# Matematika pro chemické inženýry

Drahoslava Janovská

## 7. Numerické řešení ODR - počáteční úloha:

### Eulerova metoda, Rungova-Kuttova metoda 2. a 4. řádu.

EVROPSKÁ UNIE
Evropské strukturální a investiční fondy
Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání

MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY

Povinná látka. Bude v písemkách a bude se zkoušet při ústní zkoušce (žádné označení)

★ Příklady k procvičení - dobrovolné

★ Pro studenty, kteří chtějí vědět víc. Tato látka se nebude přednášet, nebude v písemkách, nebude se zkoušet.

# Obsah

Numerické řešení diferenciálních rovnic – nezbytnost pro inženýrské aplikace

Budeme uvažovat jednu dif. rovnici i řešení soustav dif. rovnic. Dif. rovnice vyších řádů lze převést na systém rovnic 1. řádu. Budeme se zabývat zejména rovnicemi 1. řádu, a to úlohou počáteční i okrajovou.

# Jednokrokové metody pro řešení počáteční úlohy

Řešíme počáteční (Cauchyovu) úlohu

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

Jednoznačnost a existence řešení:
Je-li $f(x,y)$ spojitá v $\Omega = \{(x,y),\ |x - x_0| \le a,\ a > 0,\ |y - y_0| \le b,\ b > 0\}$ a označíme-li

$$M = \max_{(x,y)\in\Omega} |f(x,y)| \,, \quad \alpha = \min(a, \frac{b}{M}) \,,$$

pak existuje řešení rovnice $y' = f(x,y)$ definované v intervalu $(x_0 - \alpha, x_0 + \alpha)$ .

Je-li navíc $f$ Lipschitzovská, t.j.

$$|f(x,y_1) - f(x,y_2)| \le L\,|y_1 - y_2| \quad L > 0, \quad \forall (x,y_1),(x,y_2) \in \Omega \,,$$

je řešení určeno jednoznačně .

**Poznámka**: $L$ ... Lipschitzovská konstanta.

# Taylorův rozvoj řešení

Řešíme úlohu, tj. hledáme řešení $y = y(t)$ tak, aby

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = y' = f(t, y), \quad y(0) = y_0\,, \quad 0 < t < T\,.$$

Nechť už jsme spočítali řešení $y_n := y(t_n)$ v čase $t_n$ a chceme najít řešení v čase $t_{n+1}$. Nechť $h := t_{n+1} - t_n$ je příslušný časový krok.

Taylorův rozvoj řešení: $y_{n+1}$ v bodě $y_n$:

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot \underbrace{y_n'}_{= f(t_n, y_n) \text{ z dif. rovnice}} + \frac{h^2}{2} y_n'' + \frac{h^3}{6} y_n''' + \ldots$$

Co $y_n''$?

$$y'' = \left(\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}\right)' = \frac{\partial f}{\partial t} \cdot 1 + \frac{\partial f}{\partial y} \cdot y' = f_t + f_y \cdot f$$

$$y''' = \frac{\partial}{\partial t}(f_t + f\,f_y) + \frac{\partial}{\partial y}(f_t + f\,f_y)\,f = f_{tt} + 2f\,f_{yt} + f_t\,f_y + f\,f_y^2 + f^2\,f_{yy}\,,$$

... atd.

# Diskretizační chyba, řád metody

Jak se přibližné řešení získané danou metodou liší od přesného řešení? Tedy jaká je globální diskretizační chyba

$$e_i = y(x_i) - y_i \; ?$$

Při numerickém řešení diferenciální rovnice se v každém kroku dopouštíme lokální diskretizační chyby. Globální diskretizační chyba je výsledkem nakupení lokálních chyb. O metodách, u kterých se daří udržet chybu malou vzhledem k přesnému řešení, mluvíme jako o stabilních metodách.

Pro popis rychlosti konvergence používáme pojem řád metody. Řád metody je přirozené číslo $p$, takové, že pro malá $h$ je lokální diskretizační chyba řádově velikosti $h^{p+1}$.

Například

$$y_{n+1} = y_n + hy_n' + \underbrace{\mathcal{O}(h^2)}_{\text{lokální diskretizační chyba}} \quad \text{znamená, že} \quad \lim_{h \to 0_+} \frac{y_{n+1}}{h^2} = k \neq 0,$$

metoda je řádu $p = 1$. Následující Eulerova metoda je metoda prvního řádu.

# Eulerova metoda

Na prvních dvou členech Taylorova rozvoje je založena Eulerova metoda:

Zvolím $y(0) := y_0$ a konstruuji posloupnost

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n)\,,$$

t.j. v bodě $(t_n, y_n)$ nahradím funkci $y$ tečnou k integrální křivce v bodě $(t_n, y_n)$.

Přesnost výpočtu: Eulerova metoda je metoda 1. řádu.

**Poznámka** Krok metody $h$ lze měnit s jednotlivými iteracemi (adaptivní volba kroku):

$$y_{n+1} = y_n + h_n f(t_n, y_n)\,.$$

# ★ Příklad

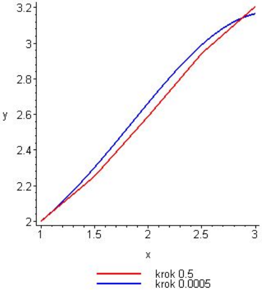
**Příklad** Najděte Eulerovou metodou řešení následující počáteční úlohy v bodě (čase) $t = 3$,

$$y' = 0,3\,y\,\sin(t)\,, \qquad y(1) = 2\,.$$

Pro jednoduchost uvažujme $n = 4$, je tedy $h = 0.5$.

$$y_{j+1} = y_j + h\,f(t_j, y_j), \quad \text{kde} \quad f(t_j, y_j) = 0,3 y_j sin(t_j)\,.$$

| $t_j$ | krok 0.5 | krok 0.005 |
|---|---|---|
| 1 | 2 | 2 |
| 1.5 | 2.252441295 | 2.30249902026881692 |
| 2 | 2.589461130 | 2.66460601831410714 |
| 2.5 | 2.942649681 | 2.99089235783755570 |
| 3 | 3.206813761 | 3.16533517440834976 |



# ★ Příklad

Eulerovou metodou řešte diferenciální rovnici

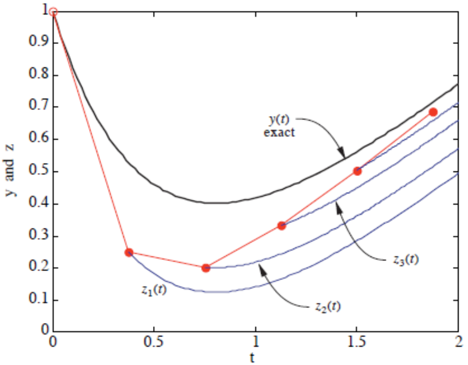
$$y' = t - 2y\,, \quad y(0) = 1\,.$$

Přesné řešení: $y(t) = \frac{1}{4}\left[2t - 1 + 5\mathrm{e}^{-2t}\right]$. Integrační krok $h = 0.2$, tři iterace.

| $j$ | $t_j$ | $f(t_{j-1}, y_{j-1})$ | Eulerova metoda $y_j = y_{j-1} + hf(t_{j-1}, y_{j-1})$ | přesné ř. $y(t_j)$ | chyba $y_j - y(t_j)$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 0.0 | | poč.podm. $= 1.0000$ | 0 | 0 |
| 1 | 0.2 | $0 - 2 \cdot 1 = -2.000$ | $1.0 + (0.2)(-2.0) = 0.6000$ | 0.6879 | $-0.0879$ |
| 2 | 0.4 | $0.2 - (2)(0.6) = -1.000$ | $0.6 + (0.2)(-1.0) = 0.4000$ | 0.5117 | $-0.1117$ |
| 3 | 0.6 | $0.4 - (2)(0.4) = -0.400$ | $0.4 + (0.2)(-0.4) = 0.3200$ | 0.4265 | $-0.1065$ |

★

Na obrázku je srovnání přesného řešení a numerického řešení (●) Eulerovou metodou. Integrální křivky $z(t)$ startují vždy z bodů numerického řešení jako z nové počáteční podmínky pro danou rovnici.



# ★ Stabilita Eulerovy metody

Řešme modelovou úlohu

$$y' = \lambda y\,, \quad \lambda \text{ konstanta} \tag{1}$$

Eulerova metoda $\Longrightarrow$

$$y_{n+1} = y_n + \lambda h\, y_n\,, \quad \text{t.j.} \quad y_{n+1} = y_n(1 + \lambda\, h)\,.$$

Tedy

$$y_n = y_{n-1}(1 + \lambda\, h) = y_{n-2}(1 + \lambda\, h)^2 = \;\ldots\; = y_0(1 + \lambda\, h)^n\,.$$

Pro $\lambda = \lambda_1 + \mathrm{i}\lambda_2\;\ldots$ komplexní, dostaneme

$$y_n = y_0(\underbrace{1 + \lambda_1 h + \mathrm{i}\lambda_2 h}_{\sigma\;\ldots\;\text{tzv. amplifikační faktor}})^n = y_0\,\sigma^n\,.$$

Numerické řešení je stabilní (t.j. zůstane omezené i pro rostoucí $n$ (velké)), jestliže $|\sigma| \leq 1$ .

Necht v rovnici (1) je

$$\lambda = \lambda_1 + \mathrm{i}\lambda_2, \quad \lambda_1 \leq 0\,, \quad \sigma = 1 + \lambda_1 h + \mathrm{i}\lambda_2 h\,.$$

Pak oblast stability pro Eulerovu metodu je část levé poloroviny komplexní roviny, a to vnitřek kruhu

$$|\sigma|^2 = (1 + \lambda_1 h)^2 + \lambda_2^2 h^2 = 1\,.$$

Pro libovolnou hodnotu $\lambda h$ v levé polorovině komplexní roviny vně tohoto kruhu je numerické řešení rostoucí nade všechny meze (blowing up), zatímco přesné řešení klesá. Chceme-li mít řešení stabilní, musíme zmenšit $h$ tak, aby $\lambda h$ leželo v tomto kruhu.

# ★ Implicitní (zpětná) Eulerova metoda

V rovnici se vyskytuje $y_{n+1}$ implicitně:

$$y_{n+1} = y_n + h\,f(t_{n+1}, y_{n+1})$$

Nevýhoda: metoda je výpočetně náročnější než explicitní Eulerova metoda

Výhoda: je stabilnější, někdy lze s výhodou využít linearizaci $f$

**Příklad** Aplikujme na modelovou úlohu (1) implicitní Eulerovu metodu:

$$y_{n+1} = y_n + \lambda h y_{n+1} \quad \Longrightarrow \quad y_{n+1} = \frac{1}{1-\lambda h} y_n . \quad \text{Tedy}$$

$$y_n = \frac{1}{1-\lambda h} y_{n-1} = \left(\frac{1}{1-\lambda h}\right)^2 y_{n-2} = \dots = \left(\frac{1}{1-\lambda h}\right)^n y_0 .$$

Dostaneme:

$$y_n = \sigma^n y_0 , \qquad \sigma = \frac{1}{1-\lambda h} .$$

# ★ $\theta$–metody

Lze definovat následující jednoparametrickou třídu jednokrokových metod, tzv. $\theta-$metody:

Pro danou počáteční aproximaci $y_0$ definujeme $y_{n+1}$ jako konvexní kombinaci $f(t_n, y_n)$ a $f(t_{n+1}, y_{n+1})$ ($\theta$ . . . parametr):

$$y_{n+1} = y_n + h[(1-\theta)f(t_n, y_n) + \theta f(t_{n+1}, y_{n+1})]\,, \quad n = 0, 1, \dots, N-1\,, \quad \theta \in \langle 0, 1\rangle\,.$$

- $\theta = 0 \quad \Longrightarrow \quad y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n)$ . . . (explicitní) Eulerova metoda
- $\theta = 1 \quad \Longrightarrow \quad y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1})$ . . . implicitní Eulerova metoda
- $\theta = \frac{1}{2} \quad \Longrightarrow \quad y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}h[f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1})]$ . . . lichoběžníkové pravidlo.

Lze ukázat, že $\theta-$metoda je explicitní pro $\theta = 0$ a je implicitní pro $0 < \theta \leq 1$.

# Rungeovy–Kuttovy metody

Rungeovy–Kuttovy metody (RK) – přesnější než Eulerovy metody:

- explicitní: řešení v čase $t_{n+1}$ vypočteme z hodnot $y_n$, $f(t_n, y_n)$ a z $f(t, y)$ vyčíslené v bodě ležícím mezi body $t_n$ a $t_{n+1}$
  $\Longrightarrow$ lepší přesnost, protože využijeme více informací o funkci $f$.
- implicitní: obvykle vedou na řešení nelineárních algebraických rovnic, ale pracnost je vyvážena lepší numerickou stabilitou.

# RK metody 2. řádu

Řešme rovnici $y' = f(t, y)$.
V časovém kroku $t_{n+1}$ dostaneme řešení z rovnice

$$y_{n+1} = y_n + \gamma_1 k_1 + \gamma_2 k_2 \,, \tag{2}$$

kde

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(t_n, y_n) \\ k_2 &= hf(t_n + \alpha h, y_n + \beta k_1)\,, \quad \alpha, \beta, \gamma_1, \gamma_2 \in \mathbb{R}\,. \end{aligned}$$

Konstanty $\alpha, \beta, \gamma_1, \gamma_2$ musíme určit tak, aby metoda měla co nejvyšší řád přesnosti (byla co nejvyššího řádu). Abychom zjistili řád přesnosti, využijeme Taylorův rozvoj $y(t_{n+1})$:

$$y_{n+1} = y_n + h \underbrace{y_n'}_{f(t_n, y_n)} + \frac{h^2}{2} \underbrace{y_n''}_{f_t + f\, f_y} + \cdots \quad \Longrightarrow$$

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n) + \frac{h^2}{2}(f_{t_n} + f_n f_{y_n}) + \cdots \tag{3}$$

a porovnáme koeficienty v (2) a (3).

Taylorova řada pro funkci dvou proměnných $k_2 = hf(t_n + \alpha h, y_n + \beta k_1) \quad \Longrightarrow$

$$k_2 = h\Big(f(t_n, y_n) + \alpha h f_{t_n} + \beta k_1 f_{y_n} + \mathcal{O}(h^2)\Big)\ .$$

**Poznámka** Symbol $\mathcal{O}$ (velké O)

$$g(h) = \mathcal{O}(h^p) \quad \Longleftrightarrow \quad |g(h)| \le C \cdot h^p\,, \quad C \text{ konstanta nezávislá na } h\,.$$

Dostaneme $\quad y_{n+1} = y_n + (\gamma_1 + \gamma_2)hf_n + \gamma_2\beta h^2 f_n f_{y_n} + \gamma_2 \alpha h^2 f_{t_n} + \cdots$
Porovnáme s (3) a dostaneme tři nelineární rovnice pro 4 neznámé:

$$\gamma_1 + \gamma_2 = 1\,, \quad \gamma_2\alpha = \frac{1}{2}\,, \quad \gamma_2\beta = \frac{1}{2}\,.$$

Necht $\alpha \in \mathbb{R}$ je parametr. Pak $\quad \gamma_2 = \dfrac{1}{2\alpha}\,, \quad \beta = \alpha\,, \quad \gamma_1 = (1 - \dfrac{1}{2\alpha})\,.$

Dostaneme Rungeovy-Kuttovy metody 2. řádu:

$$
\begin{aligned}
k_1 &= hf(t_n, y_n) \\
k_2 &= hf(t_n + \alpha h, y_n + \alpha k_1) \\
y_{n+1} &= y_n + (1 - \frac{1}{2\alpha})k_1 + \frac{1}{2\alpha} k_2 \,.
\end{aligned}
$$

Zvolím $\alpha$ a dostanu metodu. Např.

$$
\alpha = \frac{1}{2} \quad \Longrightarrow \quad \gamma_2 = 1\,, \quad \beta = \frac{1}{2}\,, \quad \gamma_1 = 0 \quad \Longrightarrow
$$

$$
y_{n+1} = y_n + k_2 = y_n + hf(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1)\,.
$$

**Poznánka** RK metoda 2. řádu vyžaduje v každém kroku dvakrát vyčíslení funkčních hodnot.

# RK metody 4. řádu

Pro řešení počáteční úlohy se nejvíce používá RK metoda 4. řádu:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{3}(k_2 + k_3) + \frac{1}{6}k_4\,,$$

kde

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(t_n, y_n) \\ k_2 &= hf(t_n + \tfrac{h}{2}, y_n + \tfrac{1}{2}k_1) \\ k_3 &= hf(t_n + \tfrac{h}{2}, y_n + \tfrac{1}{2}k_2) \\ k_4 &= hf(t_n + h, y_n + k_3)\,. \end{aligned}$$

V každém kroku potřebujeme 4krát vyčíslit funkční hodnoty.

Ačkoliv pracná, je RK metoda 4. řádu stabilní a velmi přesná. Je také snadno programovatelná, protože nevyžaduje žádné derivování, ale jen výpočet funkčních hodnot.

# ★ Příklad

Runge-Kuttovou metodou 4. řádu řešte počáteční úlohu

$$y' = t^2 - y\,, \quad y(0) = 1,$$

s krokem $h = 0.1$ na intervalu $\langle 0; 0.5 \rangle$.
**Řešení** Známe $t_0 = 0$, $y_0 = 1$, $f(t, y) = t^2 - y$, budeme počítat $y_1$, t.j. přibližnou hodnotu řešení v bodě $t_1 = 0.1$.

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(0; 1) = 0^2 - 1 \\
k_2 &= f(0 + \frac{1}{2}0.1; 1 + \frac{1}{2}0.1(-1)) = f(0.05; 0.95) = -0.9475 \\
k_3 &= f(0 + \frac{1}{2}0.1; 1 + \frac{1}{2}0.1(-0.9475)) = f(0.05; 0.952625) = -0.950125 \\
k_4 &= f(0 + 0.1; 1 + 0.1(-0.950125)) = f(0.1; 0.9049875) = -0.8949875 \\
y_1 &= y_0 + \frac{1}{6}0.1(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \doteq 0.9051627.
\end{aligned}$$

Pro srovnání: přesné řešení je $y = -\mathrm{e}^{-t} + t^2 - 2t + 2$ a jeho hodnota $y(0.1) = 0.9051626$.
Vypočtěte přibližnou a přesnou hodnotu řešení v bodech 0.2; 0.3; 0.4 a 0.5.

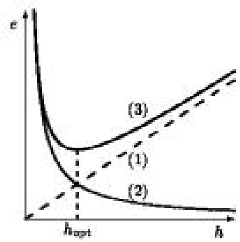
# Chyba výpočtu

## Chyba výpočtu

**a)** $y(t_n)$ ... přesné řešení v čase $t_n$, $y_n$ ... přibližné řešení v čase $t_n$
$e_n = y_n - y(t_n)$ ... globální chyba aproximace nebo globální diskretizační chyba

**b)** Počítáme v konečné aritmetice:
$r_n = \widetilde{y}_n - y_n$ ... zaokrouhlovací chyba
Chceme počítat $y_n$, ale ve skutečnosti počítáme tzv. numerickou aproximaci $\widetilde{y}_n$ .

Pro Eulerovu metodu:
(1) ... globální chyba aproximace $e_n$,
$e_n$ je přímo úměrná první mocnině $h$
(2) ... zaokrouhlovací chyba $r_n$
$r_n$ je nepřímo úměrná první mocnině $h$
(3) ... celková chyba pro Eulerovu metodu




O zaokrouhlovacích chybách se můžeme přesvědčit jen opakovaným výpočtem s různou přesností (double precission, ...)

# Richardsonova extrapolace

Řešme počáteční úlohu numerickou metodou řádu $p$. Označíme $y(x)$ přesné řešení naší úlohy. Volme dvě různé velikosti kroku $h$: $h = h_1$ a $h = h_2$ a označme $y_1 = y(x, h_1)$ přibližnou hodnotu řešení v bodě $x$ s krokem $h_1$, $y_2 = y(x, h_2)$ přibližnou hodnotu řešení v bodě $x$ s krokem $h_2$. Pak

$$
\begin{aligned}
y(x) &\doteq y_1(x) + C \cdot h_1^p && (4) \\
y(x) &\doteq y_2(x) + C \cdot h_2^p, && (5)
\end{aligned}
$$

kde $C$ je konstanta v obou případech stejná, nezávislá na $h$.
Od rovnice (4) odečteme rovnici (5) a dostaneme

$$
0 = y_2 - y_1 + C \cdot h_2^p - C \cdot h_1^p \quad \Rightarrow \quad C = \frac{y_2 - y_1}{h_1^p - h_2^p}\,.
$$

Konstantu $C$ dosadíme do rovnice (5):

$$
y(x) \doteq y_2(x) + \frac{y_2 - y_1}{h_1^p - h_2^p} \cdot h_2^p \quad \Rightarrow \quad y(x) \doteq y_{12} = \frac{y_2 \left(\frac{h_1}{h_2}\right)^p - y_1}{\left(\frac{h_1}{h_2}\right)^p - 1}\,.
$$

$y_{12}$ ... Richardsonova extrapolace řešení $y$ získaná z hodnot $y_1$ a $y_2$.

# Lineární vícekrokové metody

Jednokrokové metody ... k určení $y_{n+1}$ potřebujeme jen informaci z předchozí časové úrovně $y_n$

Vícekrokové metody ... k vyčíslení $y_{n+1}$ potřebujeme znát více časových úrovní (např. nestačí začít z počáteční podmínky)

Uvažujme tři po sobě jdoucí časové úrovně

$$t_{n-1}\,, \quad t_n = t_{n-1} + h\,, \quad t_{n+1} = t_{n-1} + 2h$$

a integrujme diferenciální rovnici od $t_{n-1}$ do $t_{n+1}$ pomocí Simpsonova pravidla:

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{h}{3}\left(f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \cdots + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\right)$$

Uvědomme si také, že

$$\int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} y'(t)\mathrm{d}t = y(t_{n+1}) - y(t_{n-1})\,.$$

Tedy

$$y(t_{n+1}) = y(t_{n-1}) + \int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} f(t, y(t))\mathrm{d}t \quad \approx$$

$$\approx y(t_{n-1}) + \frac{1}{3}h\left(f(t_{n-1}, y(t_{n-1})) + 4f(t_n, y(t_n)) + f(t_{n+1}, y(t_{n+1}))\right)$$

Nechť $y_n \doteq y(t_n)$.

Dostaneme metodu

$$y_{n+1} = y_{n-1} + \frac{1}{3}h\left(f(t_{n-1}, y_{n-1}) + 4f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_{n+1})\right) .$$

Necht je nyní dáno rovnoměrné dělení s krokem $h$:

$$t_n, t_{n+1} = t_n + h, t_{n+2} = t_n + 2h, \dots$$

Obecná lineární $k-$kroková metoda:

$$\alpha_k y_{n+k} + \alpha_{k-1} y_{n+k-1} + \dots + \alpha_0 y_n = h(\beta_k f_{n+k} + \beta_{k-1} f_{n+k-1} + \dots + \beta_0 f_n)\,,$$

kde konstanty $\alpha_j, \beta_j \in \mathbb{R}$, $\alpha_k \neq 0$ a $\alpha_0^2 + \beta_0^2 > 0$; $f_n \doteq f(t_n, y(t_n))$ .

Je-li $\beta_k = 0 \implies y_{n+k}$ lze vypočítat explicitně ze znalosti $y_n, \dots, y_{n+k-1}$ a z vyčíslení funkce v předchozích časových úrovních $\implies$ explicitní $k-$kroková metoda

Je-li $\beta_k \neq 0$, pak se $y_{n+k}$ vyskytuje na obou stranách rovnice, a tedy metoda je implicitní .

**Poznámka** lineární – ve formuli se vyskytují jen lineární kombinace $y_n$ a $f(t_n, y_n)$ .

## Příklady

- Čtyřkroková lineární explicitní Adams–Bashforthova metoda

$$y_{n+4} = y_{n+3} + \frac{1}{24}h\,(55f_{n+3} - 59f_{n+2} + 37f_{n+1} - 9f_n)$$

- Čtyřkroková lineární implicitní Adams–Moultonova metoda

$$y_{n+4} = y_{n+3} + \frac{1}{24}h\,(9f_{n+4} + 19f_{n+3} - 5f_{n+2} - 9f_{n+1})$$

**Poznámka** Než můžeme aplikovat $k-$krokovou metodu, musíme znát $k$ počátečních hodnot $y_0, \ldots, y_{k-1}$, kde $y_0$ je daná počáteční podmínka, $y_1, \ldots, y_{k-1}$ musí být nějak vypočteny, např. Eulerovou metodou nebo RK metodou. V každém případě budou data obsahovat numerické chyby a je důležité vědět, jak to ovlivní další aproximace $y_n$, $n \geq k$, které počítáme $k-$krokovou metodou. Tedy zajímá nás stabilita numerické metody vzhledem k malým perturbacím počátečních dat.

## ★ Stabilita $k-$krokových metod

Jak zjistit stabilitu ?
$\{t_n\}$ ... rovnoměrné dělení s krokem $h$.
Obecná lineární $k-$kroková metoda:

$$\alpha_0 y_n + \alpha_1 y_{n+1} + \cdots + \alpha_k y_{n+k} = h\left(\beta_0 f(t_n, y_n) + \beta_1 f(t_{n+1}, y_{n+1}) + \cdots + \beta_k f(t_{n+k}, y_{n+k})\right),$$

kde $\alpha_0, \ldots, \alpha_k$ a $\beta_0, \ldots, \beta_k$ jsou reálné konstanty, $\alpha_k \neq 0,\ \alpha_0^2 + \beta_0^2 > 0$.

Označme polynomy

$$\rho(z) = \sum_{j=0}^{k} \alpha_j z^j = \alpha_0 + \alpha_1 z + \cdots + \alpha_k z^k \quad \text{1. charakteristický polynom}$$

$$\sigma(z) = \sum_{j=0}^{k} \beta_j z^j = \beta_0 + \beta_1 z + \cdots + \beta_k z^k \quad \text{2. charakteristický polynom}$$

★

**Věta** Podmínka stability metody

Lineární vícekroková metoda je numericky stabilní pro libovolnou diferenciální rovnici $y' = f(t, y)$, kde $f$ je Lipschitzovská,

právě když

kořeny 1. charakteristického polynomu $\rho(z)$ leží uvnitř jednotkového uzavřeného kruhu, přičemž kořeny ležící na jednotkové kružnici jsou jednonásobné.

**Poznámka** $f$ je Lipschitzovská na oblasti $J \times D \iff$

$$\exists\, L > 0 \ : \quad |f(t, y) - f(t, z)| \leq L|y - z| \quad \forall (t, y), (t, z) \in J \times D\,.$$

**Poznámka** Nezkoumali jsme chybu aproximace, t.j. přesnost $k-$krokových metod.

## Příklady

1. Adams–Bashforthova metoda

$$y_{n+4} = y_{n+3} + \frac{1}{24} h\,(55f_{n+3} - 59f_{n+2} + 37f_{n+1} - 9f_n)$$

$$y_{n+4} - y_{n+3} = \frac{1}{24} h\,(55f_{n+3} - 59f_{n+2} + 37f_{n+1} - 9f_n)$$

Tedy pro 1. charakteristicky polynom $\rho(z)$ máme

$$\rho(z) = z^4 - z^3 = z^3(z-1) = 0 \quad \Longrightarrow$$

$z = 0$ je trojnásobný kořen uvnitř jednotkového kruhu
$z = 1$ leží na jednotkové kružnici, je jednonásobný
$\Longrightarrow$ metoda je numericky stabilní .

2. Tříkroková metoda řádu 6

$$11y_{n+3} + 27y_{n+2} - 27y_{n+1} - 11y_n = 3h\,(f_{n+3} + 9f_{n+2} + 9f_{n+1} + f_n)$$

$$\rho(z) = 11z^3 + 27z^2 - 27z - 11 = 0 \quad \text{(reciproká rovnice)}$$

Kořeny: $z_1 = 1,\ z_2 \doteq -0,3189,\ z_3 \doteq -3,1356 \quad \Longrightarrow \quad |z_3| > 1$ ,
$\Longrightarrow$ metoda není numericky stabilní .

**3.** Určete všechny hodnoty $b \in \mathbb{R}$, pro které je lineární $k-$kroková metoda

$$y_{n+3} + (2b-3)(y_{n+2} - y_{n+1}) - y_n = hb(f_{n+2} + f_{n+1})$$

numericky stabilní.

$$\rho(z) = z^3 + (2b-3)(z^2 - z) - 1 = 0$$

Protože $\rho(1) = 0$ je jeden kořen $z = 1$, a to jednonásobný,

$$z^3 + (2b-3)(z^2 - z) - 1 = (z-1) \cdot \underbrace{(z^2 + z + 1 + z(2b-3))}_{:= \rho_1(z) = z^2 + z(2b-2) + 1} = 0$$

Zbývá najít kořeny $\rho_1(z)$. Vyzkoušíme $\rho_1(1) = 2b \implies b \neq 0$, jinak by $z = 1$ nebyl jednonásobný a metoda by nebyla stabilní. Ze stejného důvodu, protože $\rho(-1) = -2b + 4$, musí být $b \neq 2$.

Jaké jsou tedy kořeny $\rho_1$? Označme je $z_1, z_2$. Pak

$$(z-z_1)(z-z_2) = z^2 + z(2b-2) + 1 \implies -(z_1+z_2)z + z_1 z_2 = z(2b-2) + 1 \,.$$

Tedy $z_1 z_2 = 1$ . Ale $z_1 \neq \pm 1$ , $z_2 \neq \pm 1$, tedy $z_1, z_2$ jsou komplexní.

$$D = 4(b-1)^2 - 4 < 0 \quad \Longleftrightarrow \quad b \in (0,2) \,.$$

Závěr

Je-li $b \in (0,2)$, jsou kořeny $\rho(z)$:

$$z_1 = 1,\; z_{2,3} = 1 - b \pm \mathbf{i}\sqrt{1-(b-1)^2}\,,\; z_2 \neq z_3,\; |z_{2,3}| < 1 \,,$$

a tedy všechny kořeny $\rho(z)$ leží pro $b \in (0,2)$ v uzavřeném jednotkovém kruhu $\implies$

metoda je numericky stabilní $\Longleftrightarrow$ $b \in (0,2)$ .

★

**Věta** Nutná podmínka (nikoliv postačující) pro konvergenci vícekrokové metody je, že metoda je numericky stabilní.

Lineární $k-$kroková metoda, jejíž charakteristický polynom je $\rho(z) = z^k - z^{k-1}$ ... tzv. Adamsovy metody
– explicitní ... Adamsovy–Bashforthovy metody
– implicitní ... Adamsovy–Moultonovy metody

Lineární $k-$kroková metoda, jejíž charakteristický polynom je $\rho(z) = z^k - z^{k-2}$ :
– explicitní ... Nyströmova metoda
– implicitní ... Milneova–Simpsonova metoda .

**Poznámka** Lze rovněž zkoumat tzv. absolutní stabilitu (A–stabilitu) lineárních vícekrokových metod. A–stabilitou se nebudeme zabývat.

# "Stiff"systémy

"Stiff"rovnice je diferenciální rovnice, pro kterou numerická metoda je numericky nestabilní, pokud není krok metody extrémně malý .
V rovnici se vyskytují členy, které způsobují rychlou změnu řešení. Jsou to například rovnice typu

$$y' = ky + f(t), \quad \text{kde} \quad k \in \mathbb{C},\ |k| \text{ velká}$$

nebo soustavy

$$\mathbf{y}' = \mathbf{K}\mathbf{y} + \mathbf{f}(t)\,,$$

kde $\mathbf{K}$ má jedno vlastní číslo $\lambda \in \mathbb{C}$ takové, že $|\lambda|$ je velká v porovnání s $\mathbf{f}(t)$ nebo $\Re\lambda_i < 0,\ 1 \leq i \leq n$, ale

$$\max_{1\leq i\leq n} |\Re\lambda_i| >> \min_{1\leq i\leq n} |\Re\lambda_i|\,.$$

Míra stiff

$$R = \frac{\max|\Re\lambda_i|}{\min|\Re\lambda_i|}\,, \quad \lambda_i \text{ je vlastní číslo Jacobivy matice daného systému.}$$

Zatím žádná, obecně akceptovaná definice "stiff"neexistuje.

# Metody typu prediktor–korektor

Označme
AB – Adamsova–Bashforthova metoda (explicitní $k-$kroková 2. řádu)
AM – Adamsova–Moultonova metoda (implicitní $k-$kroková 2. řádu)

Idea:
Prediktor – v našem případě explicitní metoda (AB) . Její výstup považujeme za mezivýsledek

$$\tilde{y}_{n+2} = y_{n+1} + \frac{h}{2}\left(3f(t_{n+1}, y_{n+1}) - f(t_n, y_n)\right) .$$

Nyní "opravíme"(correct) tuto hodnotu pomocí implicitní metody (AM), přičemž mezivýsledek $\tilde{y}_{n+2}$ použijeme na pravé straně. Dostaneme

$$y_{n+2} = y_{n+1} + \frac{h}{2}\left(f(t_{n+1}, y_{n+1}) + f(t_{n+2}, \tilde{y}_{n+2})\right) .$$

# Literatura k dalšímu studiu


- Fajmon B., Růžičková I.: Matematika 3. Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií, VUT Brno, 2011.
- Kubíček M., Dubcová M., Janovská D.: Numerické metody a algoritmy, VŠCHT Praha, 2005 (second edition).
- Rasmuson A., Andersson B., Olsson L., Andersson R.: Mathematical Modeling in Chemical Engineering. Cambridge University Press, 2014.
- Recktenwald G.: Numerical Integration of Ordinary Differential Equations for Initial Value Problems. Portland State University 2007, `gerry@me.pdx.edu`.
- Turzík D. et all: Matematika II, VŠCHT Praha, 2002.