

Numerické riešenie Cauchyho počiatočnej úlohy

Pavol ORŠANSKÝ

12. októbra 2023

Diferenciálne rovnice, nazývané aj **rovnice matematickej fyziky**, opisujú matematické modely fyzikálnych javov.

Vhodný nástroj na riešenie takýchto **numerické riešenie diferečnciálnych rovníc** formou približných riešení s vopred požadovanou presnosťou.

Metodiku vysvetlíme na riešení jednej diferenciálnej rovnice prvého rádu s danou počiatočnou podmienkou - **Cauchyho počiatočná úloha**.

Následne ukážeme možnosti zovšeobecnenia pre riešenie sústav diferenciálnych rovníc prvého rádu s počiatočnými podmienkami ako aj diferenciálnych rovníc vyššieho rádu s počiatočnými podmienkami príslušných rádov.

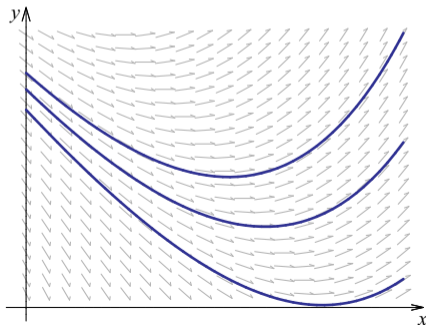
Cauchyho počiatočná úloha

Definícia (Cauchyho počiatočná úloha)

Obyčajnú diferenciálnu rovnicu prvého rádu s danou počiatočnou podmienkou

$$y' = F(x, y), \quad y(x_0) = y_0, \quad (1)$$

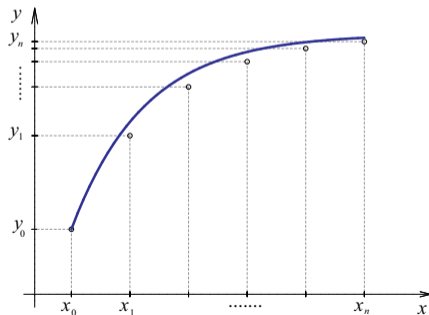
nazývame **Cauchyho počiatočná úloha**.



Numerické riešenie obyčajných diferenciálnych rovníc

Budeme hľadať iba približné hodnoty v konečnom počte tzv. **uzlových bodov** $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$. Množine uzlových bodov $\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ hovoríme **sieť** a rozdiel $h_i = x_{i+1} - x_i$ sa nazýva **krok** siete v uzli x_i .

Približné hodnoty riešenia v uzlových bodoch, vypočítané numerickou metódou, budeme značiť y_0, y_1, \dots, y_n , na rozdiel od hodnôt presného riešenia, ktoré značíme $y(x_0), y(x_1), \dots, y(x_n)$.



Eulerova metóda - Runge-Kutta I. rádu

Predpokladajme ekvidistantnú sieť $\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ s krokom h . Vo všetkých bodoch siete teda podľa (1) zrejme platí

$$y'(x_i) = F(x_i, y(x_i)).$$

Deriváciu na ľavej strane nahradíme numerickou deriváciou a dostávame

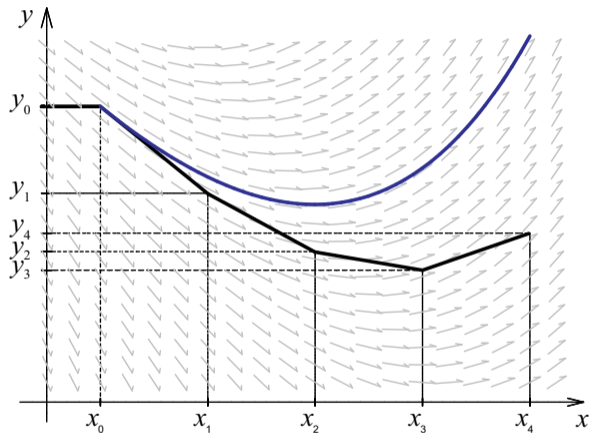
$$\frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} = F(x_i, y(x_i)).$$

Nahradíme $y(x_i)$ približnou hodnotou y_i , môžeme vyjadriť približnú hodnotu pre $y(x_{i+1})$ **Eulerovej metódy** ako

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot F(x_i, y_i). \quad (2)$$

Tým dostávame vzťah, ktorým výpočítame približnú hodnotu v nasledujúcom uzlovom bode pomocou hodnôt v predošlom uzlovom bode.

Eulerova metóda - Runge-Kutta I. rádu



Obr.: Grafická interpretácia numerického riešenia ODR Eulerovou metódou

Príklad (1.)

Pomocou Eulerovej metódy riešme Cauchyho počiatočnú úlohu

$$y' = x^2 - y, \quad y(0) = 1$$

na intervale $[0, 0.5]$ s krokom $h = 0.1$.

Zrejme $x_0 = 0$, $y_0 = 1$ a $F(x, y) = x^2 - y$ a teda

$$y_{i+1} = y_i + 0.1 \cdot (x_i^2 - y_i), \quad i = 0, 1, \dots, 5.$$

i	0	1	2	3	4	5
x_i	0.0000	0.1000	0.2000	0.3000	0.4000	0.5000
y_i	1.0000	0.9000	0.8110	0.7339	0.6695	0.6185
$y(x_i) \dots$ presné	1.0000	0.9050	0.8213	0.7492	0.6897	0.6435

Modifikované Eulerove metódy - Runge-Kutta II. rádu

Najskôr vypočítame pomocné hodnoty (**korekcie**) k_1 a k_2 , a pomocou nich potom približnú hodnotu riešenia v ďalších uzlových bodoch.

V prípade **prvej modifikovanej Eulerovej metódy** počítame podľa vzťahu

$$\begin{aligned}k_1 &= F(x_i, y_i), \\k_2 &= F\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}h \cdot k_1\right), \\y_{i+1} &= y_i + h \cdot k_2\end{aligned}\tag{3}$$

a u **druhej modifikovanej Eulerovej metódy** podľa

$$\begin{aligned}k_1 &= F(x_i, y_i), \\k_2 &= F(x_i + h, y_i + h \cdot k_1), \\y_{i+1} &= y_i + \frac{1}{2}h \cdot (k_1 + k_2).\end{aligned}\tag{4}$$

Metóda Runge-Kutta IV. rádu je najčastejšie uvádzanou a najpoužívanejšiu z priamych jednokrokových metód na riešenie ODR.

$$\begin{aligned}k_1 &= F(x_i, y_i), \\k_2 &= F\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}h \cdot k_1\right), \\k_3 &= F\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}h \cdot k_2\right), \\k_4 &= F(x_i + h, y_i + h \cdot k_3), \\y_{i+1} &= y_i + \frac{1}{6}h \cdot (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4).\end{aligned}\tag{5}$$

Príklad (2.a)

Pomocou metódy Runge-Kutta 4. rádu riešme Cauchyho počiatočnú úlohu

$$y' = x^2 - y, \quad y(0) = 1$$

na intervale $[0, 0.5]$ s krokom $h = 0.1$.

V každom kroku musíme vypočítať štyri koeficienty k_1 , k_2 , k_3 a k_4 a pomocou nich potom približné hodnoty v ďalších uzlových bodov dosadením do (5). Výsledky zapíšeme do tabuľky, v ktorej uvedieme aj hodnoty presného riešenia $y(x_n)$

Príklad (2.b)

i	x_i	y_i	$y(x_i)$	x	y	
0	0.0000	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	$k_1 = -1.0000$
				0.0500	0.9500	$k_2 = -0.9475$
				0.0500	0.9526	$k_3 = -0.9501$
				0.1000	0.9050	$k_4 = -0.8950$

Príklad (2.c)

i	x_i	y_i	$y(x_i)$	x	y	
1	0.1000	0.9052	0.9052	0.1000	0.9052	$k_1 = -0.8952$
				0.1500	0.8604	$k_2 = -0.8379$
				0.1500	0.8633	$k_3 = -0.8408$
				0.2000	0.8211	$k_4 = -0.7811$

Príklad (2.d)

i	x_i	y_i	$y(x_i)$	x	y	
2	0.2000	0.8213	0.8213	0.2000	0.8213	$k_1 = -0.7813$
				0.2500	0.7822	$k_2 = -0.7198$
				0.2500	0.7853	$k_3 = -0.7228$
				0.3000	0.7490	$k_4 = -0.6590$

Príklad (2.e)

i	x_i	y_i	$y(x_i)$	x	y	
3	0.3000	0.7492	0.7492	0.3000	0.7492	$k_1 = -0.6592$
				0.3500	0.7162	$k_2 = -0.5937$
				0.3500	0.7195	$k_3 = -0.5970$
				0.4000	0.6895	$k_4 = -0.5295$

Príklad (2.f)

i	x_i	y_i	$y(x_i)$	x	y	
4	0.4000	0.6897	0.6897	0.4000	0.6897	$k_1 = -0.5297$
				0.4500	0.6632	$k_2 = -0.4607$
				0.4500	0.6666	$k_3 = -0.4641$
				0.5000	0.6433	$k_4 = -0.3933$
5	0.5000	0.6435	0.6435			

Viackrové metódy riešenia obyčajných diferenciálnych rovníc

Viackrové metódy riešenia Cauchyho počiatkovej úlohy delíme v zásade na dva typy podľa princípu vyjadrenia vzťahu, a to na **explicitné** a **implicitné** formuly. Dodržiavame doteraz používané označenie. Je daná sieť

$$x_{i+1} = x_i + h, \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

Explicitná viackrová formula bude mať vo všeobecnosti tvar

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot \phi \left(f; \underbrace{y_i, y_{i-1}, \dots, y_{i-(k-1)}}_{k \text{ hodnôt} } \right)$$

a **implicitná viackrová formula** má tvar

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot \phi \left(f; \underbrace{y_{i+1}, y_i, y_{i-1}, \dots, y_{i-(k-1)}}_{k+1 \text{ hodnôt} } \right).$$

Viackrokové metódy riešenia obyčajných diferenciálnych rovníc

Hlavná idea viackrokových metód spočíva v použití Newton-Cotesových vzorcov na riešenie čiastkovej Cauchyho počiatkovej úlohy $y' = F(x, y)$ na intervale $[x_{m+1-k}, x_{m+1}]$, t.j. riešenie integrálnej rovnice tvaru

$$\int_{x_{m+1-k}}^{x_{m+1}} y' dx = \int_{x_{m+1-k}}^{x_{m+1}} F(x, y) dx,$$

odkiaľ dostávame

$$y(x_{m+1}) - y(x_{m+1-k}) = \int_{x_{m+1-k}}^{x_{m+1}} F(x, y) dx.$$

Na pravej strane rovnosti využijeme Newton-Cotesove formuly (interpoláčnym polynómom stupňa n) s $k + 1$ rovnomerne rozloženými uzlami.

Použitím **obdĺžnikového pravidla**, t.j. $k = 2, n = 0$,

$$\int_a^b u(x) dx \approx (b - a) \cdot u\left(\frac{a + b}{2}\right),$$

dostávame

$$y(x_{m+1}) - y(x_{m-1}) \approx 2h \cdot F(x_m, y(x_m)).$$

Čím dostávame **explicitnú dvojkrokovú metódu**

$$y_{m+1} = y_{m-1} + 2h \cdot F(x_m, y_m),$$

ktorej chyba $O(h^3)$ je rádu, t.j. závisí od druhej mocniny kroku h .

Použitím **lichobežníkového pravidla**, t.j. $k = 1, n = 1$,

$$\int_a^b u(x) dx \approx \frac{b-a}{2} \cdot (u(a) + u(b)),$$

dostávame

$$y(x_{m+1}) - y(x_m) \approx \frac{h}{2} \cdot (F(x_m, y(x_m)) + F(x_{m+1}, y(x_{m+1}))).$$

Odkiaľ dostávame **implicitnú jednokrokovú metódu**

$$y_{m+1} = y_m + \frac{h}{2} \cdot (F_m + F_{m+1}) + O(h^3),$$

kde označíme $F_m = F(x_m, y(x_m))$ (podobne i v nasledujúcom).

Použitím **uzavretého Simpsonovho pravidla**, t.j. $k = 2, n = 2$,

$$\int_a^b u(x) dx \approx \frac{b-a}{6} \cdot (u_0 + 4u_1 + u_2),$$

dostávame

$$y(x_{m+1}) - y(x_m) \approx \frac{2h}{6} \cdot (F_{m-1} + 4F_m + F_{m+1}).$$

Implicitná dvojkroková metóda má tvar

$$y_{m+1} = y_{m-3} + \frac{h}{3} \cdot (F_{m-1} + 4F_m + F_{m+1}) + O(h^5).$$

Adams-Bashforthove extrapoláčn é metódy sú explicitné metódy:

$$y_{m+1} = y_m + \frac{h}{2} \cdot (3F_m - F_{m-1}) + \frac{h^2}{2} F^{(2)}(\xi),$$

$$y_{m+1} = y_m + \frac{h}{12} \cdot (23F_m - 16F_{m-1} + 5F_{m-2}) + \frac{5h^3}{12} F^{(3)}(\xi),$$

$$y_{m+1} = y_m + \frac{h}{24} \cdot (55F_m - 59F_{m-1} + 37F_{m-2} - 9F_{m-3}) + \frac{3h^4}{8} F^{(4)}(\xi),$$

$$y_{m+1} = y_m + \frac{h}{720} \cdot (1901F_m - 2774F_{m-1} + 2616F_{m-2} - 1274F_{m-3} + 251F_{m-4}) \\ + \frac{95h^5}{2888} F^{(6)}(\xi).$$

Adams-Moultenové interpolačné metódy sú implicitné metódy:

$$y_{m+1} = y_m + h \cdot F_{m+1} - \frac{h^2}{2} F^{(2)}(\xi),$$

$$y_{m+1} = y_m + \frac{h}{2} \cdot (F_m + F_{m+1}) - \frac{h^3}{12} F^{(3)}(\xi),$$

$$y_{m+1} = y_m + \frac{h}{12} \cdot (5F_{m+1} + 8F_m - F_{m-1}) - \frac{h^4}{24} F^{(4)}(\xi),$$

$$y_{m+1} = y_m + \frac{h}{24} \cdot (9F_{m+1} + 19F_m - 5F_{m-1} + F_{m-2}) - \frac{19h^5}{720} F^{(6)}(\xi),$$

$$y_{m+1} = y_m + \frac{h}{720} \cdot (251F_{m+1} + 646F_m - 264F_{m-1} + 106F_{m-2} - 19F_{m-3}) - \frac{3h^5}{160} F^{(6)}(\xi).$$

Metódy prediktor-korektor

V predošlom sme si mohli všimnúť jednu zaujímavosť, pri explicitných metódach mala chyba kladné znamienko, zatiaľ čo pri implicitných metódach bola chyba metódy záporná. To nás privádza k myšlienke eliminácie chyby kombináciou explicitnej a implicitnej metódy.

Metóda prediktor-korektor je dvojkrokový algoritmus.

Predikčný krok - iniciácia - explicitnou metódou získame prvotný odhad hodnoty v nasledujúcom kroku.

Korekčný krok - následne implicitnou metódou skorigujeme chybu v tom istom kroku.

Všeobecný tvar viackrovej metódy je

$$y_{m+1} = a_0 y_m + a_1 y_{m-1} + \dots + a_{k-1} y_{m-(k-1)} \\ + h \cdot \boxed{b_{-1}} \cdot F_{m+1} + h (b_0 F_m + b_1 F_{m-1} + \dots + b_{k-1} F_{m-(k-1)}),$$

kde koeficient b_{-1} je dôležitý z pohľadu typológie metódy.

Ak je $b_{-1} = 0$, metóda je explicitná.

Ak je $b_{-1} \neq 0$, metóda je implicitná.

Všeobecný tvar viackrovej metódy môžeme zapísať i v tvare

$$y_{m+1} - a_0 y_m - a_1 y_{m-1} - \dots - a_{k-1} y_{m-(k-1)} \\ = h (b_{-1} \cdot F_{m+1} + b_0 F_m + b_1 F_{m-1} + \dots + b_{k-1} F_{m-(k-1)}). \quad (6)$$

Označme nasledujúce polynómy

$$P_k(t) = t^k - a_0 t^{k-1} - a_1 t^{k-2} - \dots - a_{k-2} t - a_{k-1},$$

ako **prvý charakteristický polynóm viackrokovej metódy (6)** a

$$Q_k(t) = b_{-1} t^k + b_0 t^{k-1} + b_1 t^{k-2} + \dots + b_{k-2} t + b_{k-1},$$

ako **druhý charakteristický polynóm viackrokovej metódy (6)**.

Definícia (Stabilita viackrovej metódy)

Viackrová metóda (6) je **stabilná** pre všetky funkcie $f(x, y)$ splňujúce Lipschitzovskú podmienku, ak pre korene jej prvého charakteristického polynómu $P_k(t)$ platí

$$|t_s| \leq 1,$$

potom t_s je jednoduchý koreň.

Definícia (Konzistentnosť viackrovej metódy)

Viackrová metóda (6) je **konzistentná**, ak platí $P_k(1) = 0$ a zároveň $P'_k(1) = Q_k(1)$.

Veta (Konvergencia viackrových metód)

Viackrová metóda (6) konverguje pre všetky funkcie $F(x, y)$ splňujúce Lipschitzovskú podmienku práve vtedy, ak je stabilná a konzistentná.

Príklad (3.)

Majme dvojkrokovú metódu

$$y_{m+1} = -4y_m + 5y_{m-1} + h(4F_m + 2F_{m-1}).$$

Jej prvý charakteristický polynóm je $P_2(t) = t^2 + 4t - 5$, ktorého korene sú $t_1 = 1$ a $t_2 = -5$. Vidíme, že metóda je nestabilná. Ďalej platí

$$P_2(1) = 0,$$

$$P_2'(t) = 2t + 4,$$

$$Q_2(t) = 4t + 2.$$

Čiže

$$P_2'(1) = 6 = Q_2(1)$$

a metóda je teda konzistentná.

Príklad (4.a)

Je daný Hammingov korektor

$$y_{m+1} = \frac{9}{8}y_m - \frac{1}{8}y_{m-2} + \frac{3h}{8}(F_{m+1} + 2F_m - F_{m-1}).$$

Metóda je trojkroková a jej prvý charakteristický polynóm má korene

$$P_3(t) = t^3 - \frac{9}{8}t^2 + \frac{1}{8},$$

$$\begin{aligned} t_1 &= 1 = 1, \\ t_{2,3} &= \left| \frac{1}{16} \pm \frac{1}{16} \sqrt{33} \right| < 1, \end{aligned}$$

a preto je metóda stabilná.

Príklad (4.b)

Ďalej platí

$$P_3(1) = 0$$

$$P'_3(t) = 3t + \frac{9}{4}, \quad P'_3(1) = \frac{3}{4},$$

$$Q_3(t) = \frac{3}{8}t^3 + \frac{3}{4}t^2 - \frac{3}{8}t, \quad Q_3(1) = \frac{3}{4}.$$

Odkiaľ

$$P'_3(1) = \frac{3}{4} = Q_3(1),$$

tým pádom je metóda aj konzistentná.

Sústavu obyčajných diferenciálnych rovníc prvého rádu s počiatočnými podmienkami

$$\begin{aligned}y_1' &= F_1(x, y_1, y_2, \dots, y_n), & y_1(x_0) &= \eta_1, \\y_2' &= F_2(x, y_1, y_2, \dots, y_n), & y_2(x_0) &= \eta_2, \\&\vdots & &\vdots \\y_n' &= F_n(x, y_1, y_2, \dots, y_n), & y_n(x_0) &= \eta_n\end{aligned}\tag{7}$$

môžeme vektorovo prepísať ako

$$\mathbf{y}' = \mathbf{F}(x, \mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(x_0) = \vec{\eta},$$

kde $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$, $\mathbf{F} = (F_1, F_2, \dots, F_n)^T$ a $\vec{\eta} = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n)^T$.

Na riešenie takejto sústavy môžeme použiť ktorúkoľvek z predošlých metód na riešenie jednej rovnice, iba sa budeme na problematiku pozerat' vektorovou optikou.

Napr. **Eulerova metóda pre systém** je v tvare

$$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{y}_i + h \cdot \mathbf{F}(x_i, \mathbf{y}_i), \quad (8)$$

Runge-Kutta metóda IV. rádu pre sústavu má nasledujúci tvar

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= \mathbf{F}(x_i, y_i), \\ \mathbf{k}_2 &= \mathbf{F}\left(x_i + \frac{1}{2}h, \mathbf{y}_i + \frac{1}{2}h \cdot \mathbf{k}_1\right), \\ \mathbf{k}_3 &= \mathbf{F}\left(x_i + \frac{1}{2}h, \mathbf{y}_i + \frac{1}{2}h \cdot \mathbf{k}_2\right), \\ \mathbf{k}_4 &= \mathbf{F}(x_i + h, \mathbf{y}_i + h \cdot \mathbf{k}_3), \\ \mathbf{y}_{i+1} &= \mathbf{y}_i + \frac{1}{6}h \cdot (\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4). \end{aligned} \quad (9)$$

V prípade dvoch rovníc, je jednoduchšie neznáme funkcie označiť y a z pravé strany F a G , aby sme sa vyhli komplikovanej indexácii a sústava má potom tvar

$$\begin{aligned}y' &= F(x, y, z), & y(x_0) &= y_0, \\z' &= G(x, y, z), & z(x_0) &= z_0,\end{aligned}$$

Eulerovu metódu môžeme potom zapísať v tvare

$$\begin{aligned}y_{i+1} &= y_i + h \cdot F(x_i, y_i, z_i), \\z_{i+1} &= z_i + h \cdot G(x_i, y_i, z_i).\end{aligned}$$

Metóda Runge-Kutta 4. rádu pre dve rovnice je

$$y_{i+1} = y_i + h/6 \cdot (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4),$$

$$z_{i+1} = z_i + h/6 \cdot (l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4),$$

kde

$$k_1 = F(x_i, y_i, z_i),$$

$$l_1 = G(x_i, y_i, z_i),$$

$$k_2 = F(x_i + h/2, y_i + h/2 \cdot k_1, z_i + h/2 \cdot l_1),$$

$$l_2 = G(x_i + h/2, y_i + h/2 \cdot k_1, z_i + h/2 \cdot l_1),$$

$$k_3 = F(x_i + h/2, y_i + h/2 \cdot k_2, z_i + h/2 \cdot l_2),$$

$$l_3 = G(x_i + h/2, y_i + h/2 \cdot k_2, z_i + h/2 \cdot l_2),$$

$$k_4 = F(x_i + h, y_i + h \cdot k_3, z_i + h \cdot l_3),$$

$$l_4 = G(x_i + h, y_i + h \cdot k_3, z_i + h \cdot l_3).$$

Obyčajnú diferenciálnu rovnicu n -tého rádu

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

s počiatočnými podmienkami

$$y(x_0) = y_0, y'(x_0) = y'_0, \dots, y^{(n-1)}(x_0) = y_0^{(n-1)}$$

môžeme previesť na sústavu diferenciálnych rovníc prvého rádu, a to nasledujúcim spôsobom:

Označíme

$$\begin{array}{ccc} y_1 = y, & & y'_1 = y_2, \\ y_2 = y', & \Rightarrow & y'_2 = y_3, \\ \vdots & & \vdots \\ y_n = y^{(n-1)}, & & y'_{n-1} = y_n. \end{array}$$

Podľa zadanej diferenciálnej rovnice má platiť

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

čo pri novom označení má tvar

$$y'_n = F(x, y_1, y_2, y_3, \dots, y_n).$$

Tým sme získali sústavu n diferenciálnych rovníc prvého rádu

$$\begin{aligned}y_1' &= y_2, & y_1(x_0) &= y_0, \\y_2' &= y_3, & y_2(x_0) &= y_0', \\&\vdots & &\vdots \\y_n' &= F(x, y_1, y_2, y_3, \dots, y_n) & y_n(x_0) &= y_0^{(n-1)},\end{aligned}\tag{10}$$

ktorú riešime ľubovoľnou z uvedených metód.

Riešenie pôvodnej rovnice n -tého rádu je potom prvá zložka riešenia sústavy (10).