = 1, \quad j = 2,3,\dots,r. \end{cases}$$

Jsou-li splněny první dvě rovnice (přesnost pro lineární polynomy) formule se nazývá konzistentní. Jsou-li splněny všechny rovnice, formule se nazývá řádu r. V tomto případě je vázáno $2p+3$ koeficientů $r+1$ podmínkami.

1.3. Lokální chyba.

Přesné řešení Y splňuje rovnici

(9)
$$Y_{n+1} = \sum_{i=o}^{p} a_i Y_{n-i} + h \sum_{i=-1}^{p} b_i Y'_{n-i} + T_n ,$$

kde T_n značí lokální chybu v kroku od x_n do x_{n+1}.
Z Taylorova rozvoje (v bodě x_n) plyne platnost vztahů

$$Y_{n-i} = Y_n - ihY'_n + \frac{i^2h^2}{2!} Y''_n + \dots \frac{(-1)^r i^r h^r}{r!} Y_n^{(r)} + \\ + \frac{1}{r!} \int_{x_n}^{x_{n-i}} (x_{n-i} - s)^r \, Y^{(r+1)}(s)ds$$

$$Y'_{n-i} = Y'_n - ihY''_n + \dots + \frac{(-1)^{r-1} i^{r-1} h^{r-1}}{(r-1)!} Y_n^{(r)} + \\ + \frac{1}{(r-1)!} \int_{x_n}^{x_{n-i}} (x_{n-i} - s)^{r-1} \, Y^{(r+1)}(s)ds ,$$

kde r je řád formule (7). Dosadíme-li tyto vztahy do (9), pak za použití podmínek (8) pro koeficienty a_i, b_i obdržíme vyjádření pro lokální chybu.

$$T_n = \frac{1}{r!} \Big[\int_{x_n}^{x_{n+1}} (x_{n+1} - s)^r Y^{(r+1)}(s)ds - \sum_{i=o}^{p} a_i \int_{x_n}^{x_{n-i}} (x_{n-i} - s)^r \, . \\ . Y^{(r+1)}(s)ds - rh \sum_{i=-1}^{p} f_i \int_{x_n}^{x_{n-i}} (x_{n-i} - s)^{r-1} Y^{(r+1)}(s)ds \Big]$$

(Začátek Taylorových rozvojů pro dosazení vymizí, protože formule je přesná pro polynomy stupně r). Tento vzorec lze přepsat na tvar:

$$T_n = \frac{1}{r!} \int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} G(s) \, Y^{(r+1)}(s)ds ,$$

kde

$$G(s) = \overline{(x_{n+1} - s)^r} - rhb_{-1} \overline{(x_{n+1} - s)^{r-1}} + \\ + \sum_{i=1}^{p} \Big[a_i \overline{(x_{n-i} - s)^r} + rhb_i \overline{(x_{n-i} - s)^{r-1}} \Big] ,$$

$$\overline{(x_{n-i} - s)} = x_{n-i} - s \quad \text{pro} \quad x_{n-i} \leqq s \leqq x_n, \quad i \neq -1$$
$$\text{pro} \quad x_n \leqq s \quad , \quad i = -1$$
$$= 0 \qquad \text{jinde.}$$

Funkce $G(s)$ se nazývá účinková funkce. Má-li $G(s)$ stálé znaménko v $\langle x_{n-p}, x_{n+1} \rangle$, pak podle věty o střední hodnotě

$$T_n = \frac{Y^{(r+1)}(\eta)}{r!} \int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} G(s)ds , \qquad x_{n-p} < \eta < x_{n+1} .$$

Za tohoto předpokladu je chyba tvaru

(10)
$$T_n = C.h^{r+1} Y^{(r+1)}(\eta) ,$$

což je vidět z následujícího vyjádření integrálu (substituce $s = x_{n-p} + th$)

$$\int_{x_{n-p}}^{x_{n-1}} G(s)ds = h^{r+1} \Big[\int_{p}^{p+1} \big\{ (p+1-t)^r - rb_{-1}(p+1-t)^{r+1} \big\} dt + \\ + \sum_{i=o}^{p} \int_{p-i}^{p} \big\{ a_i(p-i-t)^r + rb_i(p-i-t)^{r-1} \big\} dt \Big] .$$

Koeficient C v (10) můžeme určit také tak, že do formule (7) dosadíme funkci $Y(x) = (x - x_n)^{r+1}$, neboť pro tuto funkci známe hodnotu $(r+1)$ derivace $Y^{(r+1)}(\xi) = (r+1)!$

Pokud ovšem účinková funkce mění znaménko v intervalu $[x_{n-p}, x_{n+1}]$, pak větu o střední hodnotě užít nelze a chybu nelze vyjádřit ve tvaru (10). Platí ovšem odhad

$$|T_n| \leqq \frac{|Y^{(r)}(\eta)|}{r!} \int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} |G(s)|\, ds ,$$

kde $x_{n-p} \leq \eta \leq x_{n+1}$ je bod, ve kterém funkce $|Y^{(r)}|$ nabývá maximální hodnoty na intervalu $[x_{n-p}, x_{n+1}]$.

1.4. Lineární diferenční rovnice s konstantními koeficienty.

V tomto odstavci se stručně zmíníme o řešení lineárních diferenčních rovnic, tj. rovnic tvaru

(11) $$a_k = y_{n+k} + a_{k-1} \cdot y_{n+k-1} + \dots + a_0 \cdot y_n = b(n) .$$

Zde a_j jsou známé konstanty, $a_k \neq 0$, k se nazývá <u>řád</u> diferenční rovnice. Uvažujme k rovnici (11) příslušnou homogenní rovnici

(12) $$a_k \cdot y_{n+k} + \dots + a \cdot y_n = 0 .$$

Jestliže známe počáteční hodnoty $y_0, y_1, \dots, y_{k-1}$ pak můžeme podle (11) spočítat rekurentně y_n pro libovolné n. Lehce se ověří, že platí:

1) lineární kombinace řešení rovnice (12) je opět řešení této rovnice.

2) je-li dáno k řešení rovnice (12) $y_{i,1}, y_{i,2}, \dots, y_{i,k}$ $(i = 0, 1, \dots)$ takových, že

(13) $$\begin{vmatrix} y_{1,1} & \dots & y_{k,1} \\ \vdots & & \\ y_{1,k} & \dots & y_{k,k} \end{vmatrix} \neq 0$$

(tzv. fundamentální systém řešení), pak libovolné řešení z_n rovnice (12) lze vyjádřit ve tvaru

$$z_n = c_1 y_{n,1} + c_2 y_{n,2} + \dots + c_k y_{n,k} ,$$

kde c_j jsou vhodné konstanty

3) obecné řešení rovnice (11) obdržíme jako součet partikulárního řešení w_n rovnice (12) a obecného řešení rovnice (11).

$$z_n = w_n + c_1 y_{n,1} + \dots + c_k y_{n,k} ; \quad c_j \text{ libovolné konstanty.}$$

Fundamentální systém řešení rovnice (12) lze získat i v analytickém tvaru. Hledejme řešení ve tvaru $y_n = z^n$, kde z je neznámé číslo. Po dosazení do rovnice (12) obdržíme, že z musí být kořenem tzv. charakteristické rovnice

(14) $$a_k z^k + a_{k-1} z^{k-1} + \dots + a_1 z + a_0 = 0 .$$

Jsou-li kořeny této rovnice různé, pak fundamentální systém je tvaru: $z_1^n, \dots, z_k^n$. Je-li $z = \rho(\cos\varphi + i \sin\varphi)$ komplexní číslo, pak rovnice

(14) má i kořen komplexně sdružený a existují dvě reálná řešení tvaru

$$\rho^n \cos n\varphi , \quad \rho^n \sin n\varphi .$$

Je-li z_i kořen násobnosti r, pak vezmeme funkce

$$z_i^n ,\ n z_i^n ,\ n^2 z_i^n , \dots ,\ n^{r-1} z_i^n \quad \text{pro } z_i \text{ reálné a}$$

$$\rho^n \cos n\varphi ,\ \rho^n \sin n\varphi ,\ n\rho^n \cos n\varphi , \dots ,\ n^{r-1}\rho^n \cos n\varphi ,\ n^{r-1}\rho^n \sin n\varphi$$

pro $z_i = \rho(\cos\varphi + i \sin\varphi)$.

Ve všech případech obdržíme fundamentální systém řešení rovnice (12).

1.5. Stabilita, konvergence.

Nyní si všimneme, jak dobře řešení diferenční rovnice (7) aproximuje přesné řešení rovnice (1). Budeme se zabývat pouze konzistentními vícekrokovými metodami. Prozkoumáme situaci nejprve pro konkrétní diferenciální rovnici

(15) $$y' = -Ky , \quad y(x_0) = y_0$$

s řešením $Y(x) = y_0 \cdot \exp\{-K(x-x_0)\}$. Pro tuto rovnici přejde rovnice (7) do

(16) $$y_{n+1}(1 + hKb_{-1}) = \sum_{i=0}^{p} (a_i - hKb_i) y_{n-i}$$

s obecným řešením

(17) $$y_n = \sum_{i=0}^{p} c_i r_i^n ,$$

kde c_i jsou konstanty a r_i řešení charakteristické rovnice

(18) $$(1 + hKb_{-1}) r^{p+1} = \sum_{i=0}^{p} (a_i - hKb_i) r^{p-i} .$$

Přitom předpokládáme, že její kořeny jsou reálné různé. Jsou-li násobné, ovlivní to sice detaily, ale ne podstatu. Nejprve ukážeme, že jeden kořen, označíme jej r_0 (jinak přehodíme pořadí členů v (17)), má asymptotické vyjádření

(19) $$r_0 = 1 - Kh + O(h^2)$$

(všimněte si, že tato vlastnost je vnitřní vlastností diferenční rovnice (16) a vůbec nezávisí na diferenciální rovnici (15)!). Z první rovnice konzistence (8) obdržíme, že rovnice (18) má pro $h = 0$ kořen $r_0 = 1$. Tedy hledejme pro $h = 0$ odpovídající kořen ve tvaru $r_0 = 1 + \sum_{i=1}^{\infty} \beta_i h^i$. Dosadíme toto vyjádření do (18):

$$(1 + hKb_{-1})(1 + \sum_{i=1}^{\infty} \beta_i h^i)^{p+1} = \sum_{i=0}^{p} (a_i - hKb_i)(1 + \sum_{i=1}^{\infty} \beta_i h^i)^{p-i} .$$

Provedením naznačených operací a porovnáním koeficientů u stejných mocnin h obdržíme podmínky pro koeficienty β_i :

$h^0 : 1 = \sum_{i=0}^{p} a_i$ (je to první rovnice konzistence)

$h^1 : K.\sum_{i=-1}^{p} b_i + \beta_1 \sum_{i=0}^{p} i.a_i + \beta_1 \left[p + 1 - p\sum_{i=0}^{p} a_i\right] = 0 .$

Odtud, za využití druhé rovnice konzistence obdržíme

$\beta_1 = -K$, což dokazuje vztah (19).

Protože $1 - Kh = e^{-Kh} + O(h^2)$, platí

(20) $r_0^k = (1 - Kh + O(h^2))^k = e^{-khK} + O(h^2) = e^{-K(x_k - x_0)} + O(h^2)$.

Konstanty c_i z vyjádření (17) můžeme určit pomocí (p+1) počátečních podmínek, dosazených do (17) (n = 0,1,...,p). Např. c_0 je dáno pomocí Cramerova pravidla

$$c_0 = \begin{vmatrix} y_0 & 1 & \dots & 1 \\ y_1 & r_1 & \dots & r_p \\ \vdots & \vdots & & \\ y_p & r_1^p & \dots & r_p^p \end{vmatrix} . \left(\begin{vmatrix} 1 & \dots & 1 \\ r_0 & & r_p \\ \vdots & & \vdots \\ r_0^p & \dots & r_p^p \end{vmatrix} \right)^{-1}$$

Počáteční podmínky jsou zatíženy jistou chybou, ale je rozumné předpokládat, že y_i se blíží k přesným hodnotám, tj. k y_0 pro $h \to 0^+$, i = 0, 1,...,p. Odtud za využití (19) vidíme, že $\lim_{h\to 0^+} c_0 = y_0$, což spolu s (20) značí, že výraz $c_0.r_0^n$ aproximuje přesné řešení diferenciální rovnice (15) pro malé hodnoty h. Ostatní členy v (17) se nazývají parazitní řešení a lze stejným způsobem ukázat, že $\lim_{h\to 0^+} c_i = 0$, $i \neq 0$. Tato řešení vznikají tím, že řád (p+1) diferenční rovnice je větší než řád 1 diferenciální rovnice. Úkolem je zvolit metodu (7) tak, aby parazitní řešení měla co možná nejmenší vliv na řešení diferenční rovnice (17).

Definice. Nechť počáteční podmínky $y_k = y_k(h)$, k = 0,1,...,p užité při řešení rovnice (7) jsou takové, že

(21) $\lim_{h\to 0^+} y_k(h) = y_0$, k = 0,...,p

Pak se metoda (7) nazývá konvergentní, jestliže pro libovolnou počáteční úlohu (1) má (7) vlastnost

(22) $\lim_{\substack{h\to 0^+ \\ (n\to\infty)}} y_n = Y(x)$, $nh = x - a$

pro všechna $x \in [a,b]$. Zde Y je přesné řešení rovnice (1).

Definice. Řekneme, že metoda (7) je stabilní podle Dahlquista, jestliže všechny kořeny r_j charakteristického polynomu

(23) $r^{p+1} = \sum_{i=0}^{p} a_i r^{p-i}$

jsou takové, že $|r_j| \le 1$ a ty, pro které $|r_j| = 1$ jsou jednoduché.

Věta 2. Metoda (7) je konvergentní právě tehdy, když je konzistentní a stabilní podle Dahlquista.

Důkaz. Dokážeme větu pouze z jedné strany - konzistence a stabilita je nutnou podmínkou pro konvergenci. Nechť tedy je metoda (7) konvergentní. Uvažujme úlohu $y' = 0$, $y(0) = 0$ s přesným řešením $Y \equiv 0$. Předpokládejme, že kořeny $r_0,\dots,r_p$ charakteristické rovnice (23) jsou reálné a jednoduché (pro komplexní a násobné kořeny je důkaz obdobný, ale složitější). Ukážeme, že pro tuto diferenciální rovnici jsou funkce

$y_k = \sum_{i=0}^{p} h.r_i^k$, k = p+1,p+2,... řešením rovnice (7). Ze vztahu (23) platí

$$r_j^{p+1} = \sum_{i=0}^{p} a_i r_j^{p-i} .$$

Odtud (násobením výrazem r_j^{k-p}): $r_j^{k+1} = \sum_{i=0}^{p} a_i r_j^{k-i}$.

Sečtěme tyto výrazy přes j = 0,...,p a vynásobme h:

$$\sum_{j=0}^{p} h\, r_j^{k+1} = \sum_{j=0}^{p} \sum_{i=0}^{p} a_i h\, r^{k-i} = \sum_{i=0}^{p} a_i \sum_{j=0}^{p} h\, r_j^{k-i} .$$

Tedy y_k je skutečně řešení rovnice (7) pro $y' \equiv 0$. Navíc z vyjádření y_k, k = 0,...,p vidíme, že je splněna podmínka (21), neboť koeficienty a_i a tedy ani r_i nezávisí na h. Aby platila konvergence $\lim_{h\to 0^+} y_n = Y(x) = 0$, h.n = x, tj.

$$\lim_{h\to 0^+} \sum_{i=0}^{p} h\, r_i^n = \lim_{h\to 0^+} \sum_{i=0}^{p} h\, r_i^{\frac{x}{h}} = 0 ,$$

musí být absolutní hodnota každého r_i menší nebo rovna jedné, tj. metoda musí být stabilní podle Dahlquista.

Uvažujme nyní rovnici $y' = 0$, $y(0) = 1$ s přesným řešením $Y(x) \equiv 1$. Pro tuto rovnici má vícekroková metoda tvar $y_{n+1} = \sum_{i=0}^{p} a_i y_{n-i}$. Nechť počáteční hodnoty jsou přesné, tj. jsou rovny jedné. Z definice konvergence plyne, že $\lim_{h\to 0^+} y_n = 1$, což dosazeno do předchozí rovnice dává přímo první podmínku konzistence. Uvažujme nakonec rovnici $y' \equiv 1$, $y(0) = 0$ s přesným řešením $Y(x) = x$. Pak rovnice (7) přejde do tvaru

(24) $y_{n+1} = \sum_{i=0}^{p} a_i y_{n-i} + h \sum_{i=-1}^{p} b_i$

Uvažujme posloupnost

(25) $y_n = n.h.A$, $A = \sum_{i=-1}^{p} b_i.(1 + \sum_{i=0}^{p} a_i.i)^{-1}$, n = 0,1,2,...

Tato posloupnost splňuje požadavky na počáteční podmínky (21) a vyhovuje rovnici (24):

$$(n+1)h\,A = \sum_{i=o}^{p} a_i(n-i)h\,A + h\sum_{i=-1}^{p} b_i$$

$$(n+1) = \sum_{i=o}^{p} a_i(n-i) + 1 + \sum_{i=o}^{p} i\,a_i = n\sum_{i=o}^{p} a_i + 1 = n+1 \ .$$

Protože však z předpokladu konvergence máme $\lim\limits_{h\to o^+} y_n = Y(x) = x = n.h$, plyne odtud porovnáním s (25), že $A = 1$, což značí platnost druhé rovnice konzistence a důkaz je ukončen.

Konvergenci jsme definovali pomocí limitního přechodu pro $h \to 0$. V praxi se ale zajímáme o to, co se děje pro nenulové hodnoty h, které musíme používat při konkrétních výpočtech. Budeme se nyní zabývat akumulovanou chybou. Definujme $\varepsilon_n = Y_n - y_n$. Platí

$$(26) \qquad Y_{n+1} = \sum_{i=o}^{p} a_i Y_{n-i} + h\sum_{i=-1}^{p} b_i Y'_{n-i} + T_n$$

$$(27) \qquad y_{n+1} = \sum_{i=o}^{p} a_i y_{n-i} + h\sum_{i=-1}^{p} b_i y'_{n-i} + R_n \ ,$$

kde T_n je chyba metody a R_n je lokální zaokrouhlovací chyba, neboť y_{n+1} nepočítáme přesně. Odhad pro R_n, jsou-li y_{n-i}, y'_{n-i} zaokrouhleny na d-desetinných míst je

$$|R_n| \leq 5 \ . \ 10^{-(d+1)}\Big(\sum_{i=o}^{p} |a_i| + h\sum_{i=-1}^{p} |b_i|\Big).$$

Ve většině případů je chyba metody větší než zaokrouhlovací chyba. Avšak v některých aplikacích (např. let řízených střel apod.) tomu může být naopak.

Odečtením rovnic (26),(27) obdržíme:

$$(28) \qquad \varepsilon_{n+1} = \sum_{i=o}^{p} a_i\,\varepsilon_{n-i} + b\sum_{i=-1}^{p} b_i\,\varepsilon'_{n-i} + E_n \ ,$$

kde E_n je lokální chyba v kroku od x_n do x_{n+1}, která zahrnuje chybu metody i zaokrouhlení. Podle věty o střední hodnotě

$$\varepsilon'_{n-i} = Y'_{n-i} - y'_{n-i} = f(x_{n-i}, Y_{n-i}) - f(x_{n-i}, y_{n-i}) =$$
$$= (Y_{n-i} - y_{n-i}) \cdot f_y(x_{n-i}, \eta_{n-i}) = \varepsilon_{n-i}\, f_y(x_{n-i}, \eta_{n-1}) \ ,$$

kde η_{n-i} leží mezi hodnotami y_{n-i}, Y_{n-i}.

Tedy po dosazení do (28)

$$(29) \qquad \varepsilon_{n+1}(1 - hb_{-1}f_y(x_{n+1}, \eta_{n+1})) = \sum_{i=o}^{p}(a_i + hb_i f_y(x_{n-i}, \eta_{n-i}))\varepsilon_{n-i} + E_n$$

Tuto rovnici nelze početně zvládnout bez jistých omezení. Místo parciální derivace f_y budeme uvažovat konstantu $-K$, která je nějakou charakteristickou hodnotou f_y v okolí bodů vystupujících v (29), podobně nechť E je charakteristickou hodnotou pro E_n. Protože se prakticky E_n a f_y pomalu mění, očekáváme, že se řešení rovnice (29) bude chovat jako řešení rovnice

$$(30) \qquad \varepsilon_{n+1}(1 + hb_{-1}K) = \sum_{i=o}^{p}(a_i - hb_i K)\,\varepsilon_{n-i} + E \ .$$

Její řešení je, jak lze snadno ověřit

$$(31) \qquad \varepsilon_n = \sum_{i=o}^{p} d_i r_i^n + \frac{E}{hK\sum\limits_{i=-1}^{p} b_i} \ ,$$

kde r_i jsou kořeny charakteristické rovnice

$$(32) \qquad (1 + hKb_{-1})r^{p+1} = \sum_{i=o}^{p}(a_i - hKb_i)r^{p-i} \ .$$

Zde pro jednoduchost předpokládáme, že kořeny jsou jednoduché.

Definice. Nechť metoda (7) je konzistentní a r_i, $i = 0,1,\dots,p$ jsou kořeny charakteristické rovnice (32), kde r_o je kořen, pro který platí $\lim\limits_{h\to o^+} r_o = 1$. Řekneme, že metoda je stabilní na intervalu $[\alpha,\beta]$, který musí obsahovat nulu, když pro všechna hK na tomto intervalu je

$$\left|\frac{r_i}{r_o}\right| \leq 1, \qquad i = 1,\dots,p$$

a když pro $|r_i| = |r_o|$ je r_i jednoduchý kořen.

Poznámka. Existence kořene r_o plyne z dokázaného vztahu (19) pro charakteristickou rovnici (18), resp. (32).

Bude-li metoda (7) stabilní na intervalu $[\alpha,\beta]$, pak parazitní řešení v (31) budou potlačena řešením $d_o r_o^n$ a celkovou chybu lze přibližně odhadnout vztahem

$$\varepsilon_n \approx d_o r_o^n + \frac{E}{hK\sum\limits_{i=-1}^{p} b_i} \ .$$

Koeficient d_o lze opět určit z počátečních hodnot. Označme pro jednoduchost chybu v počátečních podmínkách $y_o,\dots,y_p$ jako e. Pak z Cramerova pravidla, aplikovaného na (31) pro $n = 0,\dots,p$ plyne:

$$d_o = \begin{vmatrix} e+\gamma & 1 & \dots & 1 \\ \vdots & r_1 & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ e+\gamma & r_1^p & \dots & r_p^p \end{vmatrix} \cdot \left(\begin{vmatrix} 1 & \dots & 1 \\ r_o & & r_p \\ \vdots & & \vdots \\ r_o^p & \dots & r_p^p \end{vmatrix} \right)^{-1} , \qquad \gamma = -\frac{E}{hK\sum_{-1}^{p} b_i}$$

Položíme-li přibližně $r_o \approx 1$ (viděli jsme v (18), že r_o je blízko jedné), pak $d_o \approx e + \gamma$ a celková akumulovaná chyba je dána přibližným vztahem.

$$\varepsilon_n \approx \left(e - \frac{E}{hK\sum_{i=-1}^{p} b_i} \right) r_o^n + \frac{E}{hK\sum_{i=-1}^{p} b_i} . \tag{33}$$

Všimněme si, že stabilita metody závisí na dané diferenciální rovnici, neboť za $-K$ musíme vzít hodnotu charakterizující f_y. Tím, že požadujeme, aby interval $[\alpha, \beta]$ obsahoval nulu, máme zaručeno, že pro libovolné K můžeme učinit řešení stabilní tím, že zvolíme dostatečně malé h. Navíc porovnáním takto definované stability na intervalu a stability podle Dahlquista zjistíme, že stabilita podle Dahlquista, a tedy i konvergence, je nutnou podmínkou pro platnost stability na intervalu.

Poznamenejme ještě, že jestliže $|r_o| > 1$ pro malé h, což odpovídá případu $-K > 0$, je řešení rostoucí exponenciální funkce. Pak nelze očekávat, že udržíme chybu omezenou, a proto nepřekvapuje, že člen $d_o r_o^n$ ve vyjádření chyby (33) je neohraničený (vzhledem k n). To ale nevadí, neboť nám stačí udržet chybu malou vzhledem k přesnému řešení, a to právě vyjadřuje pojem stability na intervalu. Je však jasné, že nám chyba nesmí přerůst řešení, tj. číslo d_o musí být podstatně menší než c_o.

1.6. Metody prediktor - korektor

Uvažujme dvě numerické metody (R značí příslušné chyby metody).

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2} h (y'_{n+1} + y'_n) , \qquad R = -1/12\, h^3 Y'''(\eta_1)$$

$$y_{n+1} = y_{n-2} + 3/2 h (y'_n + y'_{n-1}) , \qquad R = 3/4 h^3 Y'''(\eta_2)$$

Obě jsou druhého řádu. První rovnice je obecně asi 9x přesnější. Ukazuje to na obecné pravidlo, že je vhodné užívat implicitních metod i přes obtíže, které přitom vznikají. Obecně implicitní rovnice musíme ovšem řešit iterací.

Nějakým způsobem určíme první aproximaci $y_{n+1}^{(o)}$, vypočítáme $f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(o)})$ a dosadíme do pravé strany (7) a provádíme iteraci. Rovnici (7) lze přepsat na tvar:

$$y_{n+1}^{(j+1)} = \sum_{i=o}^{p} (a_i y_{n-i} + h b_i y'_{n-i}) + h b_{-1} (y_{n+1}^{(j)})' .$$

Přesné řešení splňuje

$$y_{n+1} = \sum_{i=o}^{p} (a_i y_{n-i} + h b_i y'_{n-i}) + h b_{-1} y'_{n+1} .$$

Odečtením těchto rovnic obdržíme

$$y_{n+1} - y_{n+1}^{(j+1)} = h b_{-1} \left[y'_{n+1} - (y_{n+1}^{(j)})' \right] = h b_{-1} \cdot f_y(x_{n+1}, \eta^{(j)}) (y_{n+1} - y_{n+1}^{(j)}) ,$$

$\eta^{(j)}$ leží mezi body $y_{n+1}, y_{n+1}^{(j)}$. Jestliže platí

$|f_y| \leqq K$ v určitém okolí bodu $[x_{n+1}, y_{n+1}]$, které obsahuje body $[x_{n+1}, y_{n+1}^{(j)}]$, $j = 0,1,2,\dots$, pak

$$|y_{n+1} - y_{n+1}^{(j+1)}| \leqq h b_{-1} K \, |y_{n+1} - y_{n+1}^{(j)}|$$

a odtud indukcí

$$|y_{n+1} - y_{n+1}^{(j+1)}| \leqq (h b_{-1} K)^{j+1} . |y_{n+1} - y_{n+1}^{(o)}| . \tag{34}$$

Tedy iterace konverguje, je-li

$$h b_{-1} K < 1$$

a rychlost iterace je dána vztahem (34).

Důležitá věc je určení počáteční aproximace. Ze vztahu (34) vidíme, že čím přesnější bude počáteční aproximace, tím rychleji budou iterace konvergovat. Nejlepší pro určení poč. aproximace je použít některou explicitní formuli. Takto použitý systém formulí se nazývá metoda prediktor-korektor (předpověď - oprava).

Příkladem soustavy prediktor - korektor 4.řádu je Milnova metoda.

Prediktor: $$y_{n+1}^{(o)} = y_{n-3} + \frac{4}{3} h (2y'_n - y'_{n-1} + 2y'_{n-2})$$
$$(y_{n+1}^{(o)})' = f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(o)})$$

Korektor: $$y_{n+1}^{(j+1)} = y_{n-1} + \frac{1}{3} h \left[(y_{n+1}^{(j)})' + 4y'_n + y'_{n-1} \right] , \quad j = 0,1,2,\dots .$$

Chyby jsou $\frac{14}{45} h^5 Y^{(v)}(\eta_1)$ resp. $-\frac{1}{90} h^5 Y^{(v)}(\eta_2)$.

(Korektor je Simpsonovo pravidlo). Je důležité, jak uvidíme z rozboru chyby, aby prediktor a korektor byl stejného řádu. Jako prediktory mohou být použity např. Adamsovy extrapolační vzorce aj. V praxi se nejčastěji používají metody prediktor-korektor 4.řádu. Prediktory nejsou tak důležité pro výpočet a při jejich výběru se řídíme malým koeficientem u chyby.

Na Milnově metodě ukážeme, jak lze rozboru chyb užít ke zlepšení metody. U jiných metod to lze udělat úplně stejně.
Prediktor lze zapsat takto:

$$y_{n+1}^{(o)} = Y_{n-3} + \frac{4}{3} h (2Y'_n - Y'_{n-1} + 2Y'_{n-2}) - \varepsilon_{n-3} -$$

$$- 4/3h(2\varepsilon_n' - \varepsilon_{n-1}' + 2\varepsilon_{n-2}') = Y_{n+1} - \varepsilon_{n-3} -$$
$$- 4/3h(2\varepsilon_n' - \varepsilon_{n-1}' + 2\varepsilon_{n-2}') - \frac{14}{45} h^5 Y^{(V)}(\eta_1)$$

Zde ε_n je chyba, $\varepsilon_n = Y_n - y_n$.
Podobně korektor (vynecháme indexy)

$$y_{n+1} = Y_{n+1} - \varepsilon_{n-1} - 1/3h\,(\varepsilon_{n+1}' + Y\varepsilon_n' + \varepsilon_{n-1}') + \frac{1}{90} h^5 Y^{(5)}(\eta_2),$$

kde y_{n+1} je hodnota, kterou bychom získali, kdybychom rozřešili korektor přesně. Odečtením těchto rovnic získáme:

$$y_{n+1} - y_{n+1}^{(o)} = \frac{1}{90} h^5 Y^{(5)}(\eta_2) + \frac{14}{45} h^5 Y^{(5)}(\eta_1) -$$
$$1/3h(\varepsilon_{n+1}' - 4\varepsilon_n' + 5\varepsilon_{n-1}' - 8\varepsilon_{n-2}') + \varepsilon_{n-3} - \varepsilon_{n-1}.$$

Předpokládáme-li nyní, že se chyba ε_n od jednoho kroku ke druhému mění jen pomalu (pak $\varepsilon_n' \approx 0$) a že $Y^{(5)}$ se příliš nemění mezi hodnotami η_1, η_2, pak můžeme psát

$$y_{n+1} - y_{n+1}^{(o)} \sim \frac{29}{90} h^5 Y^{(5)}(\eta),$$

tedy

$$h^5 Y^{(5)}(\eta) \approx \frac{90}{29}\,(y_{n+1} - y_{n+1}^{(o)}).$$

Odtud lze určit přibližně chyby metody.

Korektor: $T_n = -\frac{1}{90} h^5 Y^{(5)}(\eta) \approx -\frac{1}{29}\,(y_{n+1} - y_{n+1}^{(o)})$

Prediktor: $T_n^{(o)} = \frac{14}{45} h^5 Y^{(5)}(\eta) \approx \frac{28}{29}\,(y_{n+1} - y_{n+1}^{(o)})$.

Jelikož podle našeho předpokladu se rozdíl mezi předpověděnou a opravenou chybou mění pomalu, můžeme položit:

$$T_n^{(o)} \approx \frac{28}{29}\,(y_n - y_n^{(o)}).$$

To nám dovoluje zlepšit Milneho metodu:

Prediktor: $y_{n+1}^{(o)} = y_{n-3} + 4/3h\,(2y_n' - y_{n-1}' + 2y_{n-2}')$

Modifikátor: $\bar{y}_{n+1}^{(o)} = y_{n+1}^{(o)} + \frac{28}{29}\,(y_n - y_n^{(o)})$

$(\bar{y}_{n+1}^{(o)})' = f(x_{n+1}, \bar{y}_{n+1}^{(o)})$.

Korektor: $y_{n+1}^{(j+1)} = y_{n-1} + 1/3h\,\left[(y_{n+1}^{(j)})' + 4y_n' + y_{n-1}'\right]$.

Pro nejlepší určení korektoru je nejdůležitější hledisko stabilita. Vzhledem k tomu, že metody 4.řádu jsou nejpoužívanější, nastíníme způsob, jak odvodit korektor co nejlepších vlastností.
Zvolíme tvar korektoru:

(35) $\quad y_{n+1} = a_o y_n + a_1 y_{n-1} + a_2 y_{n-2} + h\,(b_{-1} y_{n+1}' + b_o y_n' + b_1 y_{n-1}')$

K dosažení 4. řádu je třeba 5 koeficientů. My máme 6, proto zbývající koeficient použijeme k tomu, aby korektor byl stabilní. Požadavek na přesnost formule vede na:

$$(36)\quad \begin{cases} a_o = 1/8\,(9 - 9a_1), & b_{-1} = \frac{1}{24}\,(9 - a_1) \\ a_1 = a_1, & b_o = \frac{1}{12}\,(9 + 7a_1) \\ a_2 = -1/8\,(1 - a_1), & b_1 = 1/24\,(-9 + 17a_1) \end{cases}$$

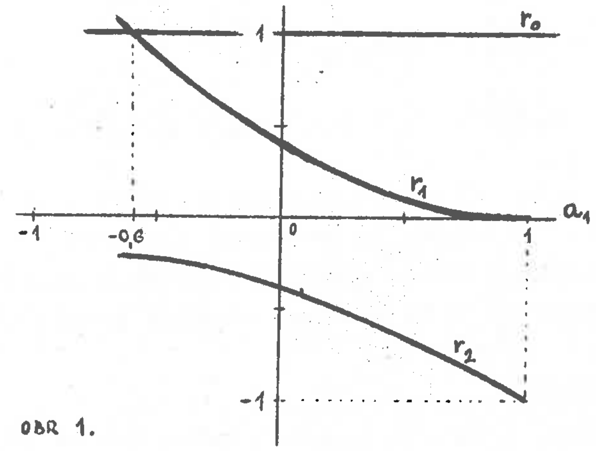
Zde a_1 je volný parametr. Účinková funkce ve výraze pro lokální chybu je

$$G(s) = (\overline{x_{n+1} - s})^4 + a_1(\overline{x_{n-1} - s})^4 + a_2(\overline{x_{n-2} - s})^4 +$$
$$+ 4h\left[-b_{-1}(\overline{x_{n+1} - s})^3 + b_1(\overline{x_{n-1} - s})^3\right].$$

Zde nám jde o to, pro které a_1 tato funkce nemění znaménko. Lze zjistit, že to je pro $a_1 \in \langle -0,6;\ 1,0 \rangle$. Pak chyba je tvaru $R = C.h^5 Y^{(5)}(\eta)$. Charakteristická rovnice (32) z definice stability na intervalu je tvaru

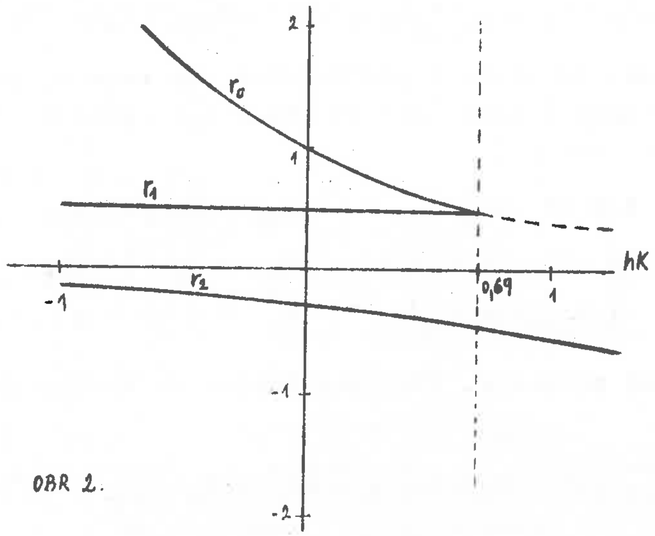
$$(1 + hKb_{-1})r^3 = (a_o - hKb_o)r^2 + (a_1 - hKb_1)r + a_2.$$

Hledáme, pro které hodnoty hK platí $\left|\frac{r_i}{r_o}\right| \leq 1$. Pro $h = 0$ (tj. stabilita podle Dahlquista) lze zjistit,
že kořeny charakteristické rovnice mají průběh znázorněný na obr. 1.



OBR. 1.

Vidíme tedy, že stabilita může nastat jen pro $-0,6 \leq a_1 \leq 1,0$.
Nejlepší poměr $\left|\frac{r_i}{r_o}\right|$ je okolo hodnoty $a_1 = 0$. Volme tedy dále $a_1 = 0$.
Na obr. 2 je nakreslen průběh kořenů charakteristické rovnice pro různá h a $a_1 = 0$.



OBR. 2.

Je vidět, že pro $hK \leqq 0{,}69$ je podmínka stability splněna. Koeficient $b_{-1} = 3/8$ a tedy pro konvergenci iterací korektoru je třeba $|hK| \ll 8/3$ (viz (34)). Tedy hodnota $|hK| \leqq 0{,}69$ není příliš omezující pro rychlost konvergence iterací.

Závěr: Ponecháme-li Milneův prediktor a použijeme-li tento korektor, obdržíme Hammingovu metodu: $|hK| \leq 0{,}69$

Prediktor: $y^{(o)}_{n+1} = y_{n-3} + \frac{4}{3}h\,(2y'_n - y'_{n-1} + 2y'_{n-2})$

Modifikátor: $\bar{y}^{(o)}_{n+1} = y^{(o)}_{n+1} + \frac{112}{121}\,(y_n - y^{(o)}_n)$

Korektor: $(\bar{y}^{(o)}_{n+1})' = f(x_{n+1}, \bar{y}^{(o)}_{n+1})$

$$y^{(j+1)}_{n+1} = \frac{1}{8}\,(9y_n - y_{n-2}) + \frac{3}{8}h\left[(y^{(j)}_{n+1})' + 2y'_n - y'_{n-1}\right].$$

Vícekrokové metody (7) mají některé nevýhody. Pro své použití vyžadují znalost $(p+1)$ počátečních podmínek (diferenciální rovnice (1) nám poskytuje pouze jednu) a nelze u nich vzhledem k ekvidistantním uzlům měnit krok. Jak překonat tyto obtíže, uvidíme později.

1.7. Metody Runge-Kutta.

Tyto metody jsou jednou z nejrozšířenějších metod v praxi. Nevyžadují dodatečných počátečních hodnot a lze je snadno naprogramovat. Nevýhodou je obtížné určení chyby a malá rychlost výpočtu, neboť se musí v jednom kroku počítat mnoho funkčních hodnot f.

Základem všech R - K. metod je vyjádření rozdílů mezi hodnotami v bodech x_{n+1}, x_n ve tvaru

(37) $$y_{n+1} - y_n = \sum_{i=1}^{m} \omega_i k_i\,,$$

kde ω_i jsou konstanty a

(38) $$k_i = h\,f(x_n + \alpha_i h,\ y_n + \sum_{j=1}^{i-1}\beta_{ij}k_j)\,,$$

$$h = x_{n+1} - x_n,\quad \alpha_1 = 0.$$

Naším cílem bude určit konstanty ω_i, α_i, β_{ij} tak, aby (37) dostatečně aproximovala řešení diferenciální rovnice (1). Konkrétně je určíme tak, aby koeficienty u h^r v Taylorově rozvoji pravé a levé strany (37) v bodě $[x_n, y_n]$ souhlasily pro $r = 1, 2, \ldots N$. V tom případě výsledný vzorec nazýváme metoda Runge-Kutta řádu N. Nelze dosáhnout lepšího výsledku než $N = m$. Odvození koeficientů naznačíme pro jednoduchost pro $m = 3$. Pro ostatní m je to obdobné, ale výpočty jsou příliš složité. Pro jednoduchost nebudeme rozlišovat označení mezi přesným a přibližným řešením. Budeme tedy uvažovat metodu

(39) $$\begin{aligned} y_{n+1} - y_n &= \omega_1 k_1 + \omega_2 k_2 + \omega_3 k_3 + R \\ k_1 &= h\,f(x_n, y_n) \\ k_2 &= h\,f(x_n + \alpha_2 h,\ y_n + \beta_{21}k_1) \\ k_3 &= h\,f(x_n + \alpha_3 h,\ y_n + \beta_{31}k_1 + \beta_{32}k_2)\,, \end{aligned}$$

kde R je chyba metody. Rozvoj levé strany (39) je

$$y_{n+1} - y_n = \sum_{t=1}^{\infty} \frac{h^t}{t!}\, y^{(t)}(x_n, y_n)\,,$$

kde

$$\begin{aligned} y' &= f \\ y'' &= f_x + f_y.f \\ y''' &= f_{xx} + 2f_{xy}.f + f_{yy}.f^2 + f_y f_x + f_y^2.f\,. \end{aligned}$$

Zavedeme-li označení $D = \frac{\partial}{\partial x} + f.\frac{\partial}{\partial y}$, pak

(40) $$y_{n+1} - y_n = \Big[h.f + \frac{h^2}{2}Df + \frac{h^3}{3!}(D^2f + f_yDf) + \frac{h^4}{4!}(D^3f + f_yD^2f + f_y^2Df + 3Df.Df_y)\Big]\Big|_n + O(h^5)\,.$$

Označení $|_n$ znamená, že všechny funkční hodnoty bereme v bodě $x = x_n$, $y = y_n$.

Rozvoj pravé strany (39): Označíme-li $D_i = \alpha_i\frac{\partial}{\partial x} + (\sum_{j=1}^{i-1}\beta_{ij})f\frac{\partial}{\partial y}$, pak

$$\begin{aligned} k_1 &= h.f|_n = h.f_n \\ k_2 &= h.f(x_n + \alpha_2 h,\ y_n + \beta_{21}h.f(x_n, y_n)) = \\ &= h.f + h^2D_2f + \frac{h^3}{2!}D_2^2f + \frac{h^4}{3!}D_2^3f\,\Big|_n + O(h^5) \end{aligned}$$

$$k_3 = h.f(x_n + \alpha_3 h,\ y_n + \beta_{31}k_1 + \beta_{32}k_2) =$$
$$= h.f(x_n + \alpha_3 h,\ y_n + (\beta_{31} + \beta_{32})hf_n + \beta_{32}(k_2 - h.f_n)) =$$
$$= h.\sum_{t=0}^{\infty} \frac{1}{t!}\left[hD_3 + \beta_{32}(k_2 - hf_n)\frac{\partial}{\partial y}\right]^t f_n =$$
$$= h.f + h^2 D_3 f + \frac{h^3}{2}(D_3^2 f + 2\beta_{32} f_y D_2 f) + \frac{h^4}{6}(D_3^3 f$$
$$+ 3\beta_{32} f_y D_2^2 f + 6\beta_{32} D_2 f D_3 f_y)\Big|_n + 0(h^5)\ .$$

Dosadíme-li tyto vztahy a (40) do rovnice (39) dostaneme na obou stranách rozvoje podle mocnin h. Porovnejme koeficienty u h, h^2, h^3:

$$\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 = 1$$

(41) $$\omega_2 D_2 f + \omega_3 D_3 f = \frac{Df}{2!}$$

$$\omega_2 \frac{D_2^2 f}{2} + \omega_3 \frac{D_3^2 f}{2} + \omega_3 \beta_{32} f_y D_2 f = \frac{1}{3!}(D^2 f + f_y Df).$$

(42) $$R = \gamma . h^4 + 0(h^5)$$

$$\gamma = -\frac{1}{4!}(D^3 f + f_y D^2 f + f_y^2 Df + 3Df\,Df_y)\Big|_n + \frac{1}{6}(D_3^3 f + 3\beta_{32} f_y\ .$$
$$.\ D_2^2 f + 6\beta_{32} D_2 f\, D_3 f_y)\Big|_n\ .$$

Tím máme ve skutečnosti ne 3, ale 6 rovnic pro určení koeficientů, neboť $\omega_i, \alpha_i, \beta_{ij}$ musí být nezávislé na funkci f, má-li být metoda užitečná.

Rozepišme poslední dvě rovnice (41) do parciálních derivací a porovnejme koeficienty u stejných derivací:

f_x: $\alpha_2\omega_2 + \alpha_3\omega_3 = 1/2$

f_y: $\beta_{21}\omega_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})\omega_3 = \frac{1}{2}$

f_{xx}: $\omega_2\alpha_2^2 + \omega_3\alpha_3^2 = 1/3$

f_{yy}: $\omega_2\beta_{21}^2 + (\beta_{31} + \beta_{32})^2\omega_3 = 1/3$

ff_xf_y: $\omega_2\alpha_2\beta_{21} + \omega_3\alpha_3(\beta_{31} + \beta_{32}) = 1/3$

f_xf_y: $\alpha_2\omega_3 . \beta_{32} = 1/6$

ff_y^2: $\omega_3\beta_{32} . \beta_{21} = 1/6$

Z posledních dvou rovnic plyne $\alpha_2 = \beta_{21}$ a z prvních dvou pak $\alpha_3 = \beta_{31} + \beta_{32}$. Celkově tedy máme pro určení koeficientů vztahy:

$$\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 = 1$$
$$\omega_2\alpha_2 + \omega_3\alpha_3 = 1/2$$

$$\omega_2\alpha_2^2 + \omega_3\alpha_3^2 = 1/3$$
$$\omega_3\alpha_2\beta_{32} = 1/6\ ,$$

což jsou rovnice pro $\omega_1, \omega_2, \omega_3, \alpha_2, \alpha_3, \beta_{32}$.

$$\left.\begin{aligned}\alpha_2 &= \beta_{21}\\ \alpha_3 &= \beta_{31} + \beta_{32}\end{aligned}\right\}\ \text{určuje}\ \beta_{21}, \beta_{31}$$

Vidíme, že máme 6 rovnic pro 8 proměnných; obecně dvě tedy můžeme libovolně volit. Dostáváme tedy nekonečně mnoho metod Runge-Kutta 3.řádu. Volné proměnné však v praxi nevolíme libovolně, nýbrž tak, aby se např. zjednodušil tvar Runge-Kuttova vzorce (některé koeficienty nulové) nebo aby odhad pro chybu byl co nejlepší.

Chyba metody je dána vztahem (42). Předpokládejme, že platí odhady

(43) $$|f(x,y)| \leqq M, \quad \left|\frac{\partial^{i+j} f}{\partial x^i \partial y^j}\right| \leqq \frac{L^{i+j}}{M^{j-1}}, \quad i + j \leqq 3$$

(druhý tvar byl zvolen proto, že vede k formálnímu zjednodušení). Rozpíšeme-li operátory D, D_i ve vyjádření (42) do parciálních derivací a odhadneme-li tyto derivace pomocí (43) obdržíme odhad pro γ, vyjádřený již pomocí známých veličin:

(44) $$|\gamma| \leqq \left[\left|\frac{1}{3} - \frac{4}{3}(\alpha_2^3\omega_2 + \alpha_3^3\omega_3)\right| + \left|\frac{1}{6} - 2\alpha_2^2\beta_{32}\omega_3\right| + \right.$$
$$\left. + \left|\frac{1}{2} - 4\alpha_2\alpha_3\beta_{32}\omega_3\right| + \frac{1}{12}\right] ML^3\ .$$

To je tedy způsob, jakým odhadujeme chybu metody. Podobně lze i pro Runge-Kuttovy metody jiných řádů obdržet podobný odhad. Např. pro metody 4. řádu platí

(45) $$|R| \leqq \gamma_4 h^5 + 0(h^6)\ ,$$

kde γ_4 lze vyjádřit pomocí koeficientů metody a odhadu parciálních derivací funkce f.

Odhad akumulované chyby je velice složitý a pesimistický a v praxi se jej nepoužívá. Pro kontrolu přesnosti se využívá následující úvahy. Spočítáme řešení diferenciální rovnice (1) s krokem h a potom znovu s krokem $\frac{h}{2}$. Liší-li se výsledky dostatečně málo, považujeme řešení za dostatečně přesné, v opačném případě zmenšíme krok.

Konkrétní užívané metody. Obecnou Runge-Kuttovu metodu budeme schématicky zapisovat ve tvaru

$$
\begin{array}{c|ccccc}
0 & & & & & \\
\alpha_2 & \beta_{21} & & & & \\
\alpha_3 & \beta_{31} & \beta_{32} & & & \\
\vdots & & & & & \\
\alpha_m & \beta_{m1} & \beta_{m2} & & \beta_{m,m-1} & \\
\hline
 & \omega_1 & \omega_2 & \cdots\cdots & \omega_{m-1} & \omega_m
\end{array}
$$

Uvedeme zde dvě metody třetího řádu, které mají význam - první z nich je ta, pro niž je minimalizován koeficient γ ve vyjádření chyby. (44)

0			
1/2	1/2		
3/4	0	3/4	
	2/9	1/3	4/9

0			
1/2	1/2		
1	-1	2	
	1/6	2/3	1/6

Metody 4. řádu:

0				
1/2	1/2			
1/2	0	1/2		
1	0	0	1	
	1/6	1/3	1/3	1/6

Tato metoda je v praxi nejčastěji používaná metoda Runge-Kutta.

Následující metoda je ta, pro niž je minimalizován koeficient γ_4 ve vyjádření chyby (45).

0				
0,4	0,4			
0,45573726	0,29697760	0,15875966		
1	0,21810038	-3,05096470	3,83286432	
	0,17476028	-0,55148053	1,20553547	0,17118478

Někteří autoři na základě počítačových testů doporučují jako nejvýhodnější Butcherův tvar metody Runge-Kutta 5. řádu.

0						
1/4	1/4					
1/4	1/8	1/8				
1/2	0	-1/2	1			
3/4	3/16	0	0	9/16		
1	-3/7	2/7	12/7	$-\frac{12}{7}$	8/7	
	7/90	0	32/90	12/90	32/90	7/90

1.8. Začátek řešení a změna kroku u vícekrokových metod.

Jak jsme již poznamenali, vícekrokové diferenční metody (7) mají několik nevýhod. Jedno z nich je, že pro své použití vyžadují $p+1$ počátečních podmínek, zatímco diferenciální rovnice (1) nám poskytuje pouze jednu. Ostatní je nutno spočítat jiným způsobem. V praxi jsou nejčastěji počítány některou z Runge-Kuttových metod. Mohou být počítány i jinými metodami - metodou postupných aproximací, rozvojem do Taylorovy řady. Tyto metody však nejsou z hlediska výpočtů na počítacích strojích výhodné, neboť obsahují analytické operace (derivace, integrály závislé na parametru).

Další nevýhodou vícekrokových metod je, že u nich nelze během výpočtu změnit krok. Je-li třeba v praxi změnit krok, pokračujeme ve výpočtu se změněným krokem některou Runge-Kuttovou metodou a po určitém počtu kroků se vrátíme opět k původní vícekrokové metodě.

Metody R.-K. jsou obvykle přesnější pro daný krok h než metody prediktor - korektor, ale je u nich nutno mnohokrát počítat funkční hodnotu v každém kroku. Proto jsou celkově metody prediktor - korektor rychlejší (asi 2x).

1.9. Cvičení.

1. Spočítejte několik prvních Adamcových extrapolačních a interpolačních formulí.
2. Dokažte, že je-li vícekroková metoda (7) řádu r, pak její koeficienty musí splňovat soustavu rovnic (8).
3. Odvoďte implicitní vzorec 5.řádu tvaru

$$y_{n+1} = ay_n + by_{n-1} + cy_{n-2} + dy_{n-3} + h(ey'_{n+1} + fy'_n + gy'_{n-1}) .$$

   Všechny koeficienty vyjádřete pomocí koeficientu b. Najděte tu hodnotu $0 < b \leq 1$, která dává jednoduché koeficienty.
4. Odvoďte explicitní metodu 4.řádu tvaru

$$y_{n+1} = a_j y_{n-j} + h(by'_n + cy'_{n-1} + dy'_{n-2} + ey'_{n-3}) \quad , \quad j = 0,1,2,3.$$

   Ukažte, jak by šlo každou z těchto metod odvodit integrací Lagrangeova interpolačního polynomu pro $y'(x)$.
5. Odvoďte explicitní tvar koeficientu C ve vyjádření chyby (10) pomocí aplikace vícekrokové metody na funkci $y(x) = (x - x_n)^{r+1}$.
6. Dokažte, že jestliže účinková funkce $G(s)$ mění znaménko v integračním intervalu $[a,b]$, existuje spojitá funkce $y(s)$ tak, že

$$\int_a^b G(s)y(s)\,ds \neq y(q) \int_a^b G(s)\,ds$$

   pro každé $q \in [a,b]$.

7. Uvažujte numerickou metodu

$$y_{n+1} = (1-a)y_n + ay_{n-1} + \frac{h}{12}\left[(5-a)y'_{n+1} + (8+8a)y'_n + (5a-1)y'_{n-1}\right].$$

Ukažte, že je tato metoda 3.řádu a zjistěte, pro která a účinková funkce $G(s)$ nemění znaménko. Určete chybu.

8. Pro $a = 1$ určete hodnoty hk, pro něž je metoda z předcházejícího příkladu stabilní.

9. Vyšetřte stabilitu nejjednodušších Adamsových metod.

10. Určete, jaké hodnoty h je možno volit pro konkrétní výpočet, řešíme-li rovnici

$$y' = \sin(x,y), \quad x \in [0,100], \quad y(0) = 1$$

metodou

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(5y'_{n+1} + 8y'_n - y_{n-1}).$$

11. Určete, jak velký může být krok h, aby iterační proces pro Adamsovu interpolační formuli 4.řádu konvergoval, aplikujeme-li ji na rovnici:

$$y' = -10y + 15, \quad y(0) = 1.$$

12. Nalezněte přibližné řešení rovnice $y' + 2xy = 2x^3$, $y(0) = 0$ v bodech $x = 0{,}1;\ 0{,}2;\ 0{,}3$ pomocí některé Runge-Kuttovy metody 4.řádu.

OKRAJOVÉ PROBLÉMY DIFERENCIÁLNÍCH ROVNIC

2. VARIAČNÍ METODY.

2.1. Okrajové problémy.

Okrajové problémy obyčejných a parciálních diferenciálních rovnic, popř. systémů rovnic se řeší různými metodami. Nejpoužívanější jsou tyto:

a) Variační metody - do této kategorie patří i metoda konečných prvků, která je v poslední době velice moderní.

b) Metoda sítí - je to nejrozšířenější metoda, v poslední době však ustupuje modernějším metodám.

c) Metody, které úlohu ve více dimenzích převádějí na posloupnost úloh jednodimenzionálních.

2.2. Hilbertův prostor.

V této kapitole shrneme některé základní pojmy a věty z funkcionální analýzy, které budeme dále potřebovat. Důkazy a podrobnou teorii lze nalézt např. v knize [9].

Říkáme, že M je lineál (lineární prostor), jestliže

a) pro libovolné prvky $u \in M$, $v \in M$ a libovolné reálné číslo a je definován součet $u + v \in M$ a součin $a.u \in M$ s vlastnostmi

$$\begin{aligned} u + v &= v + u & u + (v + z) &= (u + v) + z \\ a(u + v) &= au + av & (a + b)u &= au + bv \\ a(bu) &= (ab)u & 1 \,.\, u &= u \end{aligned}$$

b) existuje jediný prvek 0, který má vlastnost $u + 0 = u$, $u \in M$

c) ke každému prvku $u \in M$ existuje jediný prvek $v \in M$ s vlastností

$$u + v = 0.$$

Prvky $u_1, \dots, u_n$ lineárního prostoru M se nazývají lineárně nezávislé, když platí

$$\lambda_1 u_1 + \lambda_2 u_2 + \dots + \lambda_n u_n = 0 \Rightarrow \lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_n = 0.$$

V opačném případě se nazývají lineárně závislé. Prvky množiny $\{u_n\}_1^\infty$ se nazývají lineárně nezávislé, jsou-li lineárně nezávislé prvky libovolné její konečné podmnožiny.

Nechť $P = \{u_n\}$ je nejvýše spočetná množina, $P \subset M$. Množina všech prvků x tvaru $x = \sum_{i=1}^{k} \lambda_i u_i$, λ_i libovolná reálná čísla, k libovolné přirozené číslo, se nazývá lineární obal množiny P.

Říkáme, že na lineálu M je definován skalární součin, je-li každé