Obyčejné diferenciální rovnice – počáteční úlohy

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

- y může být vektor (řešíme soustavu)
- rovnici vyššího řádu můžeme převést na soustavu rovnic 1. řádu (ovšem zpravidla bude efektivnější mít metodu šitou na míru)

$$y'' = f(x, y, y'), \quad \text{subst. } z = y' \quad \Rightarrow \quad z' = f(x, y, z), \;\; y' = z$$

- Runge–Kutta: $\oplus$ nepotřebují historii
  $\oplus$ snadná změna kroku (i adaptivní)
  $\oplus$ dobrá stabilita
  $\ominus$ více výpočtů pravé strany
- prediktor-korektor: $\oplus$ efektivnější (méně výpočtů pravé strany),
  $\ominus$ start – musíme si předem napočítat historii
  $\ominus$ nesnadná změna kroku
  $\ominus$ mohou být nestabilní
- metody pro dynamické systémy ($\ddot{r} = f(r, \dot{r}, t)$):
  symplektické či aspoň reverzibilní ($\Rightarrow$ zachování energie)
  metody prediktor-korektor

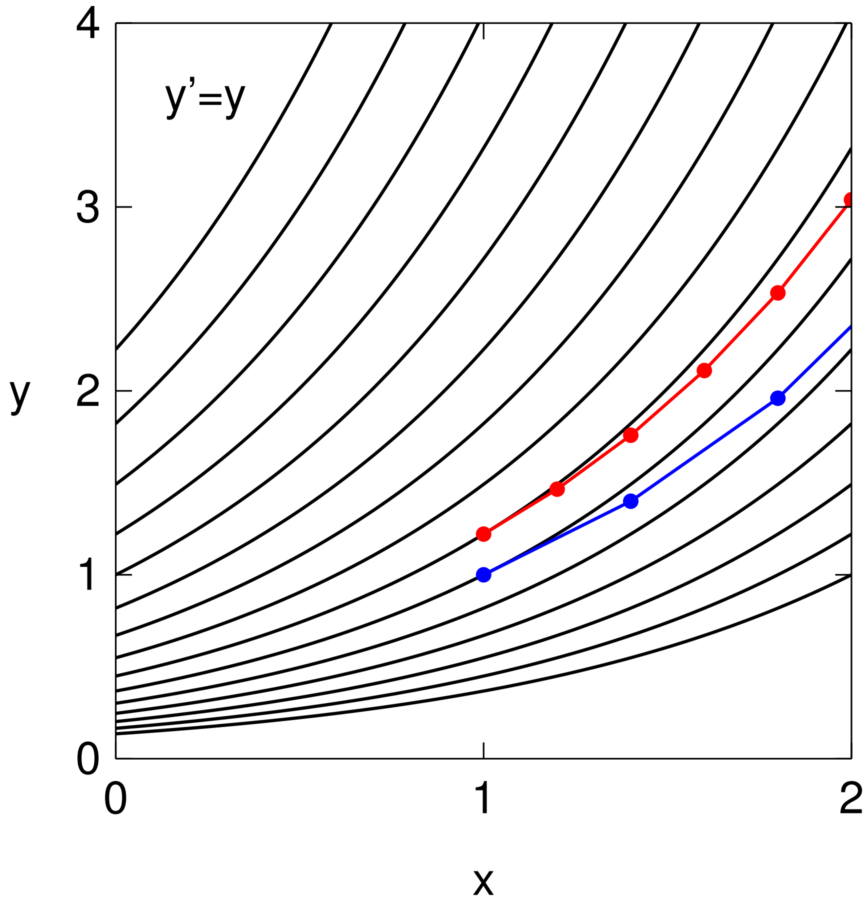
Rozcvička: Eulerova metoda

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

1 krok:

$$y(x+h) = y(x) + hy' + \mathcal{O}(h^2) = y(x) + hf(x, y) + \mathcal{O}(h^2)$$

Metoda je lokálně 2. řádu, na konečném intervalu musíme provést $\propto 1/h$ kroků, tedy globální chyba je $\mathcal{O}(h)$ (metoda 1. řádu).



Runge–Kutta 2. řádu (RK2)

Zpřesnění (styl lichoběžník) – ve tvaru metody Runge–Kutta (RK2):

$$\begin{aligned} k_1 &:= f(x, y) \\ k_2 &:= f(x+h, y(x)+hk_1) \\ y(x+h) &:= y(x) + \tfrac{h}{2}(k_1+k_2) \\ x &:= x+h \end{aligned}$$

není-li uveden argument funkce, je to x

K odvození řádu: $y'' = df(x,y)/dx = f_x + f_y y' \Rightarrow$

$$\begin{aligned} y(x+h) &= y(x) + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) \\ &\overset{\mathcal{O}(h^3)}{\approx} y(x) + \frac{h}{2}(y' + y' + hf_x + hf_y f) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2} y''(x) \end{aligned}$$

Tedy metoda má lokální chybu $\mathcal{O}(h^3)$ (nebo lepší) a je (alespoň) 2. řádu.

Jiné **zpřesnění** (styl poloviční krok nebo obdélník):

$$\begin{aligned} k_1 &:= f(x, y) \\ k_2 &:= f(x+\tfrac{h}{2}, y(x)+\tfrac{h}{2}k_1) \\ y(x+h) &:= y(x) + hk_2 \\ x &:= x+h \end{aligned}$$

Stejný řád chyby, menší koeficient

Runge–Kutta 4. řádu (RK4)

Populární metoda 4. řádu (lokální chyba $\mathcal{O}(h^5)$) s dobrým chováním:

$$
\begin{aligned}
k_1 &:= f(x, y) \\
k_2 &:= f(x + \tfrac{h}{2}, y(x) + \tfrac{h}{2}k_1) \\
k_3 &:= f(x + \tfrac{h}{2}, y(x) + \tfrac{h}{2}k_2) \\
k_4 &:= f(x + h, y(x) + hk_3) \\
y(x+h) &:= y(x) + \tfrac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\
x &:= x + h
\end{aligned}
$$

Prediktor-korektor

Známe historii, tj. hodnoty (a/nebo derivace, tj. pravé strany).

- prediktor: predikujeme $y^P(x+h)$:
  – používáme pravou stranu (obv. stabilnější a přesnější)
  – nepoužíváme pravou stranu
  (Gearovy metody – extrapolace polynomem)
- [případně modifikátor]
- korektor: počítáme výslednou hodnotu $y^C(x+h)$:
  – počítáme pravou stranu jednou
  – počítáme pravou stranu víckrát
  – počítáme pravou stranu jednou nebo víckrát iteračně

Problém – **stabilita**: chyby v každém kroku se propagují do dalších kroků, metoda musí být navržena tak, že chyby se pokud možno nekumulují a hlavně nerostou exponenciálně.

Pokud koeficienty metody jsou velké a střídají znaménka, metoda bude pravděpodobně nestabilní.

Prediktor-korektor

Nejprve přepišme RK2 do tvaru prediktor-korektor takto:

$$\begin{aligned} y^P(x+h) &= y(x) + hf(x, y(x)) + \mathcal{O}(h^2) \\ y^C(x+h) &= y(x) + \tfrac{h}{2}\big[f(x, y(x)) + f(x+h, y^P(x+h))\big] + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned}$$

druhý krok je $\mathcal{O}(h^3)$, protože je to lichoběžník, a chyba $y^P(x+h)$ je $h\mathcal{O}(h^2)$.

Zkusme nyní vylepšit oba kroky. **Prediktor:**

$$y^P(x+h) = y(x) + \tfrac{h}{2}\big[3f(x) - f(x-h)\big] + \mathcal{O}(h^3)$$

kde $f(x) \equiv f(x, y(x)))$ a $f(x-h) \equiv f(x-h, y(x-h))$ (z předchozího kroku). **Korektor** hledejme ve tvaru:

$$y^C(x+h) = y(x) + h\big[af(x-h) + bf(x) + cf(x+h, y^P(x+h))\big]$$

Metoda testovací rovnice $y = y'$ ($y(x) = e^x$) $\Rightarrow$

$$y^C(x+h) = y(x) + \tfrac{h}{12}\big[-f(x-h) + 8f(x) + 5f(x+h, y^P(x+h)\big] + \mathcal{O}(h^4)$$

tj. je to metoda 3. řádu (lokální chyba $\mathcal{O}(h^4)$)

3. řád – stabilita

Metoda je lokálně $\mathcal{O}(h^4)$, takže můžeme napsat (zanedbávajíce $\mathcal{O}(h^5)$):

$$y(x - ih) = y^{\text{přesně}}(x - ih) + \epsilon_i h^4$$

Zkusme testovací rovnici $y' = y$ s $y(0) = 1$ (řešení je $y = e^x$). Pomocí Maple:

$$\epsilon_{i+1} = \epsilon_i - 13/144$$

- chyba v $y(x - h)$, $y(x - 2h)\ldots$ se nešíří dál (s přesností do h^4)
- v jednom kroku vznikne chyba $\propto h^4$

Milneova metoda

Korektor je Simpsonovo pravidlo.

$$\begin{aligned} y^P(x+h) &= y(x-3h) + \tfrac{4h}{3}\big[2f(x) - f(x-h) + 2f(x-2h)\big] \\ y^C(x+h) &= y(x-h) + \tfrac{h}{3}\big[f(x-h) + 4f(x) + f(x+h, y^P(x+h))\big] \end{aligned}$$

Lokální chyba je $\mathcal{O}(h^5)$. Nechť $y(ih)$ má chybu $\epsilon_i h^5$. Pak tato chyba se šíří takto (viz Maple za použití testovací rovnice $y' = y$):

$$\epsilon_{i+1} := \frac{1}{90} + \epsilon_{i-1}$$

Diskuse:

- $\epsilon_{i+1} := \frac{1}{90} + \epsilon_i$ by bylo OK (taková chyba se v principu nedá odstranit)
  příklad nestabilní metody: $\epsilon_{i+1} := \frac{4}{3}\epsilon_i + 1/90$
  příklad stabilní metody: $\epsilon_{i+1} := \frac{3}{4}\epsilon_i + 1/90$
- Milneova metoda je poněkud specifická – na hranici stability.
- růst chyby „ob dva“ znamená, že $\epsilon_{\text{sudé}}$ a $\epsilon_{\text{liché}}$ jsou jiné – řešení se může rozkmitat (podle vyšších řádů).

Stabilita

Typicky je rovnice šíření chyb (v řádu lokální chyby) tvaru

$$\epsilon_{i+1} := a_c + a_0\epsilon_i + a_1\epsilon_{i-1} \cdots a_n\epsilon_{i-n}$$

To je **lineární diferenční rovnice**. Ta má obecné řešení tvaru

$$\epsilon_i = \sum_x b_x x^i + b_c$$

kde se sčítá se přes všechny kořeny tzv. **charakteristického polynomu**

$$x^{n+1} = c_0 x^n + \cdots + c_n x^0$$

(V případě násobných kořenů jsou tam členy x^i, ix^i, atd. – je to podobné, jako pro lineární homogenní diferenciální rovnici.)

Chyby nesmí exponenciálně růst $\Rightarrow$ pro kořeny musí platit $|x| < 1$.

Příklad diferenční rovnice

Fibonacciova posloupnost: $F_0 = 0$, $F_1 = 1$, $F_n = F_{n-1} + F_{n-2}$ pro $n > 1$

$$F_n = \frac{1}{\sqrt{5}}\left[\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^n - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^n\right]$$