0.1 Numerické riešenie diferenciálnych rovníc

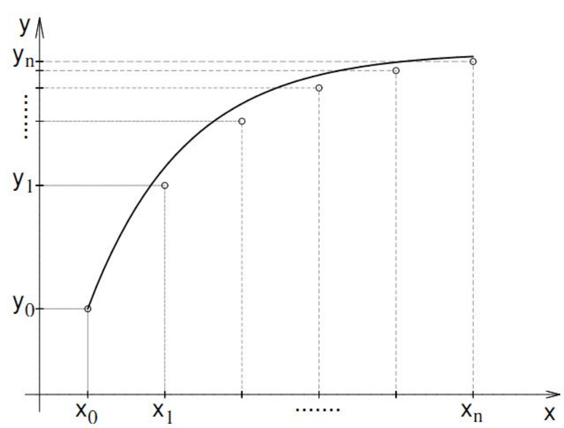
0.1.1 Úvod

Diferenciálne rovnice, nazývané aj rovnice matematickej fyziky, opisujú matematické modely fyzikálnych javov. S ich analytickou riešiteľnosťou sa študenti oboznámili v nižších ročníkoch v kurzoch matematickej analýzy, kde si osvojili metódy riešenia istých typov diferenciálnych rovníc. V živote a v praxi sa však vyskytujú rovnice zložitejšie, ktorých analytická riešiteľnosť je často náročná alebo dokonca nemožná. Vhodný nástroj na riešenie takýchto situácií ponúka numerická matematika formou približných riešení, ktorými sa teraz budeme zaoberať.

Metodiku vysvetlíme na riešení jednej diferenciálnej rovnice prvého rádu s danou počiatočnou podmienkou - Cauchyho počiatočná úloha. Následne úkážeme možnosti zovšeobecnenia pre riešenie sústav diferenciálnych rovníc prvého rádu. Ukážeme tiež, že diferenciálnu rovnicu vyšších rádov so zadanými počiatočnými podmienkami je možné ľahko previesť na sústavu diferenciálných rovníc prvého rádu.

Pri všekých z nasledujúcich metód budeme hľadať iba približné hodnoty v konečnom počte tzv. **uzlových bodov** $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = n$ namiesto funkcií spojitých na intervale $\langle a, b \rangle$, ako je tomu pri analytickom riešení. Množine uzlových bodov $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ 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 $y_0, y_1, \ldots, y_n$, na rozdiel od hodnôt presného riešenia, ktoré značíme $y(x_0), y(x_1), \ldots y(x_n)$ (viď obrázok).



V ďalšom sa podobne ako v príklade na obrázku budeme zaoberať iba prípadmi kedy bude krok h medzi jednotlivými uzlami konštantný, tj. **pravidelná (ekvidištančná) sieť**.

Ak by sme potrebovali lomenú čiaru približných riešení nahradiť funkciou spojitou aj s prvou deriváciou (hladkou krivkou), resp. vedieť hodnotu v inom ako uzlovom bode použijeme niektorý z interpolačných polynómov.

0.1.2 Cauchyho počiatočná úloha

Upriamme teraz pozornosť na obyčajnú diferenciálnu rovnicu prvého rádu s danou počiatočnou podmienkou

$$y' = f(x, y), \qquad y(x_0) = y_0, \tag{1}$$

takáto diferenciálna rovnica s takouto počiatočnou podmienkou sa nazýva Cauchyho počiatočná úloha.

Uveďme ešte podmienky riešiteľnosti úlohy (1).

Veta 1 *Nech je funkcia $f(x, y)$ spojitá na obdĺžniku*

$$D = \{(x, y) : |x - x_0| \leq a, |y - y_0| \leq b\},$$

kde $a > 0$, $b > 0$.

Potom existuje riešenie počiatočnej úlohy (1) na intervale $\langle x_0 - \alpha, x_0 + \alpha\rangle$, kde $\alpha = \min\left(a, \frac{b}{M}\right)$, $M = \max|f(x, y)|$.

Ak je naviac derivácia tejto funkcie $\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}$ ohraničená na obdĺžniku D, potom je toto riešenie jediné.

Táto veta určuje iba postačujúcu podmienku existencie jediného riešenia, a tiež vo veľkom počte prípadov zaručuje existenciu a jednoznačnosť iba v malom okolí bodu x_0. V technickej praxi sa preto existencia a jednoznačnosť riešenia často posudzuje i na základe informácií o riešenej úlohe, poprípade fyzikálnych vlastností hľadaného riešenia.

0.1.3 Eulerova metóda

Je najjednoduchšou metódou na hľadanie približného riešenia Cauchyho úlohy typu (1). Predpokladajme pravidelnú sieť, tj. ekvidištantné rozmiestnenie uzlových bodov $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ 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 $y(x_{i+1})$ ako

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

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

Príklad 1 *Pomocou Eulerovej metódy riešme Cauchyho počiatočnú úlohu*

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

na intervale $\langle 0; 0.5\rangle$ *s krokom* $h = 0.1$.

Riešenie: Zrejme $x_0 = 0$, $y_0 = 1$ a $F(x, y) = x^2 - y$. Približné hodnoty riešenia v nasledujúcich uzlových bodoch budeme počítať podla vzťahu (2), teda

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

Vypočítané hodnoty zapíšeme do tabuľky.

i :	0	1	2	3	4	5
x_i :	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
y_i :	1	0.9	0.811	0.7339	0.6695	0.6185

Pre porovnanie uvedieme aj hodnoty presného riešenia $y = -e^{-x} + x^2 - 2x + 2$ v uzlových bodoch:

$y(x_i)$:	1	0.905	0.8213	0.7492	0.6897	0.6435

Z uvedeného je zrejmé, že presnosť s narastajúcim počtom uzlových bodov klesá a takisto je zrejmé, že presnosť podstatne závisí aj od kroku h.

Veta 2 *Hovoríme, že metóda je konvergentná, pokiaľ pre ľubovoľnú Cauchyho počiatočnú úlohu (1) platí pre každé* $x \in \langle a, b\rangle$

$$\lim_{\substack{n \to \infty \\ h \to 0}} y_n = y(x), \qquad \textit{kde } x = x_0 + nh.$$

0.1.4 Modifikovaná Eulerova metóda

Ako je z názvu metódy zrejmé, jedná sa o isté vylepšenie Eulerovej metódy.

Najskôr vypočítame pomocné hodnoty k_1 a k_2 a pomocou nich potom približnú hodnotu riešenia v ďalších uzlových bodoch.

V prípade **prvej modifikovanej Eulerovej metódy** počítame podľa vzorcov:

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

a u **druhej modikovanej Eulerovej metódy**:

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

0.1.5 Metódy Runge-Kutta

Metódy typu Runge-Kutta patria k jedným z najdôležitejších skupín jednokrokých metód. Obe z modifikovaných Eulerových metód patria tiež k metódam typu Runge-Kutta. Uvedieme najčastejšie uvádzanú a najpoužívanejšiu z metód typu Runge-Kutta (zvedavajšieho čitateľa odkážeme na pramene, ktoré si dúfame sám dokáže nájsť), a to metódu Runge-Kutta 4. rádu. Je všeobecne tolerovanou mýlkou považovať za metódu Runge-Kutta práve túto z jej nespočetného množstva variant:

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

Príklad 2 *Pomocou metódy Runge-Kutta 4. rádu riešme Cauchyho počiatočnú úlohu*

$$y' = x^2 - y, \qquad y\left(0\right) = 1$$

na intervale $\langle 0; 0.5\rangle$ *s krokom* $h = 0.1$.

Riešenie: 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 $y(x_n)$, tak ako tomu bolo v predošlom príklade.

i	x_i	y_i	$y(x_i)$	x	y	
0	0	1	1	0 0.05 0.05 0.1	1 0.95 0.952625 0.9049875	$k_1 = -1$ $k_2 = -0.9475$ $k_3 = -0.950125$ $k_4 = -0.8949875$
1	0.1	0.9051672	0.9051626	0.1 0.15 0.15 0.2	0.9051627 0.8604046 0.8632675 0.8210860	$k_1 = -0.8951627$ $k_2 = -0.8379046$ $k_3 = -0.8407675$ $k_4 = -0.7810860$
2	0.2	0.8212695	0.8212693	0.2 0.25 0.25 0.3	0.8212695 0.7822060 0.7852842 0.7489911	$k_1 = -0.7812695$ $k_2 = -0.7197060$ $k_3 = -0.7227842$ $k_4 = -0.6589911$
3	0.3	0.7491822	0.7491818	0.3 0.35 0.35 0.4	0.7491822 0.7162230 0.7194960 0.6894826	$k_1 = -0.6591822$ $k_2 = -0.5937230$ $k_3 = -0.5969960$ $k_4 = -0.5294826$
4	0.4	0.6896804	0.6896800	0.4 0.45 0.45 0.5	0.6896804 0.6631964 0.6666456 0.6432659	$k_1 = -0.5296804$ $k_2 = -0.4606964$ $k_3 = -0.4641456$ $k_4 = -0.3932659$
5	0.5	0.6434699	0.6434693			

0.1.6 Riešenie sústav diferenciálnych rovníc

Riešenie sústav obyčajných diferenciálnych rovníc prvého rádu s počiatočnými podmienkami

$$\begin{aligned} y_1' &= F_1(x, y_1, y_2, \ldots, y_n), & y_1(x_0) &= \eta_1, \\ y_2' &= F_2(x, y_1, y_2, \ldots, y_n), & y_2(x_0) &= \eta_2, \\ &\vdots & &\vdots \\ y_n' &= F_n(x, y_1, y_2, \ldots, y_n), & y_n(x_0) &= \eta_n \end{aligned} \tag{6}$$

sa hľadá podobne ako riešenie jednej diferenciálnej rovnice s počiatočnou podmienkou.

Systém (6)môžeme vektorovo prepísať ako

$$\mathbf{y}' = \mathbf{F}(x, \mathbf{y}), \qquad \mathbf{y}(x_0) = \boldsymbol{\eta},$$

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

Na riešenie takejto sústavy môžeme použiť ktorúkoľvek z hereuvedených metód, len je potrbné pracovať s vektormi.

Eulerova metóda pre systém je v tvare

$$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{y}_i + h \cdot \mathbf{F}(x_i, \mathbf{y}_i), \tag{7}$$

Runge-Kutta metóda 4. rádu pre sústavu má nasledovný tvar

$$\begin{aligned}
\mathbf{k}_1 &= \mathbf{F}\left(x_i, y_i\right), \\
\mathbf{k}_2 &= \mathbf{F}\left(x_i + \frac{1}{2}h, \mathbf{y}_i + \frac{1}{2}h \cdot \mathbf{k}_1\right), \\
\mathbf{k}_3 &= \mathbf{F}\left(x_i + \frac{1}{2}h, \mathbf{y}_i + \frac{1}{2}h \cdot \mathbf{k}_2\right), \\
\mathbf{k}_4 &= \mathbf{F}\left(x_i + h, \mathbf{y}_i + h \cdot \mathbf{k}_3\right), \\
\mathbf{y}_{i+1} &= \mathbf{y}_i + \frac{1}{6}h \cdot \left(\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4\right).
\end{aligned} \tag{8}$$

V prípade, že riešime sústavu dvoch rovníc, je jednoduchšie neznáme funkcie označiť y a z pravej strane F a G, aby sme sa vyhli komplikovanej indexácii. Sústava má potom tvar

$$\begin{aligned}
y' &= F\left(x, y, z\right), \qquad y\left(x_0\right) = y_0, \\
z' &= G\left(x, y, z\right), \qquad z\left(x_0\right) = z_0,
\end{aligned} \tag{9}$$

Eulerovu matódu môžeme potom zapísať v tvare

$$\begin{aligned}
y_{i+1} &= y_i + h \cdot F\left(x_i, y_i, z_i\right), \\
z_{i+1} &= z_i + h \cdot G\left(x_i, y_i, z_i\right).
\end{aligned} \tag{10}$$

a metóda Runge-Kutta 4. rádu

$$\begin{aligned}
y_{i+1} &= y_i + \frac{1}{6}h \cdot \left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right), \\
z_{i+1} &= z_i + \frac{1}{6}h \cdot \left(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4\right),
\end{aligned} \tag{11}$$

kde

$$\begin{aligned}
k_1 &= F\left(x_i, y_i, z_i\right), \\
k_2 &= F\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}h \cdot k_1\right), \\
k_3 &= F\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}h \cdot k_2\right), \\
k_4 &= F\left(x_i + h, y_i + h \cdot k_3\right),
\end{aligned} \tag{12}$$

a

$$\begin{aligned}
l_1 &= G\left(x_i, y_i, z_i\right), \\
l_2 &= G\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}h \cdot k_1\right), \\
l_3 &= G\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}h \cdot k_2\right), \\
l_4 &= G\left(x_i + h, y_i + h \cdot k_3\right),
\end{aligned} \tag{13}$$

0.1.7 Riešenie diferenciálnych rovníc vyššieho rádu

Obyčajnú diferenciálnu rovnicu n-tého rádu s počiatočnými podmienkami

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

s podmienkami

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

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

Označíme $y_1 = y, y_1 = y', \ldots, y_n = y^{(n-1)}$. Potom zrejme platí, že $y_1' = y_2, y_2' = y_3$ etc.. Podľa zadanej diferenciálnej rovnice má platiť

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

čo pri novom označení má tvar

$$y_n' = F(x, y_1, y_2, y_3, \ldots, y_n).$$

Tým sme získali sústavu n diferenciálnych rovníc prvého rádu

$$\begin{array}{rcll} y_1' & = & y_2, & y_1(x_0) = y_0, \\ y_2' & = & y_3, & y_2(x_0) = y_0', \\ & & \vdots & \qquad \vdots \\ y_n' & = & F(x, y_1, y_2, y_3, \ldots, y_n) & y_n(x_0) = y_0^{(n-1)}, \end{array} \tag{14}$$

ktorú riešime ľubovoľnou z uvedených metód. Riešenie pôvodnej rovnice n-tého rádu je potom prvá zložka riešenia sústavy (14).