# Numerické řešení obyčejných diferenciálních rovnic

- z hlediska numerického je zásadní rozdíl mezi řešením obyčejných diferenciálních rovnic (ODR) s počátečními nebo okrajovými podmínkami:

  1) <u>počáteční úloha</u> (initial value problem) – máme zadánu funkční hodnotu a případně derivace v jednom bodě (typicky v určitém čase) a iteračně hledáme řešení v následných bodech (časech)

  2) <u>okrajová úloha</u> (boundary value problem) – funkce je zadána v různých bodech a hledáme řešení mezi těmito body
     - řešíme obvykle převedením na soustavu lineárních rovnic diskretizací nebo rozvojem do báze

zde se budeme zabývat počáteční úlohou, okrajové úlohy budou probírány v letním semestru

- <u>matematická formulace počáteční úlohy pro ODR</u>

Nalezněte $u(t) : \langle 0,T\rangle \to \mathbb{C}^d$ splňující rovnici

$$u'(t) \equiv \frac{du}{dt} = f(u(t),t) \quad \text{s poč. podmínkou } u(t=0) = u_0,$$

kde $f$ je zadaná funkce (obecně vektorová) $f : \mathbb{C}^d \times \langle 0,T\rangle \to \mathbb{C}^d$, která může být (a obvykle je) nelineární.

Pozn: 1) obecně tedy uvažujeme systém ODR, neboť $u(t) \in \mathbb{C}^d$

2) díky tomu jsou zahrnuty i počáteční úlohy pro ODR vyšších řádů, neboť stačí zavést proměnné $u_1(t) = u(t)$, $u_2(t) = u'(t)$, atd.

3) BÚNO pokládáme poč. čas $t_0 = 0$, vždy lze posunout

4) pro $f(u,t) = f(t)$ jde o integraci

$$u(t) = u_0 + \int_0^t f(t')\,dt'$$

, proto se můžete setkat i s pojmem numerická integrace ODR

- <u>otázka existence a jednoznačnosti řešení</u>
  - viz matematická analýza
  - standardní Cauchyho předpoklady pro existenci a jednoznačnost řešení jsou: a) $f$ je spojitá
    b) $f$ je stejnoměrně Lipschitzovská vzhledem k $u$, tj. existuje konstanta $L>0$ taková, že

vhodná vektorová norma

$$\|f(u,t)-f(v,t)\| \leq L\|u-v\| \quad \text{pro } \forall u,v \in \mathbb{C}^d \text{ a } t\in\langle 0,T\rangle$$

Pozn: pokud existuje $\frac{\partial f}{\partial u}$, pak musí být omezená $L$ všude

- příklady: 1) $u'(t) = u^2 = f(u)$, $u(0)=1$

  zde $f$ není Lipschitzovská, neboť

  $|u^2-v^2| = |u+v||u-v|$ má být $\leq L|u-v|$

  pak by $L$ muselo být nekonečné!

  řešení je $u(t) = \frac{1}{1-t}$, které v konečném čase $t=1$ diverguje a pro $t>1$ tedy neexistuje

  2) $u'(t) = \sqrt{u} = f(u)$, $u(0)=0$

  i zde $f$ není Lipschitzovská, neboť $\frac{\partial f}{\partial u} = \frac{1}{2\sqrt{u}} \to \infty$ pro $u\to 0$

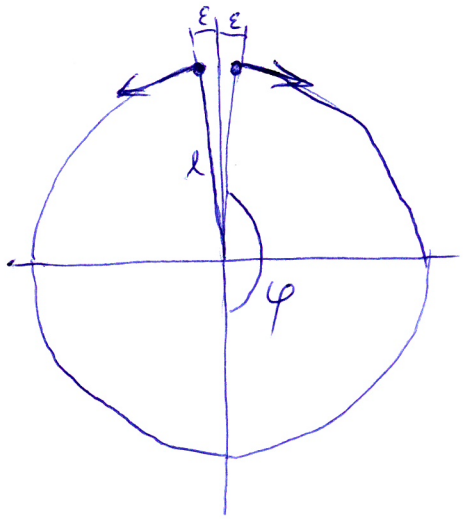
  ovšem řešení existuje, ale není jednoznačné, neboť jak $u(t)=0$, tak $u(t)=\frac{t^2}{4}$ úlohu splňují.

- Lipschitzova konstanta $L$ říká, jak moc se řešení pro různé počáteční podmínky rozbíhají nebo naopak sbíhají. oba extrémy (velká rozbíhavost, nebo naopak rychlá sbíhavost) způsobují numerické problémy

- <u>problém špatné podmíněnosti</u>
  - existují rovnice, kde libovolně blízké počáteční můžou vést na dramaticky rozdílná řešení, mnohdy se jedná o chaotické systémy

Př: fyzické kyvadlo popsané rovnicí

$$\ddot{\varphi}(t) = -\frac{g}{\ell}\sin\varphi(t)$$




má pro poč. podmínky

$$\varphi(0) = \pi \pm \varepsilon \quad \text{a} \quad \dot{\varphi}(0) = 0$$

zcela jiné, i když jednoznačné, řešení. Lipschitzova konstanta je

$$L = \max\left(1, \frac{g}{\ell}\right)$$

neboť pro $u = \begin{pmatrix}\varphi\\ \dot{\varphi}\end{pmatrix}$ splňující $\frac{du}{dt} = \frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\varphi\\ \dot{\varphi}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\dot{\varphi}\\ -\frac{g}{\ell}\sin\varphi\end{pmatrix} = f(u)$

dostaneme (označme si $v = \begin{pmatrix}\psi\\ \dot{\psi}\end{pmatrix}$)

$$\begin{aligned}\|f(u) - f(v)\|_\infty &= \max\left(|\dot{\varphi} - \dot{\psi}|, \frac{g}{\ell}|\sin\varphi - \sin\psi|\right) \le \\ &\le \max\left(|\dot{\varphi} - \dot{\psi}|, \frac{g}{\ell}|\varphi - \psi|\right) \le \\ &\le \max\left(1, \frac{g}{\ell}\right)\max\left(|\dot{\varphi} - \dot{\psi}|, |\varphi - \psi|\right) = \\ &= \max\left(1, \frac{g}{\ell}\right)\|u - v\|_\infty\end{aligned}$$

- <u>numerické řešení ODR - základní pojmy</u>
  - typicky hledáme řešení $u(t)$ ODR $u'(t) = f(u(t), t)$, $u(t_0) = u_0$ pouze v diskrétních časech $t_n = t_0 + n k_n$, tj. <u>přibližné řešení</u>

$$v^n \simeq u(t_n)$$

přičemž <u>časový krok</u> $k_n$ je často konstantní ($k$), i když existují např. adaptivní metody, které mění krok pro dosažení vyšší přesnosti

- metody se obvykle dělí na
  1) <u>jednokrokové metody</u> - řešení $v^{n+1}$ závisí v každém kroku pouze na $v^n$

     výhody: lze snadno změnit krok, vhodné pro problémy s nespojitými funkcemi

     nevýhody: pro vyšší přesnost nutné počítat $f(u,t)$ i v mezibodech mezi $t_n$ a $t_{n+1}$ (víceúrovňové metody)

  - příklade - jsou <u>Rungeovy-Kuttovy metody</u>

a 2) <u>vícekrokové metody</u> - $v^{n+1}$ se počítá z předchozích s kroků (s-kroková metoda)

tj. z $v^n, v^{n-1}, \dots, v^{n-s+1}$

výhody: k výpočtu $v^{n+1}$ typicky stačí jedno vyčíslení pravé strany $f(v,t)$, ostatní z předchozích kroků a tedy můžou být rychlejší při vyšší přesnosti

nevýhody: náročnější inicializace (potřebujeme na začátku s počátečních hodnot - - např. lze použít Rungeovu-Kuttovu metodu)

obtížná změna kroku

předpokladem je spojitost vyšších derivací

- příkladem jsou <u>lineární vícekrokové metody</u>

- dále dělíme metody na

<u>explicitní</u> - k nalezení $v^{n+1}$ nepotřebujeme $f(v^{n+1}, t_{n+1})$

a <u>implicitní</u> - $v^{n+1}$ závisí na $f(v^{n+1}, t_{n+1})$ - je tedy nutné řešit (typicky nelineární) rovnici pro $v^{n+1}$ (iterační metody)

- někdy se používají tzv. <u>metody prediktor-korektor</u> kdy do implicitního schématu dosazujeme za $v^{n+1}$ do $f(v^{n+1}, t_{n+1})$ odhad určený z explicitní metody

- výhodou implicitních metod je <u>vyšší stabilita</u> (později)

- <u>lokální a globální diskretizační chyba</u>

- v každém kroku délky $k$ se dopouštíme <u>lokální chyby</u>, kterou můžeme určit z Taylorova rozvoje, a jejíž první člen bude řádu $\mathcal{O}(k^{p+1})$, kde $p$ nazýváme <u>řád přesnosti metody</u>

Př: nejjednodušší metoda - tzv. <u>explicitní Eulerova metoda</u>

aproximuje $\frac{du(t_n)}{dt} \approx \frac{v^{n+1} - v^n}{k} = f(v^n, t_n)$

a tedy $v^{n+1} = v^n + k f(v^n, t_n)$

lokální diskretizační chybu určíme tak, že za $v^n$ položíme $u(t)$ a za $v^{n+1}$ hodnotu $u(t+k)$ a určíme z Taylorova rozvoje chybu aproximace $u(t+k)$ pomocí daného rekurentního vztahu.

tj. $$u(t+k) - u(t) - k\underbrace{f(u(t),t)}_{u'(t)} = u(t) + ku'(t) + \frac{k^2}{2}u''(t) + \dots - u(t) - ku'(t) =$$

$$= \frac{k^2}{2}u''(t) + O(k^3) = O(k^{p+1})$$

neboli $p=1$ pro explicitní Eulerovu metodu

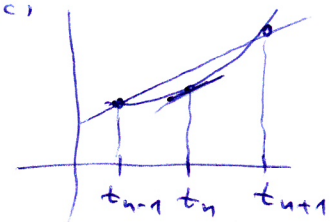
- pokud je lokální chyba řádu $O(k^{p+1})$, lze za poněkud obecných předpokladů jak pro jednokrokové, tak vícekrokové metody ukázat, že <u>globální chyba bude řádu $O(k^p)$</u> pokud je daná metoda stabilní (tj. nedochází k růstu chyb v následných iteracích)

takový výsledek lze očekávat, neboť pro určení $v^n$ potřebujeme $\frac{t_n}{k}$ kroků s lokální chybou $O(k^{p+1})$ a tedy celková chyba by měla být $O(\frac{t_n}{k}k^{p+1}) = O(k^p)$

- v praxi se samozřejmě projevuje též <u>zaokrouhlovací chyba</u>, a tedy podobně jako u numerické derivace existuje i zde jistá optimální volba kroku $k$ minimalizující obě chyby zároveň, opět pro vyšší přesnost potřeba metod vyšších řádů

Př. <u>metoda leap-frog</u> (též midpoint) – 2-kroková metoda druhého řádu

aproximujeme derivaci v bodě $t_n$ pomocí centrované diference




$$\frac{du(t_n)}{dt} \approx \frac{v^{n+1} - v^{n-1}}{2k} \approx f(v^n, t_n)$$

neboli $$v^{n+1} = v^{n-1} + 2kf(v^n, t_n)$$

a tedy $$u(t+k) - u(t-k) - 2kf(u(t),t) =$$
$$= \cancel{u(t)} + \cancel{ku'(t)} + \cancel{\frac{k^2}{2}u''(t)} + \frac{k^3}{3!}u'''(t) + O(k^4)$$
$$- \cancel{u(t)} + \cancel{ku'(t)} - \cancel{\frac{k^2}{2}u''(t)} + \frac{k^3}{3!}u'''(t) + O(k^4) - \cancel{2ku'(t)} =$$
$$= \frac{k^3}{3}u'''(t) + O(k^4) = O(k^{p+1}) \Rightarrow p=2$$

- <u>jednokrokové metody vyšších řádů</u>

obecná jednokroková metoda je $v^{n+1} = v^n + k\,\Phi(v^n, t_n, k)$

a její lokální diskretizační chyba

$$u(t+k) - u(t) - k\,\Phi(u(t), t, k) = \mathcal{O}(k^{p+1})$$

aby metoda byla alespoň řádu $p=1$, musí

platit $\quad \Phi(u(t), t, 0) = f(u(t), t)$

vhodnou volbou $\Phi$ dostáváme metody vyšších řádů

1) <u>metoda Taylorova rozvoje</u> - nutné vyčíslit derivace $f(u(t),t)$

plyne přímo dosazením za $u'(t) = f(u(t),t)$, $u''(t) = \frac{\partial f}{\partial u} u'(t) + \frac{\partial f}{\partial t}$ atd.

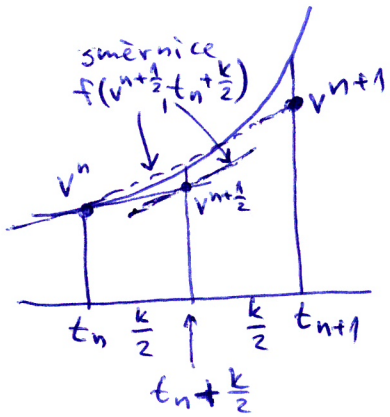
do $\quad u(t+k) = u(t) + k\,u'(t) + \frac{k^2}{2} u''(t) + \dots$

dostaneme

$$v^{n+1} = v^n + k\overbrace{\left[f(v^n, t_n) + \frac{k}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial t}\Big|_{(v^n,t_n)} + f(v^n,t_n)\frac{\partial f}{\partial u}\Big|_{(v^n,t_n)}\right) + \dots\right]}^{\Phi(v^n,t_n,k)}$$

2) <u>Rungeovy - Kuttovy metody</u> - lepší, není nutná derivace

motivace - RK metoda 2. řádu




nejprve „nastřelíme" do $t = t_n + \frac{k}{2}$ pomocí expl. Eulerovy metody

$$v^{n+\frac{1}{2}} = v^n + \frac{k}{2} f(v^n, t_n)$$

a pak aproximuje derivaci v $t = t_n + \frac{k}{2}$

jako $\quad \underbrace{\frac{v^{n+1} - v^n}{k}}_{\text{centrovaná diference v bodě } t_n + \frac{k}{2}} = f\left(v^{n+\frac{1}{2}}, t_n + \frac{k}{2}\right) = f\left(v^n + \frac{k}{2} f(v^n, t_n), t_n + \frac{k}{2}\right)$

- jde o metodu 2. řádu neboť

$$u(t+k) - u(t) - k f\left(u(t) + \frac{k}{2} f(u(t), t), t + \frac{k}{2}\right) =$$

$$= u(t) + k\,u'(t) + \frac{k^2}{2} u''(t) + \mathcal{O}(k^3) - u(t) - k f(u(t), t)$$

$$- \frac{k^2}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial u} f(u(t), t) + \frac{\partial f}{\partial t}\right) + \mathcal{O}(k^3) = \mathcal{O}(k^3)$$

toto už není nulové
ač jsme to neukázali

obecnou metodu lze psát

$$\text{r mezikroků (úrovní)} \quad \begin{cases} y_1 = v^n + k\sum_{j=1}^{r} a_{1j} f(y_j, t_n + c_j k) \\ \vdots \\ y_r = v^n + k\sum_{j=1}^{r} a_{rj} f(y_j, t_n + c_j k) \end{cases}$$

$$v^{n+1} = v^n + k\sum_{j=1}^{r} b_j f(y_j, t_n + c_j k)$$

$\Longleftrightarrow$ Butcherova tabulka

$$\begin{array}{c|ccc} c_1 & a_{11} & \cdots & a_{1r} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_r & a_{r1} & \cdots & a_{rr} \\ \hline & b_1 & \cdots & b_r \end{array}$$

většinou se používají explicitní metody

pokud lib. $a_{ij} \neq 0$ pro $j \geq i$, pak jde o implicitní metodu

2. řádu (viz výše)

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \hline & 0 & 1 \end{array}$$

4. řádu

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{array} \Longleftrightarrow$$

$$\begin{aligned} y_1 &= v^n \\ y_2 &= v^n + \tfrac{k}{2} f(y_1, t_n) \\ y_3 &= v^n + \tfrac{k}{2} f(y_2, t_n + \tfrac{k}{2}) \\ y_4 &= v^n + k f(y_3, t_n + \tfrac{k}{2}) \\ v^{n+1} &= v^n + \tfrac{k}{6}\left[f(y_1, t_n) + 2f(y_2, t_n + \tfrac{k}{2}) + 2f(y_3, t_n + \tfrac{k}{2}) + f(y_4, t_n + k)\right] \end{aligned}$$

- aby bylo $p \geq 1$, tj. aby $\Phi(v^n, t_n, 0) = f(v^n, t_n)$ musí zřejmě platit $\sum_{j=1}^{r} b_j = 1$

- pro $p \geq 2$ navíc dostaneme z Taylorova rozvoje (ponechány pouze členy do $k^2$)

$$u(t+k) - u(t) - k\sum_{j=1}^{r} b_j f\Big(u(t) + k\sum_{m=1}^{r} a_{jm} \underbrace{f(u(t), t)}_{\text{zde zahozeny členy } O(k)}, t + c_j k\Big) =$$

$$= k u'(t) + \frac{k^2}{2} u''(t) + O(k^3)$$

$$- k\sum_{j=1}^{r} b_j f(u(t), t) - k^2 \underbrace{\sum_{j=1}^{r} b_j \Big(\sum_{m=1}^{r} a_{jm} \frac{\partial f}{\partial u} f(u(t), t) + c_j \frac{\partial f}{\partial t}\Big)}_{\text{toto má být}}$$

$$\Downarrow \quad 1 = \sum_{j=1}^{r} b_j$$

$$\frac{u''(t)}{2} = \frac{1}{2}\Big(\frac{\partial f}{\partial u} f(u(t), t) + \frac{\partial f}{\partial t}\Big)$$

a tedy $\sum_{m=1}^{r} a_{jm} = c_j$ a $\sum_{j=1}^{r} b_j c_j = \frac{1}{2}$

aby $p \geq 2$

- obecně více metod určitého řádu (i pro explicitní metody)
  $\Rightarrow$ dodatečné podmínky (stabilita, min. koeficient u lokální chyby apod.)
- podrobně viz Butcher: Numerical Methods for ODE, Wiley 2008