ZÁPISKY Z NUMERICKÉ MATEMATIKY 2

WIKI SKRIPTUM FJFI

Tato studentská wikiskripta jsou přepisem zápisků z přednášek Numerické matematiky prof. Dr. Ing. Beneše a pokrývají osnovy bakalářských předmětů NUM2 a NME2. Poslední kapitola byla přidaná ze skript pro DIFR, je tudíž dodatková, není přednášena ani zkoušena, obsahuje však důležitou látku z prekvizitních předmětů. Text wikiskript neprošel žádnou korekturou a s jistotou obsahuje chyby a překlepy, proto tímto prosím pozorné čtenáře o jejich opravování.

Date: 19. února 2020.

Obsah

1. Numerické řešení okrajových úloh pro ODE

1.1. Metoda střelby.

1.1.1. *Okrajová úloha pro rovnici 2. řádu.* Uvažujme následující okrajovou úlohu pro obyčejnou diferenciální rovnici 2. řádu:

$$y'' = f(x, y, y'), \quad x \in (a, b), \tag{1a}$$

$$y(a) = \gamma_1, \quad y(b) = \gamma_2, \tag{1b}$$

kde $f : \mathbf{R}^3 \to \mathbf{R}$, $\gamma_1, \gamma_2 \in \mathbf{R}$. Předpokládejme existenci takového $\alpha^* \in \mathbf{R}$, že pro $\alpha = \alpha^*$ je předchozí okrajová úloha ekvivalentní počáteční úloze

$$y'' = f(x, y, y'), \quad x \in (a, b), \tag{2a}$$

$$y(a) = \gamma_1, \tag{2b}$$

$$y'(a) = \alpha. \tag{2c}$$

Potom lze řešení okrajové úlohy (1) získat tak, že nalezneme α^* a vyřešíme počáteční úlohu (2). Počáteční úlohu 2. řádu efektivně řeší např. metoda Runge-Kutta-Nyström (viz 5. kapitola).

Nechť $y(x; \alpha)$ je řešení úlohy (2) pro dané $\alpha \in \mathbf{R}$. Potom α^* splňuje „algebraickou" rovnici[1]

$$y(b; \alpha) = \gamma_2.$$

Položme $F(\alpha) := y(b; \alpha) - \gamma_2$. Pak α^* je řešením rovnice $F(\alpha) = 0$. Při hledání α^* můžeme postupovat např. tak, že se pokusíme najít dvě čísla α_1, α_2 taková, aby platilo

$$F(\alpha_1)F(\alpha_2) < 0.$$

Pak položíme $\alpha_3 = \frac{1}{2}(\alpha_1 + \alpha_2)$ a stejný postup provádíme tak dlouho, dokud se dostatečně nepřiblížíme řešení rovnice $F(\alpha) = 0$. Tento způsob však není příliš efektivní.

V praxi se proto využívá Newtonova metoda, tj. konstruuje se iterační posloupností $\left\{\alpha^{(k)}\right\}$ podle rekurentního vztahu

$$\alpha^{(k+1)} = \alpha^{(k)} - \frac{F(\alpha^{(k)})}{F'(\alpha^{(k)})}. \tag{3}$$

Problematický je výraz ve jmenovateli. Při splnění předpokladů věty o diferencovatelnosti podle počátečních podmínek (tj. funkce f, $\frac{\partial f}{\partial y}$ a $\frac{\partial f}{\partial y'}$ jsou spojité na oblasti $\mathrm{Dom}(f)$) je sice zaručena diferencovatelnost funkce F, otázkou ale je, jak pro dané $\alpha^{(k)}$ získat hodnotu $F'(\alpha^{(k)})$. Nejjednodušší variantou je nahradit derivaci diferencí:

$$F'(\alpha^{(k)}) \approx \frac{F(\alpha^{(k)}) - F(\alpha^{(k-1)})}{\alpha^{(k)} - \alpha^{(k-1)}}.$$

Tato varianta zřejmě připadá v úvahu pouze tehdy, nejsou-li rozdíly $\left|\alpha^{(k)} - \alpha^{(k-1)}\right|$ příliš velké.

Obecnější varianta vychází z toho, že zderivujeme úlohu (2) podle α. Dostaneme

$$\frac{\partial}{\partial \alpha}\left(\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}(x; \alpha)\right) = \frac{\partial}{\partial \alpha} f\left(x, y(x; \alpha), \frac{\partial y}{\partial x}(x; \alpha)\right), \tag{4a}$$

$$\frac{\partial y}{\partial \alpha}(a; \alpha) = 0, \tag{4b}$$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha}\left(\frac{\partial y}{\partial x}(a; \alpha)\right) = 1. \tag{4c}$$

[1] Zde se pojmem „algebraická rovnice" rozumí pouze to, že nejde o rovnici diferenciální; neznamená to, že se v ní musejí vyskytovat polynomy.

Rovnici (4a) můžeme dále upravit podle věty o derivaci složeného zobrazení. Za předpokladu záměnnosti derivací dostaneme

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\frac{\partial y}{\partial \alpha}\right) = \frac{\partial f}{\partial y}\left(x,\, y,\, \frac{\partial y}{\partial x}\right)\cdot\frac{\partial y}{\partial \alpha} + \frac{\partial f}{\partial y'}\left(x,\, y,\, \frac{\partial y}{\partial x}\right)\cdot\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial y}{\partial \alpha}\right), \tag{5a}$$

$$\frac{\partial y}{\partial \alpha}(a;\, \alpha) = 0, \tag{5b}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial y}{\partial \alpha}(a;\, \alpha)\right) = 1. \tag{5c}$$

Pro pevné α představuje (5) počáteční úlohu pro lineární diferenciální rovnici 2. řádu pro neznámou funkci $\frac{\partial y}{\partial \alpha}(x;\, \alpha)$.

Shrňme si nastíněný postup: Máme-li $\alpha^{(k)}$, pak:

- vyřešíme úlohu (2) pro $\alpha = \alpha^{(k)}$, získáváme $F(\alpha^{(k)})$,
- vyřešíme úlohu (5) pro $\alpha = \alpha^{(k)}$, získáváme $F'(\alpha^{(k)})$,
- vypočteme $\alpha^{(k+1)}$ ze vztahu (3).

1.1.2. *Okrajová úloha pro soustavu rovnic 1. řádu.* Každou diferenciální rovnici n-tého řádu lze vhodnou substitucí převést na soustavu n diferenciálních rovnic 1. řádu, proto se zabývejme okrajovou úlohou

$$\boldsymbol{y}' = \boldsymbol{f}(x,\, \boldsymbol{y}), \quad x \in (a,\, b), \tag{6a}$$

$$\boldsymbol{r}\left(\boldsymbol{y}(a),\, \boldsymbol{y}(b)\right) = \boldsymbol{0}, \tag{6b}$$

kde $\boldsymbol{f} : \mathbf{R}\times\mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^n$ a $\boldsymbol{r} : \mathbf{R}^n\times\mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^n$.[2] Postupovat budeme podobně jako v případě rovnice 2. řádu: Pro $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1,\, \ldots,\, \alpha_n) \in \mathbf{R}^n$ nechť $\boldsymbol{y}(x;\, \boldsymbol{\alpha})$ je řešení počáteční úlohy

$$\boldsymbol{y}' = \boldsymbol{f}(x,\, \boldsymbol{y}), \quad x \in (a,\, b), \tag{7a}$$

$$\boldsymbol{y}(a) = \boldsymbol{\alpha}. \tag{7b}$$

Cílem je nalézt takové $\boldsymbol{\alpha}^*$, které je řešením rovnice

$$\boldsymbol{r}\left(\boldsymbol{\alpha},\, \boldsymbol{y}(b;\, \boldsymbol{\alpha})\right) = \boldsymbol{0}$$

neboli $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{\alpha}) = \boldsymbol{0}$, kde $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{\alpha}) = \boldsymbol{r}\left(\boldsymbol{\alpha},\, \boldsymbol{y}(b;\, \boldsymbol{\alpha})\right)$. Řešení této rovnice hledáme Newtonovou metodou, tj. konstruujeme iterační posloupnost $\left\{\boldsymbol{\alpha}^{(k)}\right\}$ podle rekurentního vztahu

$$\boldsymbol{\alpha}^{(k+1)} = \boldsymbol{\alpha}^{(k)} - \left[\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{\alpha}^{(k)})\right]^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}),$$

kde

$$\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{\alpha}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial F^1}{\partial \alpha_1}(\boldsymbol{\alpha}) & \ldots & \frac{\partial F^1}{\partial \alpha_n}(\boldsymbol{\alpha}) \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial F^n}{\partial \alpha_1}(\boldsymbol{\alpha}) & \ldots & \frac{\partial F^n}{\partial \alpha_n}(\boldsymbol{\alpha}) \end{pmatrix}.$$

Parciální derivace zobrazení $\boldsymbol{F}$ v bodě $\boldsymbol{\alpha}$ můžeme stejně jako v předchozím případě počítat dvěma způsoby. Buď použijeme přibližného vyjádření

$$\frac{\partial F^i}{\partial \alpha_j}(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}) \approx \frac{1}{\alpha_j^{(k)} - \alpha_j^{(k-1)}}\left[F^i(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}) - F^i(\alpha_1^{(k)},\, \ldots,\, \alpha_{j-1}^{(k)},\, \alpha_j^{(k-1)},\, \alpha_{j+1}^{(k)},\, \ldots,\, \alpha_n^{(k)})\right],$$

anebo vyjdeme z toho, že

$$\frac{\partial F^i}{\partial \alpha_j}(\boldsymbol{\alpha}) = \frac{\partial r^i}{\partial \alpha_j}(\boldsymbol{\alpha},\, \boldsymbol{y}(b;\, \boldsymbol{\alpha})) + \sum_{l=1}^{n}\frac{\partial r^i}{\partial y^l}(\boldsymbol{\alpha},\, \boldsymbol{y}(b;\, \boldsymbol{\alpha}))\cdot\frac{\partial y^l}{\partial \alpha_j}(b;\, \boldsymbol{\alpha}).$$

[2] Předpokládáme $n > 1$ a dále to, že zobrazení $\boldsymbol{r}$ je n-regulární (tj. $\mathrm{h}(\boldsymbol{r}'(\boldsymbol{y}_1,\, \boldsymbol{y}_2)) = n$ pro všechna $(\boldsymbol{y}_1,\, \boldsymbol{y}_2) \in \mathrm{Dom}(\boldsymbol{r})$).

Hodnoty $\frac{\partial y^1}{\partial \alpha_j}(b;\, \boldsymbol{\alpha}),\, \dots,\, \frac{\partial y^n}{\partial \alpha_j}(b;\, \boldsymbol{\alpha})$ získáme jako řešení počáteční úlohy

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial y^i}{\partial \alpha_j}(x;\, \boldsymbol{\alpha})\right) = \sum_{l=1}^{n} \frac{\partial f^i}{\partial y^l}\,(x,\, \boldsymbol{y}(x;\, \boldsymbol{\alpha})) \cdot \frac{\partial y^l}{\partial \alpha_j}(x;\, \boldsymbol{\alpha}), \qquad i \in \widehat{n},$$
$$\frac{\partial y^i}{\partial \alpha_j}(a;\, \boldsymbol{\alpha}) = \delta_{ij}, \qquad i \in \widehat{n}.$$

Tuto úlohu jsme získali zderivováním úlohy (7) podle α_j. Jde o počáteční úlohu pro soustavu lineárních obyčejných diferenciálních rovnic 1. řádu. Stejný postup provedeme pro každé $j \in \widehat{n}$ a dále postupujeme podobně jako v případě rovnice 2. řádu, tj. nasazením metod Runge-Kutta.

1.1.3. *Okrajová úloha pro soustavu lineárních rovnic 1. řádu.* V případě *lineární* okrajové úlohy můžeme nalézt $\boldsymbol{\alpha}^*$ i bez použití Newtonovy metody. Uvažujme soustavu

$$\boldsymbol{y}' = \mathbf{A}(x)\boldsymbol{y} + \boldsymbol{f}(x), \quad x \in (a,\, b),$$

kde $\mathbf{A} : (a,\, b) \to \mathbf{R}^{n,n}$ a $\boldsymbol{f} : (a,\, b) \to \mathbf{R}^n$, společně s okrajovou podmínkou

$$\mathbf{U}\boldsymbol{y}(a) + \mathbf{V}\boldsymbol{y}(b) = \boldsymbol{c}, \tag{8}$$

kde $\mathbf{U},\, \mathbf{V} \in \mathbf{R}^{n,n}$ a $\boldsymbol{c} \in \mathbf{R}^n$. Z teorie víme, že pro každé $i \in \widehat{n}$ existuje právě jedno řešení $\boldsymbol{\Phi}_i$ počáteční úlohy

$$\boldsymbol{y}' = \mathbf{A}(x)\boldsymbol{y},$$
$$\boldsymbol{y}(a) = \boldsymbol{e}_i.$$

To znamená, že je-li $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbf{R}^n$, potom $\boldsymbol{y}(x) = \sum\limits_{i=1}^{n} \alpha_i \boldsymbol{\Phi}_i(x)$ je řešení počáteční úlohy

$$\boldsymbol{y}' = \mathbf{A}(x)\boldsymbol{y},$$
$$\boldsymbol{y}(a) = \boldsymbol{\alpha},$$

na intervalu $(a,\, b)$. Označíme-li $\boldsymbol{\Phi} := (\boldsymbol{\Phi}_1,\, \dots,\, \boldsymbol{\Phi}_n)$, můžeme toto řešení zapsat jako $\boldsymbol{y}(x) = \boldsymbol{\Phi}(x)\boldsymbol{\alpha}$. Jestliže pro $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbf{R}^n$ dále označíme $\boldsymbol{y}(x;\, \boldsymbol{\alpha})$ řešení počáteční úlohy

$$\boldsymbol{y}' = \mathbf{A}(x)\boldsymbol{y} + \boldsymbol{f}(x),$$
$$\boldsymbol{y}(a) = \boldsymbol{\alpha},$$

potom z linearity vyplývá

$$\boldsymbol{y}(x;\, \boldsymbol{\alpha}) = \boldsymbol{\Phi}(x)\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{y}(x;\, \mathbf{0}).$$

Má-li toto řešení splňovat okrajovou podmínku (8), musí platit $\mathbf{U}\boldsymbol{\alpha} + \mathbf{V}\boldsymbol{y}(b;\, \boldsymbol{\alpha}) = \boldsymbol{c}$, tj.

$$\mathbf{U}\boldsymbol{\alpha} + \mathbf{V}\boldsymbol{\Phi}(b)\boldsymbol{\alpha} + \mathbf{V}\boldsymbol{y}(b;\, \mathbf{0}) = \boldsymbol{c}.$$

Odtud již snadno dostaneme

$$\boldsymbol{\alpha}^* = \left[\mathbf{U} + \mathbf{V}\boldsymbol{\Phi}(b)\right]^{-1} \left(\boldsymbol{c} - \mathbf{V}\boldsymbol{y}(b;\, \mathbf{0})\right).$$

1.1.4. *Modifikovaná Newtonova metoda.* Newtonovu metodu lze vylepšit. Iterační posloupnost $\left\{\boldsymbol{\alpha}^{(k)}\right\}$ se totiž nemusí k řešení $\boldsymbol{\alpha}^*$ rovnice $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{0}$ blížit monotonně, ale vzdálenost $\boldsymbol{\alpha}^{(k)}$ od $\boldsymbol{\alpha}^*$ může s rostoucím k chvíli klesat a chvíli stoupat. Ukážeme si, že tento nedostatek lze odstranit, jestliže budeme iterační posloupnost konstruovat podle vztahu

$$\boldsymbol{\alpha}^{(k+1)} = \boldsymbol{\alpha}^{(k)} - \lambda^{(k)} \left[\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{\alpha}^{(k)})\right]^{-1} \boldsymbol{F}(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}),$$

kde $\left\{\lambda^{(k)}\right\}_{k=1}^{\infty}$ je vhodně volená posloupnost reálných čísel. Položme

$$\Phi(\boldsymbol{\alpha}) = \|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{\alpha})\|^2 = \sum_{i=1}^{n} \left|F^i(\boldsymbol{\alpha})\right|^2.$$

Naším cílem je zvolit posloupnost $\left\{\lambda^{(k)}\right\}$ tak, aby $\Phi(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}) \searrow 0$ pro $k \to \infty$. Existence takové posloupnosti vyplývá za předpokladu konvergence metody z následující věty.

Věta 1.1. K danému $\boldsymbol{\alpha}^{(k)}$ existuje $\lambda^{(k)} > 0$ tak, že $\Phi(\boldsymbol{\alpha}^{(k+1)}) < \Phi(\boldsymbol{\alpha}^{(k)})$.

Důkaz. Pro jednodušší zápis označme

$$\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(k)} := -\left[\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{\alpha}^{(k)})\right]^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{\alpha}^{(k)})$$

a dále položme

$$\Psi(\lambda) := \Phi(\boldsymbol{\alpha}^{(k)} + \lambda\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(k)}) = \sum_{i=1}^{n}\left|F^i(\boldsymbol{\alpha}^{(k)} + \lambda\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(k)})\right|^2.$$

Je

$$\begin{aligned}\Psi'(\lambda) &= 2\sum_{i=1}^{n} F^i(\boldsymbol{\alpha}^{(k)} + \lambda\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(k)})\cdot\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial F^i}{\partial\alpha_j}(\boldsymbol{\alpha}^{(k)} + \lambda\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(k)})\left(\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(k)}\right)_j = \\ &= 2\sum_{i=1}^{n} F^i(\boldsymbol{\alpha}^{(k)} + \lambda\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(k)})\left(\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{\alpha}^{(k)} + \lambda\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(k)})\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(k)}\right)_i = \\ &= 2\left(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{\alpha}^{(k)} + \lambda\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(k)}),\, \boldsymbol{F}'(\boldsymbol{\alpha}^{(k)} + \lambda\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(k)})\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(k)}\right),\end{aligned}$$

takže

$$\begin{aligned}\Psi'(0) &= 2\left(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}),\, \boldsymbol{F}'(\boldsymbol{\alpha}^{(k)})\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(k)}\right) = 2\left(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}),\, -\boldsymbol{F}(\boldsymbol{\alpha}^{(k)})\right) = \\ &= -2\|\boldsymbol{F}(\boldsymbol{\alpha}^{(k)})\|^2 = -2\Phi(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}) \leq 0,\end{aligned}$$

přičemž rovnost nastává právě tehdy, když $\boldsymbol{\alpha}^{(k)}$ je přesné řešení. Předpokládejme proto, že $\Psi'(0) < 0$. Je-li zobrazení $\boldsymbol{F}$ spojitě diferencovatelné, má tuto vlastnost zřejmě i funkce Ψ, a proto

$$(\exists\delta > 0)(\forall\lambda \in \langle 0,\, \delta))(\Psi'(\lambda) < 0).$$

To ale znamená, že funkce Ψ je na $\langle 0,\, \delta)$ klesající, tj. pro každé $\lambda \in (0,\, \delta)$ platí $\Psi(\lambda) < \Psi(0)$ neboli $\Phi(\boldsymbol{\alpha}^{(k)} - \lambda\left[\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{\alpha}^{(k)})\right]^{-1}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}) < \Phi(\boldsymbol{\alpha}^{(k)})$. □

Z důkazu předchozí věty můžeme odvodit návod, jak hledat čísla $\lambda^{(k)}$: Nejprve zkusíme položit $\lambda^{(k)} = 1$. Jestliže bude splněno $\Phi(\boldsymbol{\alpha}^{(k+1)}) < \Phi(\boldsymbol{\alpha}^{(k)})$, pokračujeme další iterací; v opačném případě vydělíme $\lambda^{(k)}$ dvěma a celý postup opakujeme.

1.1.5. *Metoda střelby na více cílů.* Metoda střelby se typicky používá při řešení nelineárních rovnic. Ve snaze snížit riziko nestability úloh, byl vyvinut postup zkracující intervaly, na niž probíhá řešení počátečních úloh. Vraťme se k okrajové úloze (6). Buď $\{x_i\}_{i=0}^m$ rozdělení intervalu $\langle a,\, b\rangle$, tj. nechť

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_m = b.$$

Nechť pro každé $j \in \widehat{m}$ je $\boldsymbol{y}^{(j-1)}(x;\, \boldsymbol{\alpha}^{(j-1)})$ řešení počáteční úlohy

$$\boldsymbol{y}' = \boldsymbol{f}(x,\, \boldsymbol{y}), \quad x \in (x_{j-1},\, x_j), \tag{9a}$$

$$\boldsymbol{y}(x_{j-1}) = \boldsymbol{\alpha}^{(j-1)}, \tag{9b}$$

kde $\boldsymbol{\alpha}^{(j-1)} \in \mathbf{R}^n$. Naším cílem je nalézt body $\boldsymbol{\alpha}^{*(0)},\, \ldots,\, \boldsymbol{\alpha}^{*(m-1)}$ tak, aby pro každé $j \in \widehat{m}$ bylo $\boldsymbol{y}^{(j-1)}(x;\, \boldsymbol{\alpha}^{*(j-1)})$ restrikcí řešení okrajové úlohy (6) na interval $(x_{j-1},\, x_j)$. Řešení úlohy (6) je jistě spojité, a proto musí pro každé $j \in \widehat{m-1}$ platit

$$\boldsymbol{y}^{(j-1)}(x_j;\, \boldsymbol{\alpha}^{*(j-1)}) = \boldsymbol{\alpha}^{*(j)}.$$

Dále musí být splněna okrajová podmínka (6b). Ta nyní nabyde tvaru

$$\boldsymbol{r}\left(\boldsymbol{\alpha}^{*(0)},\, \boldsymbol{y}^{(m-1)}(x_m;\, \boldsymbol{\alpha}^{*(m-1)})\right) = \mathbf{0}.$$

Jestliže pro $j \in \widehat{m}$ položíme

$$\boldsymbol{F}_{j-1}(\boldsymbol{\alpha}^{(0)},\, \boldsymbol{\alpha}^{(1)},\, \ldots,\, \boldsymbol{\alpha}^{(m-1)}) := \begin{cases}\boldsymbol{y}^{(j-1)}(x_j;\, \boldsymbol{\alpha}^{(j-1)}) - \boldsymbol{\alpha}^{(j)} & j \leq m-1,\\ \boldsymbol{r}(\boldsymbol{\alpha}^{(0)},\, \boldsymbol{y}^{(m-1)}(x_m;\, \boldsymbol{\alpha}^{(m-1)})) & j = m,\end{cases}$$

a dále

$$\mathbf{F} := (\boldsymbol{F}_0,\, \boldsymbol{F}_1,\, \dots,\, \boldsymbol{F}_{m-1})^{\mathsf{T}},$$

potom bude m-tice $\boldsymbol{\alpha}^* := (\boldsymbol{\alpha}^{*(0)},\, \boldsymbol{\alpha}^{*(1)},\, \dots,\, \boldsymbol{\alpha}^{*(m-1)})$ řešením rovnice

$$\mathbf{F}(\boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{O}.$$

Řešení této rovnice budeme hledat Newtonovou metodou

$$\boldsymbol{\alpha}_{k+1} = \boldsymbol{\alpha}_k - \left[\mathbf{F}'(\boldsymbol{\alpha}_k)\right]^{-1} \mathbf{F}(\boldsymbol{\alpha}_k). \tag{10}$$

Pro danou m-tici $\boldsymbol{\alpha} = (\boldsymbol{\alpha}^{(0)},\, \boldsymbol{\alpha}^{(1)},\, \dots,\, \boldsymbol{\alpha}^{(m-1)})$ je

$$\mathbf{F}'(\boldsymbol{\alpha}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial \boldsymbol{y}^{(0)}}{\partial \boldsymbol{\alpha}^{(0)}} & -\mathbf{E} & \mathbf{O} & \dots & \mathbf{O} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \frac{\partial \boldsymbol{y}^{(1)}}{\partial \boldsymbol{\alpha}^{(1)}} & -\mathbf{E} & \dots & \mathbf{O} & \mathbf{O} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mathbf{O} & \mathbf{O} & \mathbf{O} & \dots & \frac{\partial \boldsymbol{y}^{(m-2)}}{\partial \boldsymbol{\alpha}^{(m-2)}} & -\mathbf{E} \\ \frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial \boldsymbol{y}_1} & \mathbf{O} & \mathbf{O} & \dots & \mathbf{O} & \frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial \boldsymbol{y}_2} \frac{\partial \boldsymbol{y}^{(m-1)}}{\partial \boldsymbol{\alpha}^{(m-1)}} \end{pmatrix}, \tag{11}$$

kde jsme označili

$$\frac{\partial \boldsymbol{y}^{(j-1)}}{\partial \boldsymbol{\alpha}^{(j-1)}} = \left(\frac{\partial \boldsymbol{y}^{(j-1)}}{\partial \alpha_1}(x_j;\, \boldsymbol{\alpha}^{(j-1)}),\, \dots,\, \frac{\partial \boldsymbol{y}^{(j-1)}}{\partial \boldsymbol{\alpha}_n}(x_j;\, \boldsymbol{\alpha}^{(j-1)}) \right)$$

pro $j \in \widehat{m}$ a

$$\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial \boldsymbol{y}_i} = \left(\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial y_i^1}(\boldsymbol{\alpha}^{(0)},\, \boldsymbol{y}^{(m-1)}(x_m;\, \boldsymbol{\alpha}^{(m-1)})),\, \dots,\, \frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial y_i^n}(\boldsymbol{\alpha}^{(0)},\, \boldsymbol{y}^{(m-1)}(x_m;\, \boldsymbol{\alpha}^{(m-1)})) \right)$$

pro $i = 1,\, 2$. Hodnoty $\frac{\partial \boldsymbol{y}^{(j-1)}}{\partial \alpha_k}(x_j;\, \boldsymbol{\alpha}^{(j-1)})$ získáme řešením počáteční úlohy

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial y^{(j-1),i}}{\partial \alpha_k}(x;\, \boldsymbol{\alpha}^{(j-1)}) \right) &= \sum_{l=1}^{n} \frac{\partial f^i}{\partial y^l}\left(x,\, \boldsymbol{y}^{(j-1)}(x;\, \boldsymbol{\alpha}^{(j-1)})\right) \cdot \frac{\partial y^{(j-1),l}}{\partial \alpha_k}(x;\, \boldsymbol{\alpha}^{(j-1)}), \qquad i \in \widehat{n}, \\ \frac{\partial y^{(j-1),i}}{\partial \alpha_k}(x_{j-1};\, \boldsymbol{\alpha}^{(j-1)}) &= \delta_{ik}, \qquad i \in \widehat{n}. \end{aligned}$$

Tuto úlohu jsme získali zderivováním (9) pro pevné $j \in \widehat{m}$.

Poznámka 1.1. Využijeme-li blokové struktury matice (11), můžeme se v Newtonově metodě vyhnout výpočtu matice inverzní. Vztah (10) můžeme přepsat ve tvaru

$$\mathbf{F}'(\boldsymbol{\alpha}_k)\Delta\boldsymbol{\alpha}_k = -\mathbf{F}(\boldsymbol{\alpha}_k),$$

kde jsme označili $\Delta\boldsymbol{\alpha}_k := \boldsymbol{\alpha}_{k+1} - \boldsymbol{\alpha}_k$. Rozepsáním tohoto vztahu dostaneme

$$\begin{aligned} \frac{\partial \boldsymbol{y}^{(0)}}{\partial \boldsymbol{\alpha}^{(0)}}\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(0)} - \Delta\boldsymbol{\alpha}^{(1)} &= -\boldsymbol{F}_0(\boldsymbol{\alpha}_k), \\ &\vdots \\ \frac{\partial \boldsymbol{y}^{(m-2)}}{\partial \boldsymbol{\alpha}^{(m-2)}}\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(m-2)} - \Delta\boldsymbol{\alpha}^{(m-1)} &= -\boldsymbol{F}_{m-2}(\boldsymbol{\alpha}_k), \\ \frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial \boldsymbol{y}_1}\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(0)} + \frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial \boldsymbol{y}_2}\frac{\partial \boldsymbol{y}^{(m-1)}}{\partial \boldsymbol{\alpha}^{(m-1)}}\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(m-1)} &= -\boldsymbol{F}_{m-1}(\boldsymbol{\alpha}_k). \end{aligned}$$

Odtud pak můžeme vyjádřit

$$\begin{aligned}
\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(1)} &= \frac{\partial \boldsymbol{y}^{(0)}}{\partial \boldsymbol{\alpha}^{(0)}}\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(0)} + \boldsymbol{F}_0(\boldsymbol{\alpha}_k),\\
\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(2)} &= \frac{\partial \boldsymbol{y}^{(1)}}{\partial \boldsymbol{\alpha}^{(1)}}\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(1)} + \boldsymbol{F}_1(\boldsymbol{\alpha}_k) = \frac{\partial \boldsymbol{y}^{(1)}}{\partial \boldsymbol{\alpha}^{(1)}}\frac{\partial \boldsymbol{y}^{(0)}}{\partial \boldsymbol{\alpha}^{(0)}}\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(0)} + \frac{\partial \boldsymbol{y}^{(1)}}{\partial \boldsymbol{\alpha}^{(1)}}\boldsymbol{F}_0(\boldsymbol{\alpha}_k) + \boldsymbol{F}_1(\boldsymbol{\alpha}_k),\\
&\vdots\\
\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(m-1)} &= \coprod_{j=m-1}^{1}\frac{\partial \boldsymbol{y}^{(j-1)}}{\partial \boldsymbol{\alpha}^{(j-1)}}\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(0)} + \sum_{i=0}^{m-3}\coprod_{j=m-1}^{i+2}\frac{\partial \boldsymbol{y}^{(j-1)}}{\partial \boldsymbol{\alpha}^{(j-1)}}\boldsymbol{F}_i(\boldsymbol{\alpha}_k) + \boldsymbol{F}_{m-2}(\boldsymbol{\alpha}_k).
\end{aligned}$$

Z poslední rovnice dostaneme

$$\left(\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial \boldsymbol{y}_1} + \frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial \boldsymbol{y}_2}\coprod_{j=m}^{1}\frac{\partial \boldsymbol{y}^{(j-1)}}{\partial \boldsymbol{\alpha}^{(j-1)}}\right)\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(0)} = -\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial \boldsymbol{y}_2}\sum_{i=0}^{m-2}\coprod_{j=m}^{i+2}\frac{\partial \boldsymbol{y}^{(j-1)}}{\partial \boldsymbol{\alpha}^{(j-1)}}\boldsymbol{F}_i(\boldsymbol{\alpha}_k) - \boldsymbol{F}_{m-1}(\boldsymbol{\alpha}_k).$$

Odtud vypočeteme $\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(0)}$ a z předchozích vztahů pak ostatní $\Delta\boldsymbol{\alpha}^{(j)}$, $j \in \widehat{m-1}$.

1.2. **Metoda přesunu okrajové podmínky.** Metoda střelby představuje nástroj použitelný pro širokou třídu úloh, na druhé straně však hledání správného α^* pomocí iteračních metod může někdy přinést komplikace. Je-li okrajová úloha, kterou se zabýváme, lineární, nabízí se mnohem snažší varianta.

1.2.1. *Okrajová úloha pro rovnici 2. řádu.* Buď (a, b) omezený interval a nechť $p \in \mathcal{C}\langle a, b\rangle \cap \mathcal{C}^1(a, b)$, $q \in \mathcal{C}\langle a, b\rangle$, $f \in \mathcal{C}(a, b)$. Nechť dále platí

$$p(x) \geq p_0 > 0, \quad q(x) \geq 0, \quad \forall x \in (a, b).$$

Uvažme diferenciální rovnici

$$\left(p(x)y'\right)' - q(x)y = f(x), \quad x \in (a, b), \tag{12}$$

s okrajovými podmínkami

$$\begin{aligned}
\alpha_1 p(a)y'(a) - \beta_1 y(a) &= \gamma_1, &\text{(13a)}\\
\alpha_2 p(b)y'(b) + \beta_2 y(b) &= \gamma_2, &\text{(13b)}
\end{aligned}$$

kde $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2 \geq 0$, $\gamma_1, \gamma_2 \in \mathbf{R}$, a navíc

$$\begin{aligned}
\alpha_1 + \beta_1 &> 0,\\
\alpha_2 + \beta_2 &> 0.
\end{aligned}$$

Věta 1.2. Buď y řešení rovnice (12) na intervalu $\langle a, b\rangle$ splňující pro nějaké $\xi \in \langle a, b\rangle$ vztah

$$\alpha p(\xi)y'(\xi) - \beta y(\xi) = \gamma,$$

kde $\alpha, \beta, \gamma \in \mathbf{R}$. Potom pro **každé** $x \in \langle a, b\rangle$ platí

$$(zpy')(x) - (z'py)(x) = c(x), \tag{14}$$

kde z, resp. c je řešení počáteční úlohy

$$\begin{aligned}
(pz')' - qz &= 0, &\text{(15a)}\\
z(\xi) &= \alpha, &\text{(15b)}\\
z'(\xi) &= \frac{\beta}{p(\xi)}, &\text{(15c)}
\end{aligned}$$

resp.

$$\begin{aligned}
c' &= zf, &\text{(16a)}\\
c(\xi) &= \gamma, &\text{(16b)}
\end{aligned}$$

na $\langle a, b\rangle$.

Důkaz. Úloha (15) je díky linearitě na intervalu $\langle a, b\rangle$ jednoznačně řešitelná, totéž platí pro úlohu (16) (poté, co do ní dosadíme za z řešení úlohy (15)). Odtud vyplývá, že obě strany ve vztahu (14) jsou dobře definovány pro všechna $x \in \langle a, b\rangle$ a navíc jsou diferencovatelné. Dále platí

$$\begin{aligned}(zpy' - z'py - c)' &= z'py' + z(py')' - (z'p)'y - z'py' - c' = \\ &= z(f + qy) - (z'p)'y - c' = zf - c' + (zq - (z'p)')\, y = 0\end{aligned}$$

pro každé $x \in \langle a, b\rangle$. To ale znamená, že funkce $zpy' - z'py - c$ je na $\langle a, b\rangle$ konstantní. Stačí tedy dokázat platnost (14) v jediném bodě $x \in \langle a, b\rangle$ a to se nám skutečně podaří: (14) je totiž splněno pro $x = \xi$, jak se snadno přesvědčíme. □

Poznámka 1.2. Důkaz předchozí věty je velmi jednoduchý a jeho znalost nám navíc ušetří nutnost pamatovat si tvar úloh (15), (16) — ten totiž vyplyne z požadavku, aby se derivace v důkaze rovnala nule.

Nyní popíšeme samotnou metodu přesunu okrajové podmínky pro rovnici 2. řádu: Okrajové podmínky (13) chceme nahradit ekvivalentními počátečními podmínkami

$$\begin{aligned} y(x_0) &= \omega_1, \\ y'(x_0) &= \omega_2, \end{aligned}$$

kde $x_0 \in \langle a, b\rangle$ libovolně zvolíme. Postup můžeme rozdělit do čtyř kroků:

(1) Nalezneme řešení z počáteční úlohy

$$\begin{aligned} (pz')' - qz &= 0, \\ z(a) &= \alpha_1, \\ z'(a) &= \frac{\beta_1}{p(a)}, \end{aligned}$$

a posléze řešení c počáteční úlohy

$$\begin{aligned} c' &= zf, \\ c(a) &= \gamma_1. \end{aligned}$$

(2) Nalezneme řešení u počáteční úlohy

$$\begin{aligned} (pu')' - qu &= 0, \\ u(b) &= \alpha_2, \\ u'(b) &= -\frac{\beta_2}{p(b)}, \end{aligned}$$

a posléze řešení d počáteční úlohy

$$\begin{aligned} d' &= uf, \\ d(b) &= \gamma_2. \end{aligned}$$

(3) Řešíme soustavu dvou lineárních algebraických rovnic

$$(zp)(x_0)\omega_2 - (z'p)(x_0)\omega_1 = c(x_0), \tag{17a}$$

$$(up)(x_0)\omega_2 - (u'p)(x_0)\omega_1 = d(x_0) \tag{17b}$$

pro dvě neznámé ω_1, ω_2.[3]

Poznámka 1.3. Řešitelnost soustavy (17) nám dává informaci o řešitelnosti původní okrajové úlohy:

- Nemá-li (17) řešení, nemá je ani okrajová úloha (12), (13).
- Má-li (17) jediné řešení, má i okrajová úloha (12), (13) jediné řešení.
- Má-li (17) více řešení, má i okrajová úloha (12), (13) více řešení.

[3] Je-li y řešení úlohy (12), (13), musí podle věty platit $y(x_0) = \omega_1$, $y'(x_0) = \omega_2$.

(4) Řešíme počáteční úlohu

$$\begin{aligned}(py')' - qy &= f,\\ y(x_0) &= \omega_1,\\ y'(x_0) &= \omega_2.\end{aligned}$$

Poznámka 1.4. Bod $x_0 \in \langle a,\, b\rangle$ můžeme zvolit libovolně. Jako výhodné se však jeví zvolit buď $x_0 = a$, nebo $x_0 = b$. Ukažme si, jak to dopadne pro $x_0 = a$:

(1) Nalezneme řešení u počáteční úlohy

$$\begin{aligned}(pu')' - qu &= 0,\\ u(b) &= \alpha_2,\\ u'(b) &= -\frac{\beta_2}{p(b)},\end{aligned}$$

a posléze řešení d počáteční úlohy

$$\begin{aligned}d' &= uf,\\ d(b) &= \gamma_2.\end{aligned}$$

(2) Řešíme soustavu dvou lineárních algebraických rovnic

$$\begin{aligned}\alpha_1 p(a)\omega_2 - \beta_1\omega_1 &= \gamma_1,\\ (up)(a)\omega_2 - (u'p)(a)\omega_1 &= d(a)\end{aligned}$$

pro dvě neznámé ω_1, ω_2.

(3) Řešíme počáteční úlohu

$$\begin{aligned}(py')' - qy &= f,\\ y(a) &= \omega_1,\\ y'(a) &= \omega_2.\end{aligned}$$

1.2.2. *Okrajová úloha pro soustavu rovnic 1. řádu.* Uvažujme soustavu lineárních diferenciálních rovnic 1. řádu

$$\boldsymbol{y}' = \mathbf{A}(x)\boldsymbol{y} + \boldsymbol{f}(x), \quad x \in (a,\, b), \tag{18}$$

kde $\mathbf{A} : \langle a,\, b\rangle \to \mathbf{R}^{n,n}$ a $\boldsymbol{f} : \langle a,\, b\rangle \to \mathbf{R}^n$, společně s dvojicí okrajových podmínek

$$\mathbf{U}_1\boldsymbol{y}(a) = \boldsymbol{c}_1, \tag{19a}$$

$$\mathbf{U}_2\boldsymbol{y}(b) = \boldsymbol{c}_2, \tag{19b}$$

kde $\mathbf{U}_1 \in \mathbf{R}^{n_1,n}$, $\mathrm{h}(\mathbf{U}_1) = n_1$, $\boldsymbol{c}_1 \in \mathbf{R}^{n_1}$ a $\mathbf{U}_2 \in \mathbf{R}^{n_2,n}$, $\mathrm{h}(\mathbf{U}_2) = n_2$, $\boldsymbol{c}_2 \in \mathbf{R}^{n_2}$, přičemž $n_1 + n_2 = n > 1$.

Věta 1.3. Buď $\boldsymbol{y}$ řešení soustavy (18) na intervalu $\langle a,\, b\rangle$ splňující pro nějaké $\xi \in \langle a,\, b\rangle$ vztah

$$\mathbf{U}\boldsymbol{y}(\xi) = \boldsymbol{c},$$

kde $\mathbf{U} \in \mathbf{R}^{\tilde{n},n}$ a $\boldsymbol{c} \in \mathbf{R}^{\tilde{n}}$, $\tilde{n} \le n$. Potom pro každé $x \in \langle a,\, b\rangle$ platí

$$\mathbf{R}(x)\boldsymbol{y}(x) = \boldsymbol{r}(x), \tag{20}$$

kde $\mathbf{R}$, resp. $\boldsymbol{r}$ je řešení počáteční úlohy

$$\begin{aligned}\mathbf{R}' &= -\mathbf{R}\mathbf{A},\\ \mathbf{R}(\xi) &= \mathbf{U},\end{aligned}$$

resp.

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}' &= \mathbf{R}\boldsymbol{f},\\ \boldsymbol{r}(\xi) &= \boldsymbol{c}\end{aligned}$$

na $\langle a,\, b\rangle$.[4]

[4]Připomeňme, že $\mathbf{R} : \langle a,\, b\rangle \to \mathbf{R}^{\tilde{n},n}$ a že $(\mathbf{R}')_{ij}(x) = (\mathbf{R}_{ij})'(x)$ pro všechna $x \in \langle a,\, b\rangle$, $i \in \widehat{\tilde{n}}$, $j \in \widehat{n}$.

Důkaz. Je podobný jako v jednorozměrném případě, proto již stručněji: (20) je zřejmě splněno pro $x = \xi$ a dále pro všechna $x \in \langle a,\, b\rangle$ platí

$$(\mathbf{R}\boldsymbol{y} - \boldsymbol{r})' = \mathbf{R}'\boldsymbol{y} + \mathbf{R}\boldsymbol{y}' - \boldsymbol{r}' = \mathbf{R}'\boldsymbol{y} + \mathbf{R}(\mathbf{A}\boldsymbol{y} + \boldsymbol{f}) - \boldsymbol{r}' =$$
$$= (\mathbf{R}' + \mathbf{R}\mathbf{A})\boldsymbol{y} + \mathbf{R}\boldsymbol{f} - \boldsymbol{r}' = \mathbf{0}. \quad \square$$

Podobně jako v jednorozměrném případě chceme dvojici okrajových podmínek (19) nahradit ekvivalentní počáteční podmínkou

$$\boldsymbol{y}(x_0) = \boldsymbol{\eta},$$

kde $x_0 \in \langle a,\, b\rangle$ si zvolíme. Zopakujme praktický postup:

(1) Nalezneme řešení $\mathbf{R} : \langle a,\, b\rangle \to \mathbf{R}^{n_1,n}$ počáteční úlohy

$$\mathbf{R}' = -\mathbf{R}\mathbf{A},$$
$$\mathbf{R}(a) = \mathbf{U}_1,$$

a posléze řešení $\boldsymbol{r} : \langle a,\, b\rangle \to \mathbf{R}^{n_1}$ počáteční úlohy

$$\boldsymbol{r}' = \mathbf{R}\boldsymbol{f},$$
$$\boldsymbol{r}(a) = \boldsymbol{c}_1.$$

(2) Nalezneme řešení $\mathbf{S} : \langle a,\, b\rangle \to \mathbf{R}^{n_2,n}$ počáteční úlohy

$$\mathbf{S}' = -\mathbf{S}\mathbf{A},$$
$$\mathbf{S}(b) = \mathbf{U}_2,$$

a posléze řešení $\boldsymbol{s} : \langle a,\, b\rangle \to \mathbf{R}^{n_2}$ počáteční úlohy

$$\boldsymbol{s}' = \mathbf{S}\boldsymbol{f},$$
$$\boldsymbol{s}(b) = \boldsymbol{c}_2.$$

(3) Řešíme soustavu n lineárních algebraických rovnic

$$\boldsymbol{R}(x_0)\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{r}(x_0),$$
$$\boldsymbol{S}(x_0)\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{s}(x_0).$$

pro n neznámých $\boldsymbol{\eta} \in \mathbf{R}^n$.

(4) Řešíme počáteční úlohu

$$\boldsymbol{y}' = \mathbf{A}\boldsymbol{y} + \boldsymbol{f},$$
$$\boldsymbol{y}(x_0) = \boldsymbol{\eta}.$$

1.3. **Metoda sítí pro ODE.** Metoda sítí, též nazývána metodou konečných diferencí, představuje v současnosti nejpoužívanější způsob řešení diferenciálních rovnic. Spočívá v diskretizaci - nahrazení definičního oboru konečnou sítí bodů a vyjádření derivací jako diferencí, tj. jako lineárních kombinací funkčních hodnot v bodech sítě. Výsledkem je soutava algebraických rovnic s mnoha neznámými (přinejmenším tísíce), která se řeší pomocí teorie matic.

Buď $(a,\, b)$ omezený interval a nechť $p \in \mathcal{C}\langle a,\, b\rangle \cap \mathcal{C}^1(a,\, b)$, $q \in \mathcal{C}\langle a,\, b\rangle$, $f \in \mathcal{C}(a,\, b)$. Nechť dále platí

$$p(x) \geq p_0 > 0, \quad q(x) \geq 0, \quad \forall x \in (a,\, b). \tag{21}$$

Uvažme diferenciální rovnici

$$-\left(p(x)y'\right)' + q(x)y = f(x), \quad x \in (a,\, b), \tag{22}$$

s okrajovými podmínkami

$$\alpha_1 p(a)y'(a) - \beta_1 y(a) \quad = \quad \gamma_1, \tag{23a}$$
$$\alpha_2 p(b)y'(b) + \beta_2 y(b) \quad = \quad \gamma_2, \tag{23b}$$

kde $\alpha_1,\, \alpha_2,\, \beta_1,\, \beta_2 \geq 0,\, \gamma_1,\, \gamma_2 \in \mathbf{R}$, a navíc

$$\begin{aligned} \alpha_1 + \beta_1 &> 0, \\ \alpha_2 + \beta_2 &> 0. \end{aligned}$$

Poznámka 1.5. Pokud neplatí $\beta_1 = \beta_2 = 0$ a $q \equiv 0$, je úloha jednoznačně řešitelná.

Poznámka 1.6. Každou lineární obyčejnou diferenciální rovnici 2. řádu lze zapsat ve tvaru (22), podmínky (21) však obecně *nemusejí* být splněny.

Definice 1.1. Buď $\langle a,\, b\rangle$ omezený interval. Potom číslo

$$h := \frac{b-a}{m}$$

nazýváme **krok sítě**. **Síť na intervalu** $\langle a,\, b\rangle$ definujeme jako množinu

$$\overline{\omega}_h = \{a + jh \,|\, j = 0,\, \ldots,\, m\}.$$

Dále definujeme

$$\begin{aligned} \omega_h &= \{a + jh \,|\, j = 1,\, \ldots,\, m-1\}, \\ \gamma_h &= \overline{\omega}_h - \omega_h. \end{aligned}$$

Prvky množiny ω_h, resp. γ_h nazýváme **vnitřní**, resp. **hraniční body (uzly) sítě**.

Definice 1.2. **Síťovou funkcí** nazveme libovolné zobrazení $u : \overline{\omega}_h \to \mathbf{R}$.

Poznámka 1.7. Označme $\mathcal{H}_h = \{u : \overline{\omega}_h \to \mathbf{R}\}$ množinu všech síťových funkcí na dané síti. Jestliže na $\mathcal{H}_h$ zavedeme obvyklým způsobem operace sčítání síťových funkcí a násobení síťové funkce reálným číslem, dostaneme reálný vektorový prostor dimenze $m+1$. Můžeme tedy prostor $\mathcal{H}_h$ ztotožnit s $\mathbf{R}^{m+1}$.

Je-li $u \in \mathcal{H}_h$ síťová funkce, potom pro $j \in \widehat{m}_0$ označujeme

$$u_j := u(a + jh).$$

Povšimněme si, že toto značení je blízké běžnému označování složek vektoru.

Definice 1.3. Libovolné funkci $y : \langle a,\, b\rangle \to \mathbf{R}$ lze přiřadit síťovou funkci $u \in \mathcal{H}_h$, která je restrikcí funkce y na síť $\overline{\omega}_h$. Tuto síťovou funkci budeme označovat $\mathcal{P}_h y$, kde $\mathcal{P}$ je projekční operátor.

Definice 1.4. Buďte $\|\ \|_h$ norma na $\mathcal{H}_h$, $\|\ \|$ norma na $\mathcal{C}\langle a,\, b\rangle$. Říkáme, že norma $\|\ \|_h$ je **konzistentní**, jestliže

$$\lim_{h\to 0+} \|\mathcal{P}_h y\|_h = \|y\|, \quad \forall y \in \mathcal{C}\langle a,\, b\rangle.$$

Příklad 1.1. Norma

$$\|\mathcal{P}_h y\|_{h,0} := \max_{j\in\widehat{m}_0} |y(a + jh)|$$

je konzistentní s maximovou normou na $\mathcal{C}\langle a,\, b\rangle$.

Příklad 1.2. Seminorma

$$\|\mathcal{P}_h y\|_{h,p} := \left(\sum_{j=1}^{m-1} h\, |y_j|^p\right)^{\frac{1}{p}}$$

je konzistentní s L^p-normou na $\mathcal{C}\langle a,\, b\rangle$.

Definice 1.5. Buď $u \in \mathcal{H}_h$ síťová funkce. Pak definujeme následující operátory interpolace:

(1) $Q_h : \mathcal{H}_h \to \mathcal{C}\langle a,\, b\rangle$,

$$Q_h : u \mapsto \sum_{j=1}^{m} \left[u_{j-1} + \frac{x - a - (j-1)h}{h}(u_j - u_{j-1})\right] \chi_{\langle a+(j-1)h,\, a+jh\rangle},$$

(2) $S_h : \mathcal{H}_h \to L^\infty(a,\, b)$,

$$S_h : u \mapsto u_0 \chi_{\langle a,\, a+\frac{h}{2})} + \sum_{j=1}^{m-1} u_j \chi_{(a+(j-\frac{1}{2})h,\, a+(j+\frac{1}{2})h)} + u_m \chi_{(b-\frac{h}{2},\, b\rangle}.$$

Poznámka 1.8. Je-li $u \in \mathcal{H}_h$ síťová funkce, pak $Q_h u$, resp. $S_h u$ je po částech lineární, resp. po částech konstantní funkce.

1.3.1. *Diferenční náhrada derivací.*

(1) Dopředná diference
$$y'(x) \sim y_x(x) := \frac{y(x+h) - y(x)}{h}.$$
(2) Zpětná diference
$$y'(x) \sim y_{\bar{x}}(x) := \frac{y(x) - y(x-h)}{h}.$$
(3) Pro náhradu 2. derivace používáme výraz $y_{\bar{x}x}(x) := (y_{\bar{x}})_x(x)$. Je tedy
$$y''(x) \sim y_{\bar{x}x}(x) := \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2}.$$

Poznámka 1.9 (náhrada diferenciálních operátorů). Lineární diferenciální operátor $L : y \mapsto -(py')' + qy$ nahradíme lineárním diferenčním operátorem $L_h : u \mapsto -(pu_{\bar{x}})_x + qu$. Speciálně lineární diferenciální operátor $L : y \mapsto -y''$ nahradíme lineárním diferenčním operátorem $L_h : u \mapsto -u_{\bar{x}x}$.

Definice 1.6 (Landauův symbol)**.** Buď $\alpha > 0$. Řekneme, že funkce $f : (\mathbf{R}) \to \mathbf{R}$ definovaná v okolí nuly je $O(h^\alpha)$, je-li funkce
$$h \mapsto \frac{f(h)}{h^\alpha}$$
v okolí nuly omezená.

Definice 1.7. Chybou aproximace diferenciálního operátoru L nazýváme síťovou funkci Ψ_h definovanou pro $y \in \mathrm{Dom}(L)$ vztahem
$$\Psi_h := \mathcal{P}_h(Ly) - L_h(\mathcal{P}_h y).$$

Řekneme, že diferenční operátor L_h **aproximuje diferenciální operátor** L, jestliže existuje taková konzistentní síťová norma $\| \ \|_h$, že
$$\lim_{h \to 0+} \|\Psi_h\|_h = 0, \quad \forall y \in \mathrm{Dom}(L).$$
Jestliže navíc existuje takové $\alpha > 0$, že pro každou funkci $y \in \mathrm{Dom}(L)$ platí $\|\Psi_h\|_h = O(h^\alpha)$, potom říkáme, že diferenční operátor L_h aproximuje diferenciální operátor L **s přesností řádu** α.

Poznámka 1.10. Platí
$$(pu_{\bar{x}})_x(x) = \frac{p(x+h)y(x+h) - p(h+x)y(x) - p(x)y(x) + p(x)y(x-h)}{h^2}$$
a po dosazení $x = a + ih$ dostaneme pro $i \in \widehat{m-1}$
$$((pu_{\bar{x}})_x)_i = \frac{p_{i+1}(y_{i+1} - y_i) - p_i(y_i - y_{i-1})}{h^2}.$$

Věta 1.4. Jestliže funkce p, q splňují základní předpoklady, potom diferenční operátor $L_h : u \mapsto -(pu_{\bar{x}})_x + qu$ aproximuje diferenciální operátor $L : y \mapsto -(py')' + qy$ s přesností $O(h)$.

Důkaz. Pro $j \in \widehat{m-1}$ je
$$\begin{aligned}(\Psi_h)_j &= (Ly)(a+jh) - (L_h(\mathcal{P}_h y))_j = -(py')'(a+jh) + (qy)_j + ((py_{\bar{x}})_x)_j - (qy)_j = \\ &= \frac{p_{j+1}(y_{j+1} - y_j) - p_j(y_j - y_{j-1})}{h^2} - (py')'(a+jh).\end{aligned}$$
Zbývá vhodně vyjádřit $(py')'(a+jh)$. Je
$$(py')(x+h) = (py')(x) + h(py')'(x) + \frac{h^2}{2}(py')''(x) + O(h^3),$$
takže
$$(py')'(x) = \frac{(py')(x+h) - (py')(x)}{h} - \frac{h}{2}(py')''(x) + O(h^2)$$

a

$$(py')'(a+jh) = \frac{(py')(a+(j+1)h) - (py')(a+jh)}{h} - \frac{h}{2}(py')''(a+jh) + O(h^2).$$

Ještě potřebujeme vyjádřit $y'(a+jh)$, resp. $y'(a+(j+1)h)$. Je

$$y(x-h) = y(x) - hy'(x) + \frac{h^2}{2}y''(x) + O(h^3),$$

takže

$$y'(x) = \frac{y(x) - y(x-h)}{h} + \frac{h}{2}y''(x) + O(h^2),$$

a proto

$$\begin{aligned}
y'(a+jh) &= \frac{y(a+jh) - y(a+(j-1)h)}{h} + \frac{h}{2}y''(a+jh) + O(h^2),\\
y'(a+(j+1)h) &= \frac{y(a+(j+1)h) - y(a+jh)}{h} + \frac{h}{2}y''(a+(j+1)h) + O(h^2).
\end{aligned}$$

Můžeme psát

$$\begin{aligned}
(py')'(a+jh) =& \frac{1}{h}\left[p_{j+1}\left(\frac{y_{j+1}-y_j}{h} + \frac{h}{2}y''(a+(j+1)h) + O(h^2)\right) - \right.\\
&\left. -p_j\left(\frac{y_j - y_{j-1}}{h} + \frac{h}{2}y''(a+jh) + O(h^2)\right)\right] - \frac{h}{2}(py')''(a+jh) + O(h^2) =\\
=& p_{j+1}\frac{y_{j+1}-y_j}{h^2} - p_j\frac{y_j - y_{j-1}}{h^2} + \frac{p_{j+1}(y'')_{j+1} - p_j(y'')_j}{2} - \\
&- \frac{h}{2}(py')''(a+jh) + O(h).
\end{aligned}$$

Odtud s využitím Lagrangeovy věty o střední hodnotě plyne

$$\begin{aligned}
(\Psi_h)_j &= \frac{h}{2}(py')''(a+jh) - \frac{p_{j+1}(y'')_{j+1} - p_j(y'')_j}{2} + O(h) =\\
&= \frac{h}{2}(py')''(a+jh) - \frac{h}{2}(py'')'(\xi_j) + O(h),
\end{aligned}$$

kde $\xi_j \in (a+jh,\, a+(j+1)h)$. Konečně

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\|\Psi_h\|_{h,p}}{h}\right)^p &= \sum_{j=1}^{m-1} h\left|\frac{(\Psi_h)_j}{h}\right|^p = \sum_{j=1}^{m-1} h\,|(Ly)(a+jh) - (L_h(y))_j|^p =\\
&= \sum_{j=1}^{m-1} h\left|\frac{(py')''(a+jh) - (py'')'(\xi_j)}{2} + \frac{O(h)}{h}\right|^p. \quad \square
\end{aligned}$$

Nyní již umíme nahradit diferenciální rovnici (22) soustavou lineárních algebraických rovnic, v níž jsou neznámými hodnoty řešení naší okrajové úlohy v síťových bodech. Ještě je třeba nahradit okrajové podmínky (23).

Poznámka 1.11. Učiňme následující úmluvu: Číslo $(y_x)_j = (y_x)(a+jh)$, $j \in \{0, \dots, m-1\}$, budeme značit $y_{x,j}$. Podobně číslo $(y_{\bar{x}})_j = (y_{\bar{x}})(a+jh)$, $j \in \{1, \dots, m\}$, budeme značit $y_{\bar{x},j}$.

Výraz $y'(a)$ v (23a), resp. $y'(b)$ v (23b) nahradíme výrazem $y_{x,0}$, resp. $y_{\bar{x},m}$. Celkově pak okrajové podmínky (23) nahradíme vztahy

$$\alpha_1 p_0 u_{x,0} - \beta_1 u_0 = \gamma_1, \tag{24a}$$

$$\alpha_2 p_m u_{\bar{x},m} + \beta_2 u_m = \gamma_2. \tag{24b}$$

Označme $(ly)_{x=a}$, resp. $(ly)_{x=b}$ levou stranu rovnosti (23a), resp. (23b) a položme

$$ly := \begin{pmatrix} (ly)_{x=a} \\ (ly)_{x=b} \end{pmatrix}.$$

Podobně označme $(l_h u)_0$, resp. $(l_h u)_m$ levou stranu rovnosti (24a), resp. (24b) a položme

$$l_h y := \begin{pmatrix} (l_h u)_0 \\ (l_h u)_m \end{pmatrix}.$$

Poznámka 1.12. Na l se můžeme dívat jako na lineární zobrazení $l : \mathrm{Dom}(A) \to \mathbf{R}^2$. Chyba aproximace tohoto zobrazení zobrazením $l_h : \mathcal{H}_h \to \mathbf{R}^2$ je $O(h)$.

Jestliže dále označíme

$$\gamma := \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \end{pmatrix},$$

můžeme okrajovou úlohu (22), (23) vyjádřit ve tvaru

$$Ly = f, \tag{25a}$$
$$ly = \gamma, \tag{25b}$$

kde $L : y \mapsto -(py')' + qy$. Tuto úlohu nahradíme úlohou

$$L_h u = \mathcal{P}_h f, \tag{26a}$$
$$l_h u = \gamma, \tag{26b}$$

kde $L_h : u \mapsto -(pu_{\bar{x}})_x + qu$. Jestliže rozepíšeme (26a) po složkách, dostaneme

$$-\frac{p_{i+1}(u_{i+1} - u_i) - p_i(u_i - u_{i-1})}{h^2} + q_i u_i = f_i, \quad i \in \widehat{m-1}; \tag{27}$$

podobně ze vztahu (26b) dostaneme

$$\begin{aligned} \alpha_1 p_0 \frac{u_1 - u_0}{h} - \beta_1 u_0 &= \gamma_1, \\ \alpha_2 p_m \frac{u_m - u_{m-1}}{h} + \beta_2 u_m &= \gamma_2. \end{aligned}$$

Je tedy (26) soustava lineárních algebraických rovnic

$$\begin{array}{ccccccccc}
-\left(\beta_1 + \frac{\alpha_1 p_0}{h}\right) u_0 & + & \frac{\alpha_1 p_0}{h} u_1 & & & & & = & \gamma_1, \\
-\frac{p_1}{h^2} u_0 & + & \left(\frac{p_1+p_2}{h^2} + q_1\right) u_1 & - & \frac{p_2}{h^2} u_2 & & & = & f_1, \\
& \ddots & & \ddots & & \ddots & & & \vdots \\
& & -\frac{p_{m-1}}{h^2} u_{m-2} & + & \left(\frac{p_{m-1}+p_m}{h^2} + q_{m-1}\right) u_{m-1} & - & \frac{p_m}{h^2} u_m & = & f_{m-1}, \\
& & & & -\frac{\alpha_2 p_m}{h} u_{m-1} & + & \left(\beta_2 + \frac{\alpha_2 p_m}{h}\right) u_m & = & \gamma_2.
\end{array}$$

Označíme-li $\mathbf{A}_h$ matici soustavy (je zřejmě 3-diagonální), můžeme tuto soustavu zapsat ve tvaru

$$\mathbf{A}_h \vec{u} = \vec{\varphi}_h, \tag{28}$$

kde

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_m \end{pmatrix}, \quad \vec{\varphi}_h = \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_{m-1} \\ \gamma_2 \end{pmatrix}.$$

Poznámka 1.13. V případě Dirichletových okrajových podmínek (tj. $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$) je celá situace o něco jednodušší: Není třeba provádět žádnou náhradu okrajových podmínek, neboť hodnoty řešení v hraničních uzlech jsou podmínkami (23) přímo zadány (bez újmy na obecnosti předpokládejme, že $y(a) = \gamma_1$, $y(b) = \gamma_2$). Soustava (28) se pak nepatrně pozmění: První a poslední rovnice z ní „vypadnou" a druhá, resp. předposlední rovnice bude mít podobu

$$\left(\frac{p_1+p_2}{h^2} + q_1\right) u_1 - \frac{p_2}{h^2} u_2 = f_1 + \frac{p_1}{h^2}\gamma_1,$$

resp.

$$-\frac{p_{m-1}}{h^2} u_{m-2} + \left(\frac{p_{m-1}+p_m}{h^2} + q_{m-1}\right) u_{m-1} = f_{m-1} + \frac{p_m}{h^2}\gamma_2.$$

Zbylé rovnice zůstanou nezměněny.

1.3.2. *Konvergence a přesnost.*

Definice 1.8. Nechť (25), resp. (26) je okrajová, resp. diferenční (síťová) úloha. Říkáme, že řešení $u_h : \overline{\omega}_h \to \mathbf{R}$ úlohy (26) **konverguje** k řešení $y : \langle a, b\rangle \to \mathbf{R}$ úlohy (25), jestliže existuje taková konzistentní síťová norma $\| \ \|_h$, že

$$\lim_{h\to 0+} \|u_h - \mathcal{P}_h y\|_h = 0.$$

Říkáme, že **konvergence je řádu** α, jestliže $\|u_h - \mathcal{P}_h y\|_h = O(h^\alpha)$.

Poznámka 1.14. Úloha (26) je „parametrizovaná” parametrem h. Tento parametr ovšem nenabývá libovolných kladných hodnot, ale jen spočetně mnoha hodnot

$$b-a,\ \frac{b-a}{2},\ \ldots,\ \frac{b-a}{m},\ \ldots$$

Tuto skutečnost je třeba mít na paměti, neboť ji v dalším již nebudeme připomínat a budeme pro jednoduchost psát pouze $h > 0$ apod.

Definice 1.9. Systém úloh

$$\{(26) : h > 0\} \tag{29}$$

se nazývá **diferenční schéma**.

Definice 1.10. Diferenční schéma (29) se nazývá **korektní**, jestliže existují taková kladná čísla h_0 a M, že pro každé $h \in (0, h_0\rangle$ platí následující dvě podmínky:

(1) $(\exists \Phi_h \subset \mathbf{R}^{m+1})(\forall \vec{\varphi}_h \in \Phi_h)((28)$ má právě jedno řešení $\vec{u} \in \overline{\omega}_h)$,
(2) $(\forall \vec{\varphi}_h \in \Phi_h)(\forall \vec{\tilde{\varphi}}_h \in \Phi_h)(\|\vec{\tilde{u}}_h - \vec{u}_h\|_{1h} \le M\|\vec{\tilde{\varphi}}_h - \vec{\varphi}_h\|_{2h})$,

kde $\| \ \|_{1h}$ a $\| \ \|_{2h}$ jsou konzistentní normy. Druhá podmínka se nazývá **stabilita**.

Věta 1.5 (Laxova)**.** Diferenční schéma (29), které je korektní a aproximuje diferenciální operátor, je konvergentní.

Důkaz. Zúžením (25) na síť a následným odečtením od (26) dostaneme

$$L_h u - \mathcal{P}_h(Ly) = 0 \quad \text{na } \omega_h, \tag{30a}$$
$$l_h u - \mathcal{P}_h(ly) = 0 \quad \text{na } \gamma_h. \tag{30b}$$

Chyba aproximace diferenciálního operátoru L byla definována jako síťová funkce

$$\Psi_h = \mathcal{P}_h(Ly) - L_h(\mathcal{P}_h y).$$

Výraz $L_h(\mathcal{P}_h y)$ má ovšem smysl jen na ω_h. Síťovou funkci Ψ_h proto můžeme v hraničních uzlech sítě dodefinovat vztahem

$$\Psi_h = \mathcal{P}_h(ly) - l_h(\mathcal{P}_h y).$$

Nyní můžeme (30) přepsat jako

$$L_h u - L_h(\mathcal{P}_h y) = \Psi_h \quad \text{na } \omega_h,$$
$$l_h u - l_h(\mathcal{P}_h y) = \Psi_h \quad \text{na } \gamma_h$$

neboli

$$L_h(u - \mathcal{P}_h y) = \Psi_h \quad \text{na } \omega_h,$$
$$l_h(u - \mathcal{P}_h y) = \Psi_h \quad \text{na } \gamma_h.$$

Za předpokladu, že $\Psi_h \in \Phi_h$, existuje podle definice korektnosti $M > 0$ tak, že pro každé $h > 0$ platí

$$\|u - \mathcal{P}_h y\|_{1h} \le M\|\Psi_h\|_{2h}. \tag{31}$$

Výrok „diferenční schéma aproximuje diferenciální operátor” znamená existenci takové konzistentní síťové normy $\| \ \|_h$, že

$$\|\Psi_h\|_h \overset{h\to 0+}{\longrightarrow} 0,$$

takže stačí ve vztahu (31) provést limitu $h \to 0+$ a využít ekvivalence norem na síti. $\square$

1.3.3. *Technika apriorních odhadů.*

Definice 1.11. Buďte $u,\, v : \overline{\omega}_h \to \mathbf{R}$, $u = (u_0,\, \dots,\, u_m)$, $v = (v_0,\, \dots,\, v_m)$. Potom klademe

$$(u,\, v)_h := \sum_{j=1}^{m-1} h u_j v_j, \quad [u,\, v] := \sum_{j=0}^{m} h u_j v_j,$$

$$[u,\, v) := \sum_{j=0}^{m-1} h u_j v_j, \quad (u,\, v] := \sum_{j=1}^{m} h u_j v_j.$$

Dále definujeme

$$\|u\|_h := \sqrt{(u,\, u)_h}, \quad |[u]| := \sqrt{[u,\, u]},$$

$$|[u\| := \sqrt{[u,\, u)}, \quad \|u]| := \sqrt{(u,\, u]}.$$

Věta 1.6. Tři užitečné formule pro síťové funkce:

(1) Síťová formule per partes:

$$(u,\, v_x)_h = u_m v_m - u_0 v_1 - (u_{\bar{x}},\, v], \tag{32}$$
$$(u,\, v_{\bar{x}})_h = u_m v_{m-1} - u_0 v_0 - [u_x,\, v). \tag{33}$$

(2) První Greenova formule: Nechť $p(x) \geq p_0 > 0$ pro $x \in \overline{\omega}_h$. Potom

$$(v, (pu_{\bar{x}})_x)_h = -(pu_{\bar{x}}, v_{\bar{x}}] + (pvu_{\bar{x}})_m - p_1 (vu_x)_0. \tag{34}$$

(3) Druhá Greenova formule:

$$(v, (pu_{\bar{x}})_x)_h - (u, (pv_{\bar{x}})_x)_h = p_m (vu_{\bar{x}} - v_{\bar{x}} u)_m - p_1 (u_x v - v_x u)_0.$$

Důkaz. (1)

$$(u,\, v_x)_h = \sum_{j=1}^{m-1} h u_j (v_x)_j = \sum_{j=1}^{m-1} h u_j \frac{v_{j+1} - v_j}{h} = \sum_{j=1}^{m-1} u_j v_{j+1} - \sum_{j=1}^{m-1} u_j v_j =$$
$$= \sum_{j=2}^{m} u_{j-1} v_j - \sum_{j=1}^{m-1} u_j v_j = \sum_{j=1}^{m} (u_{j-1} - u_j) v_j - u_0 v_1 + u_m v_m =$$
$$= - \sum_{j=1}^{m} h \frac{u_j - u_{j-1}}{h} v_j - u_0 v_1 + u_m v_m = -(u_{\bar{x}} v] - u_0 v_1 + u_m v_m.$$

$$(u,\, v_{\bar{x}})_h = \sum_{j=1}^{m-1} h u_j (v_{\bar{x}})_j = \sum_{j=1}^{m-1} u_j (v_j - v_{j-1}) = \sum_{j=1}^{m-1} u_j v_j - \sum_{j=0}^{m-2} u_{j+1} v_j =$$
$$= \sum_{j=0}^{m-1} (u_j - u_{j+1}) v_j - u_0 v_0 + u_m v_{m-1} = -[u_x, v) - u_0 v_0 + u_m v_{m-1}.$$

(2) Užitím formule (32) pro $u = v$, $v = pu_{\bar{x}}$ dostaneme

$$(v,\, (pu_{\bar{x}})_x)_h = -(v_{\bar{x}},\, pu_{\bar{x}}] - v_0 p_1 (u_{\bar{x}})_1 + v_m p_m (u_{\bar{x}})_m,$$

ale

$$(u_{\bar{x}})_1 = \frac{u_1 - u_0}{h} = (u_x)_0.$$

(3) Oba členy na levé straně se upraví pomocí formule (34). ◻

1.3.4. *Sobolevovy nerovnosti (síťové analogie vět o vnoření).*

Lemma 1.1. Buď $u : \overline{\omega}_h \to \mathbf{R}$ taková síťová funkce, že $u_0 = u_m = 0$. Pak platí

$$\|u\|_{h,0} \le \frac{\sqrt{b-a}}{2} \|u_{\bar{x}}]|.$$

Důkaz. Pro libovolné $k \in \widehat{m-1}$ je

$$\sum_{j=1}^{k} h u_{\bar{x},j} = \sum_{j=1}^{k} h \frac{u_j - u_{j-1}}{h} = \sum_{j=1}^{k} u_j - \sum_{j=1}^{k} u_{j-1} = u_k - u_0 \tag{35}$$

a podobně

$$\sum_{j=k+1}^{m} h u_{\bar{x},j} = \sum_{j=k+1}^{m} h \frac{u_j - u_{j-1}}{h} = u_m - u_k. \tag{36}$$

Podle předpokladu je $u_0 = u_m = 0$, a proto se (35), (36) redukují na

$$u_k = \sum_{j=1}^{k} h u_{\bar{x},j}, \quad u_k = -\sum_{j=k+1}^{m} h u_{\bar{x},j}.$$

Pro libovolné λ platí $u_k^2 = (1-\lambda)u_k^2 + \lambda u_k^2$. Speciálně, položíme-li $\lambda = \frac{k}{m}$, máme s využitím Schwarzovy nerovnosti v $\mathbf{R}^k$, resp. v $\mathbf{R}^{m-k}$

$$\begin{aligned}
u_k^2 &= \left(1 - \frac{k}{m}\right) \left(\sum_{j=1}^{k} h u_{\bar{x},j}\right)^2 + \frac{k}{m} \left(\sum_{j=k+1}^{m} h u_{\bar{x},j}\right)^2 \le \\
&\le \left(1 - \frac{k}{m}\right) \underbrace{\left(\sum_{j=1}^{k} h\right)}_{kh} \left(\sum_{j=1}^{k} h \left|u_{\bar{x},j}\right|^2\right) + \frac{k}{m} \underbrace{\left(\sum_{j=k+1}^{m} h\right)}_{(m-k)h} \left(\sum_{j=k+1}^{m} h \left|u_{\bar{x},j}\right|^2\right) = \\
&= kh\left(1 - \frac{k}{m}\right) \sum_{j=1}^{k} h \left|u_{\bar{x},j}\right|^2 + kh \frac{m-k}{m} \sum_{j=k+1}^{m} h \left|u_{\bar{x},j}\right|^2 = \\
&= kh\left(1 - \frac{k}{m}\right) \sum_{j=1}^{m} h \left|u_{\bar{x},j}\right|^2 = (b-a) \frac{k}{m} \left(1 - \frac{k}{m}\right) \sum_{j=1}^{m} h \left|u_{\bar{x},j}\right|^2.
\end{aligned}$$

Funkce $f(x) = x(1-x)$ má na intervalu $\langle 0, 1 \rangle$ maximum v bodě $x = \frac{1}{2}$ a $f(\frac{1}{2}) = \frac{1}{4}$. Proto $\frac{k}{m}\left(1 - \frac{k}{m}\right) \le \frac{1}{4}$ a

$$u_k^2 \le \frac{b-a}{4} \sum_{j=1}^{m} h \left|(u_{\bar{x}})_j\right|^2 = \frac{b-a}{4} \|u_{\bar{x}}]|^2.$$

Dokázali jsme, že pro každé $k = 1, \ldots, m-1$ platí

$$|u_k| \le \frac{\sqrt{b-a}}{2} \|u_{\bar{x}}]|.$$

Protože $u_0 = u_m = 0$, je

$$\|u\|_{h,0} = \max_{k \in \widehat{m}_0} |u_k| \le \frac{\sqrt{b-a}}{2} \|u_{\bar{x}}]|. \quad \square$$

Lemma 1.2. Nechť $u : \overline{\omega}_h \to \mathbf{R}$, $u_0 = u_m = 0$. Pak platí

$$\|u\|_h \le \frac{b-a}{2} \|u_{\bar{x}}]|.$$

Důkaz. Je

$$\|u\|_h^2 = \sum_{j=1}^{m-1} h\,|u_j|^2 \le \|u\|_{h,0}^2 \sum_{j=1}^{m-1} h = \|u\|_{h,0}^2 (m-1)h \le$$
$$\le \|u\|_{h,0}^2 mh = \|u\|_{h,0}^2 (b-a).$$

Odtud a z předchozího lemmatu dostaneme

$$\|u\|_h \le \sqrt{b-a}\frac{\sqrt{b-a}}{2}\|u_{\bar{x}}]| = \frac{b-a}{2}\|u_{\bar{x}}]|. \quad \square$$

Poznámka 1.15. Tato poznámka má sloužit jako motivace důkazu následující lemmy. Často je užitečné najít bázi daného prostoru funkcí tvořenou vlastními vektory nějakého eliptického diferenciálního operátoru. Jako příklad zkonstruujeme bázi Sobolevova prostoru $W_0^{1,2}(a,\,b)$ tvořenou vlastními funkcemi diferenciálního operátoru $L : y \mapsto -y''$.

Uvažme okrajovou úlohu

$$-y'' - \lambda y = 0 \quad \text{na } (a,\,b),$$
$$y(a) = 0, \quad y(b) = 0.$$

Předpokládejme řešení ve tvaru

$$y(x) = \sin\alpha(x-\beta).$$

Dosazením do okrajových podmínek dostaneme

$$\sin\alpha(a-\beta) = 0, \quad \sin\alpha(b-\beta) = 0.$$

Volbou $\beta = a$ identicky splníme první rovnici a z druhé získáme podmínku

$$\sin\alpha(b-a) = 0,$$

tj.

$$\alpha(b-a) = k\pi, \quad k \in \mathbf{Z},$$

neboli

$$\alpha = \frac{k\pi}{b-a}, \quad k \in \mathbf{Z}.$$

Získali jsme tak systém funkcí

$$y(x) = \sin\frac{k\pi}{b-a}(x-a), \quad k \in \mathbf{Z}.$$

Po dosazení do diferenciální rovnice dostaneme

$$\left(\frac{k\pi}{b-a}\right)^2 y(x) - \lambda y(x) = 0, \quad k \in \mathbf{Z}.$$

Tato rovnice je evidentně splněna pro

$$\lambda = \left(\frac{k\pi}{b-a}\right)^2, \quad k \in \mathbf{N}.$$

Lemma 1.3. Nechť $u : \overline{\omega}_h \to \mathbf{R}$, $u_0 = u_m = 0$. Pak

$$\frac{h^2}{4}\|u_{\bar{x}}]|^2 \le \|u\|_h^2 \le \frac{(b-a)^2}{8}\|u_{\bar{x}}]|^2.$$

Důkaz. Řešme diskrétní úlohu na vlastní čísla:

$$-u_{\bar{x}x} - \lambda u = 0, \tag{37}$$
$$u_0 = u_m = 0. \tag{38}$$

Okrajové podmínky (38) definují $(m-1)$-rozměrný podprostor v $\mathcal{H}_h$. Tento podprostor můžeme ztotožnit s $\mathbf{R}^{m-1}$. Rovnici (37) můžeme přepsat do podoby

$$L_h u = \lambda u,$$

kde $L_h : u \mapsto -u_{\bar{x}x}$ je lineární operátor na $\mathbf{R}^{m-1}$. Rozepsáním (37) po složkách dostaneme

$$-\frac{1}{h^2}(u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}) - \lambda u_j = 0, \quad j = 1, \ldots, m-1. \tag{39}$$

Předpokládejme řešení ve tvaru $u_j = \sin(\alpha j h)$, $j = 0, \ldots, m$. První okrajová podmínka je splněna automaticky, ze druhé plyne

$$\sin(\alpha m h) = \sin(\alpha(b-a)) = 0,$$

a tedy $\alpha(b-a) = k\pi$, $k \in \mathbf{Z}$. Získané síťové funkce

$$u_j^{(k)} = \sin\frac{k\pi}{b-a} jh = \sin\frac{k\pi}{m} j, \quad j = 0, \ldots, m, \quad k \in \mathbf{Z},$$

dosadíme do diferenční rovnice (39). Dostaneme

$$-\frac{1}{h^2}\left[\sin\frac{k\pi}{m}(j+1) - 2\sin\frac{k\pi}{m}j + \sin\frac{k\pi}{m}(j-1)\right] - \lambda\sin\frac{k\pi}{m}j = 0.$$

Pomocí vzorců

$$\sin a - \sin b = 2\cos\frac{a+b}{2}\sin\frac{a-b}{2},$$
$$\cos a - \cos b = -2\sin\frac{a+b}{2}\sin\frac{a-b}{2}$$

upravíme

$$\begin{aligned}
\sin\frac{k\pi}{m}(j+1) - 2\sin\frac{k\pi}{m}j + \sin\frac{k\pi}{m}(j-1) &= \\
&= \left[\sin\frac{k\pi}{m}(j+1) - \sin\frac{k\pi}{m}j\right] - \left[\sin\frac{k\pi}{m}j - \sin\frac{k\pi}{m}(j-1)\right] = \\
&= 2\cos\frac{k\pi}{m}\left(j+\frac{1}{2}\right)\sin\frac{k\pi}{2m} - 2\cos\frac{k\pi}{m}\left(j-\frac{1}{2}\right)\sin\frac{k\pi}{2m} = \\
&= 2\sin\frac{k\pi}{2m}\left[\cos\frac{k\pi}{m}\left(j+\frac{1}{2}\right) - \cos\frac{k\pi}{m}\left(j-\frac{1}{2}\right)\right] = \\
&= 2\sin\frac{k\pi}{2m}\left[-2\sin\frac{k\pi}{m}j\sin\frac{k\pi}{2m}\right] = -4\left(\sin\frac{k\pi}{2m}\right)^2\sin\frac{k\pi}{m}j.
\end{aligned}$$

Můžeme tedy přepsat (39) jako

$$\frac{4}{h^2}\sin^2\frac{k\pi}{2m}\sin\frac{k\pi}{m}j - \lambda\sin\frac{k\pi}{m}j = 0, \quad j = 1, \ldots, m-1, \quad k \in \mathbf{Z}.$$

Z toho plyne, že

$$\lambda_k = \frac{4}{h^2}\sin^2\frac{k\pi}{2m}, \quad k \in \mathbf{N},$$

jsou vlastní čísla diferenčního operátoru $L_h : u \mapsto -u_{\bar{x}x}$. Pro $h \to 0$ se λ blíží vlastnímu číslu z předchozí úlohy. Odpovídajícími vlastními síťovými funkcemi jsou

$$u_j^{(k)} = \sin\frac{k\pi}{m}j, \quad j = 0, \ldots, m, \quad k \in \mathbf{Z}.$$

Z (39) je zřejmé, že matice operátoru L_h ve standardní bázi má tvar

$$^{\mathcal{E}}(L_h)^{\mathcal{E}} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & -1 & 2 & -1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{m-1,m-1}.$$

Operátor L_h je tedy symetrický, a má proto $m-1$ LN vlastních vektorů, tvořících bázi $\mathbf{R}^{m-1}$. Odtud vyplývá, že namísto $k \in \mathbf{N}$, nebo dokonce $k \in \mathbf{Z}$ má smysl zabývat se pouze $k = 1, \ldots, m-1$. Ukážeme, že vlastní síťové funkce $u^{(1)}, \ldots, u^{(m-1)}$ jsou ortogonální.

Buďte $k,\, l \in \widehat{m-1}$. Potom s využitím 1. Greenovy formule (34) a okrajových podmínek (38) dostáváme

$$(u^{(k)}_{\bar{x}x}, u^{(l)})_h - (u^{(k)}, u^{(l)}_{\bar{x}x})_h = -(u^{(k)}_{\bar{x}}, u^{(l)}_{\bar{x}}] + (u^{(k)}_{\bar{x}}, u^{(l)}_{\bar{x}}] = 0.$$

Zároveň ale víme, že platí

$$-u^{(k)}_{\bar{x}x} - \lambda_k u^{(k)} = 0, \quad -u^{(l)}_{\bar{x}x} - \lambda_l u^{(l)} = 0,$$

a tedy

$$(u^{(k)}_{\bar{x}x}, u^{(l)})_h - (u^{(k)}, u^{(l)}_{\bar{x}x})_h = -\lambda_k (u^{(k)}, u^{(l)}) + \lambda_l (u^{(k)}, u^{(l)}) = (\lambda_l - \lambda_k)(u^{(k)}, u^{(l)})_h.$$

Celkem jsme dokázali, že platí

$$(\lambda_l - \lambda_k)(u^{(k)}, u^{(l)})_h = 0,$$

takže vskutku $u^{(k)} \perp u^{(l)}$ pro $k \neq l$.

Z toho, co bylo dosud řečeno, vyplývá, že pro každou síťovou funkci $u : \overline{\omega}_h \to \mathbf{R}$ splňující okrajové podmínky (38) existují $\alpha_1,\, \ldots,\, \alpha_{m-1} \in \mathbf{R}$ tak, že

$$u_j = \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k u^{(k)}_j, \quad j = 1,\, \ldots,\, m-1.$$

Odtud

$$\|u\|_h^2 = (u, u)_h = \sum_{k,l=1}^{m-1} \alpha_k \alpha_l (u^{(k)}, u^{(l)})_h = \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k^2 \|u^{(k)}\|_h^2 \tag{40}$$

a podobně

$$\|u_{\bar{x}}]|^2 = (u_{\bar{x}},\, u_{\bar{x}}] = \sum_{k,l=1}^{m-1} \alpha_k \alpha_l (u^{(k)}_{\bar{x}}, u^{(l)}_{\bar{x}}] = \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k^2 \lambda^{(k)} \|u^{(k)}\|_h^2,$$

kde jsme ovšem navíc opět využili toho, že

$$(u^{(k)}_{\bar{x}}, u^{(l)}_{\bar{x}}] = -(u^{(k)}_{\bar{x}x}, u^{(l)})_h = \lambda^{(k)} (u^{(k)}, u^{(l)})_h.$$

Protože $\sin x$ je na $(0, \pi/2)$ rostoucí, platí $0 < \lambda_1 < \cdots < \lambda_{m-1}$, a proto s využitím (40) můžme psát

$$\|u_{\bar{x}}]|^2 \leq \lambda^{(m-1)} \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k^2 \|u^{(k)}\|_h^2 = \lambda^{(m-1)} \|u\|_h^2,$$

$$\|u_{\bar{x}}]|^2 \geq \lambda^{(1)} \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k^2 \|u^{(k)}\|_h^2 = \lambda^{(1)} \|u\|_h^2.$$

Odhadněme hodnoty $\lambda^{(1)}$ a $\lambda^{(m-1)}$. Zřejmě platí

$$\lambda^{(m-1)} = \frac{4}{h^2} \sin^2 \frac{\pi(m-1)}{2m} \leq \frac{4}{h^2}.$$

Pro $x \in \langle 0,\, \pi/4 \rangle$ je $\sin x \geq \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{4}{\pi} x$, a tedy

$$\lambda^{(1)} \geq \frac{4}{h^2} \frac{8}{\pi^2} \frac{\pi^2}{4m^2} = \frac{8}{m^2 h^2} = \frac{8}{(b-a)^2}.$$

Z těchto nerovností plyne tvrzení lemmy. □

1.3.5. *Metoda energetických nerovností (případ Dirichletových okrajových podmínek).* Uvažujme úlohu

$$\begin{aligned} -(py')' + qy &= f \text{ na } (a,b), \\ y(a) &= \gamma_1, \\ y(b) &= \gamma_2, \end{aligned} \tag{41}$$

a odpovídající diferenční schéma

$$\begin{aligned} -(pu_{\bar{x}})_x + qu &= f \text{ na } \omega_h, \\ u_0 &= \gamma_1, \\ u_m &= \gamma_2. \end{aligned} \tag{42}$$

Zúžením úlohy (41) na síť a následným odečtením od úlohy (42) dostaneme

$$-(pu_{\bar{x}})_x + qu - \mathcal{P}_h(-(py')' + qy) = 0, \tag{43a}$$

$$(u - \mathcal{P}_h y)_0 = (u - \mathcal{P}_h y)_m = 0. \tag{43b}$$

Položíme-li $L : y \mapsto -(py')' + qy$, $L_h : u \mapsto -(pu_{\bar{x}})_x + qu$, potom chyba aproximace bude dána

$$\Psi_h = \mathcal{P}_h(Ly) - L_h(\mathcal{P}_h y) = \mathcal{P}_h(-(py')' + qy) + (p(\mathcal{P}_h y)_{\bar{x}})_x - q\mathcal{P}_h y.$$

Můžeme tedy výraz na levé straně (43a) přepsat jako

$$-(pu_{\bar{x}})_x + qu - \Psi_h + (p(\mathcal{P}_h y)_{\bar{x}})_x - q\mathcal{P}_h y = -\left(pu_{\bar{x}} - p(\mathcal{P}_h y)_{\bar{x}}\right)_x + q(u - \mathcal{P}_h y) - \Psi_h.$$

Označíme $z = u - \mathcal{P}_h y$, získá úloha (43) podobu

$$-(pz_{\bar{x}})_x + qz = \Psi_h, \tag{44a}$$

$$z_0 = z_m = 0. \tag{44b}$$

Skalárním vynásobením (44a) řešením z v součinu $(\cdot,\, \cdot)_h$ dostaneme

$$(\Psi_h,\, z)_h = (-(pz_{\bar{x}})_x + qz,\, z)_h = -((pz_{\bar{x}})_x,\, z)_h + (qz,\, z)_h = (pz_{\bar{x}},\, z_{\bar{x}}] + (qz,\, z)_h,$$

kde jsme využili 1. Greenovu formuli a (44b). Ze základních předpokladů víme, že pro $i \in \widehat{m}_0$ platí $q_i \geq 0$ a $p_i \geq c_0 > 0$; odtud plyne, že

$$\begin{aligned} (qz, z)_h &= \sum_{i=1}^{m-1} hq_i z_i^2 \geq 0, \\ (pz_{\bar{x}}, z_{\bar{x}}] &= \sum_{i=1}^{m} hp_i \left|z_{\bar{x},i}\right|^2 \geq c_0 \sum_{i=1}^{m} h \left|z_{\bar{x},i}\right|^2 = c_0 \|z_{\bar{x}}]|^2, \end{aligned}$$

a tudíž

$$(\Psi_h,\, z)_h \geq c_0 \|z_{\bar{x}}]|^2. \tag{45}$$

Poznámka 1.16 (Youngova nerovnost). Buďte $a,\, b \in \mathbf{R}$, $\varepsilon > 0$. Pak

$$ab \leq \frac{\varepsilon}{2}\, a^2 + \frac{1}{2\varepsilon}\, b^2.$$

Důkaz. Za daných předpokladů je

$$0 \leq \left(\sqrt{\varepsilon} a - \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\, b\right)^2 = \varepsilon a^2 + \frac{1}{\varepsilon}\, b^2 - 2ab. \quad \square$$

Podle Schwarzovy a Youngovy nerovnosti je pro každé $\varepsilon > 0$

$$(\Psi_h,\, z)_h \leq \|\Psi_h\|_h \|z\|_h \leq \frac{\varepsilon}{2}\, \|\Psi_h\|_h^2 + \frac{1}{2\varepsilon}\, \|z\|_h^2.$$

Dosadíme-li do (45), máme s využitím lemmatu 1.2

$$c_0 \|z_{\bar{x}}]|^2 \leq \frac{\varepsilon}{2}\, \|\Psi_h\|_h^2 + \frac{1}{2\varepsilon}\, \|z\|_h^2 \leq \frac{\varepsilon}{2}\, \|\Psi_h\|_h^2 + \frac{(b-a)^2}{8\varepsilon}\, \|z_{\bar{x}}]|^2.$$

Chceme, aby platilo $\frac{(b-a)^2}{8\varepsilon} = \frac{c_0}{2}$, a proto volíme

$$\varepsilon = \frac{(b-a)^2}{4c_0}.$$

Pak dostaneme

$$\frac{c_0}{2}\|z_{\bar{x}}]|^2 \leq \frac{(b-a)^2}{8c_0}\|\Psi_h\|_h^2.$$

Po úpravě obdržíme tzv. *energetickou nerovnost*

$$\|z_{\bar{x}}]|^2 \leq \left(\frac{b-a}{2c_0}\right)^2 \|\Psi_h\|_h^2.$$

Poznámka 1.17. S využitím lemmy 1.1 plyne z předchozího vztahu odhad

$$\frac{4}{b-a}\|z\|_{h,0}^2 \leq \left(\frac{b-a}{2c_0}\right)^2 \|\Psi_h\|_h^2.$$

Odtud

$$\|z\|_{h,0} \leq \frac{(b-a)^{\frac{3}{2}}}{4c_0}\|\Psi_h\|_h.$$

Z této nerovnosti vyplývá, že diferenční schéma (42) je korektní (a stabilní).

Poznámka 1.18. Poslední nerovnost v předchozí poznámce jsme ovšem mohli získat též takto: Podle (45) je

$$c_0\|z_{\bar{x}}]|^2 \leq \|\Psi_h\|_h\|z\|_h.$$

Nyní využijeme lemmat 1.1 a 1.2. Dostaneme

$$c_0\frac{2}{\sqrt{b-a}}\frac{2}{b-a}\|z\|_{h,0}\|z\|_h \leq \|\Psi_h\|_h\|z\|_h,$$

odkud již plyne dotyčný odhad.

Poznámka 1.19. Ze vztahu (45) lze odvodit ještě jiný odhad. Podle Schwarzovy nerovnosti je $(\Psi_h, z)_h \leq \|\Psi_h\|_h\|z\|_h$ a podle lemmatu 1.2 zase $\|z_{\bar{x}}]|^2 \geq \frac{4}{(b-a)^2}\|z\|_h^2$. Odtud

$$\frac{4c_0}{(b-a)^2}\|z\|_h^2 \leq \|\Psi_h\|_h\|z\|_h.$$

Po vykrácení $\|z\|_h$ dostáváme **základní energetickou nerovnost**

$$\|z\|_h \leq \frac{(b-a)^2}{4c_0}\|\Psi_h\|_h.$$

Z této nerovnosti plyne stabilita diferenčního schématu (42): Uvažujme diferenční úlohy

$$\begin{aligned} -(pu_{\bar{x}})_x + qu &= f, \\ u_0 &= \gamma_1, \\ u_m &= \gamma_2, \end{aligned} \qquad\qquad \begin{aligned} -(pv_{\bar{x}})_x + qv &= g, \\ v_0 &= \gamma_1, \\ v_m &= \gamma_2. \end{aligned}$$

Položíme-li $z = u - v$, $\Psi_h = f - g$, dostaneme odečtením těchto dvou úloh úlohu (44), a proto platí

$$\|u - v\|_h \leq M\|f - g\|_h,$$

kde

$$M = \frac{(b-a)^2}{4c_0}$$

je *konstanta stability*, jež nezávisí na h.

Poznámka 1.20. Z věty 1.4 víme, že $\lim_{h\to 0+} \|\Psi_h\|_h = 0$. Odtud a z energetických nerovností plyne

$$\lim_{h\to 0+} \|u - \mathcal{P}_h y\|_h = 0,$$

tj. konvergence, neboť

$$\|u - \mathcal{P}_h y\|_h \leq \frac{(b-a)^2}{4c_0} \|\Psi_h\|_h.$$

Navíc víme, že řád konvergence je stejný jako řád aproximace (tj. $O(h)$), neboť konstanta v předchozím vztahu nezávisí na h.

1.3.6. *Metoda energetických nerovností (obecný případ).* Budeme se zabývat okrajovou úlohou

$$\begin{aligned} -y'' &= f \quad \text{ na } (a,\, b), \\ -y'(a) &= \beta_1 y(a) + \gamma_1, \\ y'(b) &= \beta_2 y(b) + \gamma_2, \end{aligned} \tag{46}$$

kde $\beta_1,\, \beta_2 < 0$. Tuto úlohu nahradíme diferenčním schématem

$$\begin{aligned} -u_{\bar{x}x} &= f \quad \text{ na } \omega_h, \\ -u_{x,0} &= \beta_1 u_0 + \gamma_1, \\ u_{\bar{x},m} &= \beta_2 u_m + \gamma_2, \end{aligned} \tag{47}$$

jež můžeme přepsat jako

$$\mathbf{A}_h \vec{u} = \vec{\varphi}_h,$$

kde

$$\mathbf{A}_h \vec{u} = \begin{pmatrix} \frac{2}{h}(-u_{x,0} - \beta_1 u_0) \\ -(u_{\bar{x}x})_1 \\ -(u_{\bar{x}x})_2 \\ \vdots \\ -(u_{\bar{x}x})_{m-1} \\ \frac{2}{h}(u_{\bar{x},m} - \beta_2 u_m) \end{pmatrix}, \quad \vec{\varphi}_h = \begin{pmatrix} \frac{2}{h}\gamma_1 \\ f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{m-1} \\ \frac{2}{h}\gamma_2 \end{pmatrix}.$$

Definice 1.12. Na prostoru $\mathcal{H}_h$ zavádíme skalární součin $[\,\cdot\,,\,\cdot\,]$ předpisem

$$[u, v] := \sum_{i=1}^{m-1} h u_i v_i + \frac{h}{2}(u_0 v_0 + u_m v_m).$$

Dále zavádíme normu $|[\,\cdot\,]|$ vztahem $|[u]| := \sqrt{[u, u]}$.

Poznámka 1.21. Lze se přesvědčit, že norma $|[\,\cdot\,]|$ je konzistentní s L^2-normou.

Lemma 1.4. Operátor $\mathbf{A}$ je v $[\,\cdot\,,\,\cdot\,]$ samosdružený.

Důkaz. Buďte $u, v : \overline{\omega}_h \to \mathbf{R}$. Potom

$$\begin{aligned} [u, \mathbf{A}v] &= (u, \mathbf{A}v)_h + \frac{h}{2}\left(u_0 \frac{2}{h}(-v_{x,0} - \beta_1 v_0) + u_m \frac{2}{h}(v_{\bar{x},m} - \beta_2 v_m)\right) = \\ &= (u,\, -v_{\bar{x}x})_h - u_0 v_{x,0} - \beta_1 u_0 v_0 + u_m v_{\bar{x},m} - \beta_2 u_m v_m = \\ &= (u_{\bar{x}},\, v_{\bar{x}}] - u_m v_{\bar{x},m} + u_0 v_{x,0} - u_0 v_{x,0} - \beta_1 u_0 v_0 + u_m v_{\bar{x},m} - \beta_2 u_m v_m = \\ &= (v_{\bar{x}},\, u_{\bar{x}}] - \beta_1 u_0 v_0 - \beta_2 u_m v_m = \\ &= v_m u_{\bar{x},m} - v_0 u_{\bar{x},1} - (v,\, u_{\bar{x}x})_h - \beta_1 u_0 v_0 - \beta_2 u_m v_m = \\ &= (v,\, -u_{\bar{x}x})_h + \frac{h}{2}\left(v_0 \frac{2}{h}(-u_{\bar{x},1} - \beta_1 u_0) + v_m \frac{2}{h}(u_{\bar{x},m} - \beta_2 u_m)\right) = \\ &= (\mathbf{A}u, v)_h + \frac{h}{2}\left(v_0 \frac{2}{h}(-u_{x,0} - \beta_1 u_0) + v_m \frac{2}{h}(u_{\bar{x},m} - \beta_2 u_m)\right) = [\mathbf{A}u, v]. \quad \square \end{aligned}$$

Lemma 1.5. Nechť $-\beta_1 \geq c_1 > 0$ a $-\beta_2 \geq c_1 > 0$. Pak $\mathbf{A}$ je pozitivně definitní a pro každou $u \in \mathcal{H}_h$ platí $[\mathbf{A}u, u] \geq c(a,\, b)|[u]|^2$.

Důkaz. Budeme postupovat jako v lemmatu 1.1. Víme, že

$$u_k = u_0 + \sum_{i=1}^{k} h u_{\bar{x},i}, \quad u_k = u_m - \sum_{i=k+1}^{m} h u_{\bar{x},i}.$$

Odtud s využitím Youngovy a Schwarzovy nerovnosti dostáváme pro každé $\varepsilon > 0$

$$u_k^2 = u_0^2 + 2u_0 \sum_{i=1}^{k} h u_{\bar{x},i} + \left(\sum_{i=1}^{k} h u_{\bar{x},i} \right)^2 \leq (1+\varepsilon) u_0^2 + \left(1 + \frac{1}{\varepsilon}\right) \left(\sum_{i=1}^{k} h u_{\bar{x},i} \right)^2 \leq$$
$$\leq (1+\varepsilon) u_0^2 + \left(1 + \frac{1}{\varepsilon}\right) \sum_{i=1}^{k} h \sum_{i=1}^{k} h \left| u_{\bar{x},i} \right|^2 = (1+\varepsilon) u_0^2 + \left(1 + \frac{1}{\varepsilon}\right) kh \sum_{i=1}^{k} h \left| u_{\bar{x},i} \right|^2 .$$

Obdobně

$$\begin{aligned} u_k^2 &= u_m^2 - 2u_m \sum_{i=k+1}^{m} h u_{\bar{x},i} + \left(\sum_{i=k+1}^{m} h u_{\bar{x},i} \right)^2 \leq \\ &\leq (1+\varepsilon) u_m^2 + \left(1 + \frac{1}{\varepsilon}\right) \left(\sum_{i=k+1}^{m} h u_{\bar{x},i} \right)^2 \leq \\ &\leq (1+\varepsilon) u_m^2 + \left(1 + \frac{1}{\varepsilon}\right) \sum_{i=k+1}^{m} h \sum_{i=k+1}^{m} h \left| u_{\bar{x},i} \right|^2 = \\ &= (1+\varepsilon) u_m^2 + \left(1 + \frac{1}{\varepsilon}\right) (m-k) h \sum_{i=k+1}^{m} h \left| u_{\bar{x},i} \right|^2 . \end{aligned}$$

Celkem

$$\begin{aligned} u_k^2 &\leq \frac{1+\varepsilon}{2}(u_0^2 + u_m^2) + \frac{1+\frac{1}{\varepsilon}}{2} \left(kh \sum_{i=1}^{k} h \left| u_{\bar{x},i} \right|^2 + (m-k) h \sum_{i=k+1}^{m} h \left| u_{\bar{x},i} \right|^2 \right) \leq \\ &\leq \frac{1+\varepsilon}{2}(u_0^2 + u_m^2) + \frac{1+\frac{1}{\varepsilon}}{2} (b-a) \sum_{i=1}^{m} h \left| u_{\bar{x},i} \right|^2 , \end{aligned}$$

neboť $kh \leq mh = b - a$, $(m-k)h \leq mh = b - a$. Dále platí

$$\begin{aligned} |[u]|^2 &= \|u\|_h^2 + \frac{h}{2}(u_0^2 + u_m^2) = \sum_{i=1}^{m-1} h u_i^2 + \frac{h}{2}(u_0^2 + u_m^2) \leq \\ &\leq \sum_{i=1}^{m-1} h \left(\frac{1+\varepsilon}{2}(u_0^2 + u_m^2) + \frac{1+\frac{1}{\varepsilon}}{2}(b-a) \|u_{\bar{x}}]|^2 \right) + \frac{h}{2}(u_0^2 + u_m^2) = \\ &= (m-1) h \frac{1+\varepsilon}{2}(u_0^2 + u_m^2) + \frac{(m-1)h}{2} \left(1 + \frac{1}{\varepsilon}\right) (b-a) \|u_{\bar{x}}]|^2 + \frac{h}{2}(u_0^2 + u_m^2) \leq \\ &\leq mh \frac{1+\varepsilon}{2}(u_0^2 + u_m^2) + \frac{(m-1)h}{2} \frac{\varepsilon+1}{\varepsilon} (b-a) \|u_{\bar{x}}]|^2 \leq \\ &\leq (b-a) \frac{1+\varepsilon}{2}(u_0^2 + u_m^2) + \frac{\varepsilon+1}{\varepsilon} \frac{(b-a)^2}{2} \|u_{\bar{x}}]|^2 \end{aligned}$$

neboli

$$\|u_{\bar{x}}]|^2 + \frac{\varepsilon}{b-a}(u_0^2 + u_m^2) \geq \frac{\varepsilon}{\varepsilon+1} \frac{2}{(b-a)^2} |[u]|^2. \tag{48}$$

Nyní již bude důkaz hračkou. Je

$$\begin{aligned} [\mathbf{A}u, u] &= (-u_{\bar{x}x}, u)_h + \frac{h}{2}(-u_{x,0} - \beta_1 u_0) \frac{2}{h} u_0 + \frac{h}{2}(u_{\bar{x},m} - \beta_2 u_m) \frac{2}{h} u_m = \\ &= \|u_{\bar{x}}]|^2 + u_0 u_{x,0} - u_m u_{\bar{x},m} - u_0 u_{x,0} - \beta_1 u_0^2 + u_m u_{\bar{x},m} - \beta_2 u_m^2 = \\ &= \|u_{\bar{x}}]|^2 - \beta_1 u_0^2 - \beta_2 u_m^2 \geq \|u_{\bar{x}}]|^2 + c_1 (u_0^2 + u_m^2). \end{aligned} \tag{49}$$

Zvolíme-li $\varepsilon = c_1(b-a)$ v (48), dostaneme

$$[\mathbf{A}u, u] \geq \frac{c_1}{c_1(b-a)+1}\frac{2}{b-a}|[u]|^2. \quad \square$$

Tvrzení 1.1. Diferenční schéma (47) je stabilní a jeho řešení konverguje k řešení úlohy (46) s řádem $\sqrt{h}$ v normě $|[\cdot]|$ a s řádem h v normě $\|\cdot\|_{h,0}$.

Důkaz. Budeme postupovat podobně jako v úvodu odstavce 1.3.5. Úlohu (46) zúžíme na síť a odečteme ji od úlohy (47). Tak získáme soustavu rovnic

$$-u_{\bar{x}x} - \mathcal{P}_h(-y'') = 0, \tag{50a}$$
$$-u_{x,0} - (\mathcal{P}_h(-y'))_0 = \beta_1(u - \mathcal{P}_h y)_0, \tag{50b}$$
$$u_{\bar{x},m} - (\mathcal{P}_h(y'))_m = \beta_2(u - \mathcal{P}_h y)_m. \tag{50c}$$

Položme $L : y \mapsto -y''$, $L_h : u \mapsto -u_{\bar{x}x}$. Chyba aproximace je dána

$$\Psi_h = \mathcal{P}_h(Ly) - L_h(\mathcal{P}_h y) = \mathcal{P}_h(-y'') + (\mathcal{P}_h y)_{\bar{x}x}$$

a je řádu $O(h^2)$. Rovnici (50a) tudíž můžeme přepsat jako

$$-u_{\bar{x}x} + (\mathcal{P}_h y)_{\bar{x}x} = \Psi_h$$

neboli

$$-(u - \mathcal{P}_h y)_{\bar{x}x} = \Psi_h.$$

Dále položme $l : y \mapsto (-y', y')$, $l_h : u \mapsto (-u_{x,0}, u_{\bar{x},m})$. Chyby aproximace jsou dány

$$\Psi_{h,0} = (\mathcal{P}_h(ly) - l_h(\mathcal{P}_h y))_0 = (\mathcal{P}_h(-y')_0 + (\mathcal{P}_h y)_{x,0},$$
$$\Psi_{h,m} = (\mathcal{P}_h(ly) - l_h(\mathcal{P}_h y))_m = (\mathcal{P}_h(y'))_m - (\mathcal{P}_h y)_{\bar{x},m},$$

a jsou řádu $O(h)$. Nyní můžeme (50b), (50c) přepsat jako

$$-u_{x,0} + (\mathcal{P}_h y)_{x,0} = \beta_1(u - \mathcal{P}_h y)_0 + \Psi_{h,0},$$
$$u_{\bar{x},m} - (\mathcal{P}_h y)_{\bar{x},m} = \beta_2(u - \mathcal{P}_h y)_m + \Psi_{h,m}.$$

Položíme-li $z = u - \mathcal{P}_h y$, získáme soustavu rovnic

$$-z_{\bar{x}x} = \Psi_h,$$
$$-z_{x,0} = \beta_1 z_0 + \Psi_{h,0},$$
$$z_{\bar{x},m} = \beta_2 z_m + \Psi_{h,m}.$$

To je ovšem diferenční schéma (47), jež můžeme maticově zapsat ve tvaru

$$\mathbf{A}z = \begin{pmatrix} \frac{2}{h}\Psi_{h,0} \\ (\Psi_{h,i})_{i=1}^{m-1} \\ \frac{2}{h}\Psi_{h,m} \end{pmatrix},$$

Podle předchozího lemmatu existuje $c > 0$ tak, že

$$|[z]|^2 \leq \frac{1}{c}[\mathbf{A}z, z] \leq \frac{1}{c}|[\mathbf{A}z]||[z]|, \quad \forall z \in \mathcal{H}_h.$$

Odtud

$$|[u - \mathcal{P}_h y]| = |[z]| \leq \frac{1}{c}|[\mathbf{A}z]| =$$
$$= \frac{1}{c}\left(\sum_{i=1}^{m-1} h(\Psi_{h,i})^2 + \frac{h}{2}\left(\frac{4}{h^2}\Psi_{h,0}^2 + \frac{4}{h^2}\Psi_{h,m}^2\right)\right)^{\frac{1}{2}} = O(h^{1/2}).$$

Podle definice je $\|u\|_{h,0} = \max_{i \in \widehat{m}_0} |u_i|$. Podle důkazu lemmatu 1.5 je

$$u_k^2 \leq \frac{1+\varepsilon}{2}(u_0^2 + u_m^2) + \frac{1+\frac{1}{\varepsilon}}{2}(b-a)\|u_{\bar{x}}]|^2,$$

a proto

$$\begin{aligned}\|z\|_{h,0}^2 &\le \frac{1+\varepsilon}{2}(z_0^2+z_m^2) + \frac{1+\varepsilon}{2\varepsilon}(b-a)\|z_{\bar{x}}]|^2 = \\ &= \frac{1+\varepsilon}{2\varepsilon}(b-a)\left[\frac{\varepsilon}{b-a}(z_0^2+z_m^2) + \|z_{\bar{x}}]|^2\right].\end{aligned}$$

Zvolíme-li $\varepsilon = c_1(b-a)$, dostaneme s využitím (49)

$$\begin{aligned}\|z\|_{h,0}^2 &\le \frac{1+c_1(b-a)}{2c_1}\left[c_1(z_0^2+z_m^2) + \|z_{\bar{x}}]|^2\right] \le \frac{1+c_1(b-a)}{2c_1}[\mathbf{A}z,\, z] = \\ &= \frac{1+c_1(b-a)}{2c_1}\left[\sum_{i=1}^{m-1} h\Psi_{h,i}z_i + \frac{h}{2}\left(\frac{2}{h}\Psi_{h,0}z_0 + \frac{2}{h}\Psi_{h,m}z_m\right)\right] \le \\ &\le \frac{1+c_1(b-a)}{2c_1}\left[\sum_{i=1}^{m-1} h\,|\Psi_{h,i}| + |\Psi_{h,0}| + |\Psi_{h,m}|\right]\|z\|_{h,0}.\end{aligned}$$

Odtud

$$\|u-\mathcal{P}y\|_{h,0} = \|z\|_{h,0} \le \frac{1+c_1(b-a)}{2c_1}\left[\sum_{i=1}^{m-1} h\,|\Psi_{h,i}| + |\Psi_{h,0}| + |\Psi_{h,m}|\right] = O(h). \quad \square$$

Poznámka 1.22. Výsledkem realizace metody sítí pro jednorozměrné okrajové úlohy je soustava $\mathbf{A}\vec{u} = \vec{\varphi}$ s 3-diagonální maticí. K řešení takových soustav používáme např. metodu faktorizace: Uvažme soustavu rovnic

$$\begin{aligned} u_0 &= \kappa_1 u_1 + \mu_1, \\ A_i u_{i-1} - C_i u_i + B_i u_{i+1} &= -F_i, \qquad i \in \widehat{m-1}, \\ u_m &= \kappa_2 u_{m-1} + \mu_2. \end{aligned}$$

Řešení hledejme rekurentně jako lineární kombinace

$$u_i = \alpha_{i+1}u_{i+1} + \beta_{i+1}, \quad i = m-1,\, \dots,\, 0. \tag{51}$$

Po dosazení do soustavy dostaneme

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \kappa_1, & \beta_1 &= \mu_1, & \\ \alpha_{i+1} &= \frac{B_i}{C_i - \alpha_i A_i}, & \beta_{i+1} &= \frac{\beta_i A_i + F_i}{C_i - \alpha_i A_i}, & i \in \widehat{m-1}. \end{aligned}$$

Po vyčíslení těchto koeficientů můžeme vypočítat

$$u_m = \frac{\mu_2 + \kappa_2\beta_m}{1-\alpha_m\kappa_2}$$

a další složky řešení počítáme podle (51).

2. Numerické řešení okrajových úloh pro PDE eliptického typu

Buď $\Omega \subset \mathbf{R}^n$ omezená oblast, jejíž hranicí je nadplocha Γ po částech třídy $\mathcal{C}^1$. Zabývejme se lineární parciální diferenciální rovnicí 2. řádu

$$-\operatorname{div}(\mathbf{A}(x)\nabla y) + q(x)y = f(x) \quad \text{v } \Omega \tag{52}$$

společně s okrajovou podmínkou

$$\alpha(x)\frac{\partial y}{\partial \vec{n}} + \beta(x)y = \gamma(x) \quad \text{na}\Gamma. \tag{53}$$

Symbol $\frac{\partial y}{\partial \vec{n}}$ značí derivaci ve směru tzv. *konormály* $\vec{n} = \mathbf{A}^\mathsf{T}\vec{\nu}$, kde $\mathbf{A}^\mathsf{T}$ značí transponovanou matici $\mathbf{A}$ a $\vec{\nu}$ je směrový vektor vnější normály k nadploše Γ.

Předpokládáme, že platí $q \geq 0$ a že existuje $p_0 > 0$ tak, že

$$\left(\mathbf{A}\vec{\xi},\, \vec{\xi}\right) \geq p_0\|\vec{\xi}\|^2 \quad \text{na}\Omega, \quad \forall \vec{\xi} \in \mathbf{R}^n.$$

Poznámka 2.1. Jsou-li α, $\beta \geq 0$ a navíc $\alpha + \beta > 0$ a jsou-li funkce $\mathbf{A}$, q, f, α, β, γ dost hladké, je úloha jednoznačně řešitelná.

2.1. Metoda sítí.

Omezíme se na obdélníkovou oblast v $\mathbf{R}^2$, tj. bez újmy na obecnosti oblast tvaru $\Omega = (0,\, L_1) \times (0,\, L_2)$. Buďte m_1, $m_2 \in \mathbf{N}$ a položme

$$h_1 = \frac{L_1}{m_1}, \quad h_2 = \frac{L_2}{m_2}.$$

Na $\overline{\Omega}$ položíme síť

$$\overline{\omega}_h = \left\{[ih_j,\, jh_2] \,|\, i = 0,\, \ldots,\, m_1;\, j = 0,\, \ldots,\, m_2\right\}.$$

Množina vnitřních bodů sítě je

$$\omega_h = \left\{[ih_j,\, jh_2] \,|\, i = 1,\, \ldots,\, m_1 - 1;\, j = 1,\, \ldots,\, m_2 - 1\right\}$$

a množina hraničních uzlů

$$\gamma_h = \overline{\omega}_h - \omega_h.$$

Zabývejme se nyní úlohou

$$-\frac{\partial}{\partial x_1}\left(p(x)\frac{\partial y}{\partial x_1}\right) - \frac{\partial}{\partial x_2}\left(p(x)\frac{\partial y}{\partial x_2}\right) + q(x)y = f(x) \quad \text{na } \Omega, \tag{54a}$$

$$y = \gamma_0 \quad \text{na } \Gamma, \tag{54b}$$

kde $\gamma_0 \in \mathbf{R}$.

Poznámka 2.2. Hodnoty funkcí v síťových uzlech značíme $y_{ij} = y(ih_1,\, jh_2)$, $i \in \widehat{m_1}_0$, $j \in \widehat{m_2}_0$. Parciální derivace funkcí aproximujeme pomocí diferencí

$$\left(\frac{\partial y}{\partial x_1}\right)_{ij} \approx y_{\bar{x}_1} = \frac{y_{ij} - y_{i-1j}}{h_1}, \quad \left(\frac{\partial y}{\partial x_2}\right)_{ij} \approx y_{\bar{x}_2} = \frac{y_{ij} - y_{ij-1}}{h_2}.$$

Přesnost je v obou případech řádu $O(h_1 + h_2)$.

Úlohu (54) nahradíme diferenčním schématem

$$-(pu_{\bar{x}_1})_{x_1} - (pu_{\bar{x}_2})_{x_2} + qu = f \quad \text{na } \omega_h, \tag{55a}$$

$$u = \gamma_0 \quad \text{na } \gamma_h. \tag{55b}$$

Poznámka 2.3 (5bodové schéma). V celé této poznámce bude index i, resp. j probíhat množinu $\widehat{m_1 - 1}$, resp. $\widehat{m_2 - 1}$. Podle předchozí poznámky můžeme rozepsat rovnici (55a) jako

$$-\frac{1}{h_1}\left(p_{i+1j}\frac{u_{i+1j} - u_{ij}}{h_1} - p_{ij}\frac{u_{ij} - u_{i-1j}}{h_1}\right) - \\ -\frac{1}{h_2}\left(p_{ij+1}\frac{u_{ij+1} - u_{ij}}{h_2} - p_{ij}\frac{u_{ij} - u_{ij-1}}{h_2}\right) + q_{ij}u_{ij} = f_{ij}$$

neboli

$$A_{ij}u_{i-1j} + B_{ij}u_{ij-1} + C_{ij}u_{i+1j} + D_{ij}u_{ij+1} + E_{ij}u_{ij} = F_{ij},$$

kde

$$A_{ij} = -\frac{p_{ij}}{h_1^2}, \quad B_{ij} = -\frac{p_{ij}}{h_2^2}, \quad C_{ij} = -\frac{p_{i+1j}}{h_1^2}, \quad D_{ij} = -\frac{p_{ij+1}}{h_2^2},$$
$$E_{ij} = \frac{p_{i+1j}}{h_1^2} + \frac{p_{ij}}{h_1^2} + \frac{p_{ij}}{h_2^2} + \frac{p_{ij+1}}{h_2^2} + q_{ij}, \quad F_{ij} = f_{ij}.$$

Tuto soustavu lze řešit např. zobecněnou faktorizací.

2.2. **Konvergence, odhad chyby.** Restrikci funkce $y : \overline{\Omega} \to \mathbf{R}$ na síť ω_h budeme opět značit $\mathcal{P}_h y$. Dále zavádíme chybu aproximace diferenciálního operátoru L diferenčním operátorem L_h jako síťovou funkci $\Psi_h : \overline{\omega}_h \to \mathbf{R}$, $\Psi_h = \mathcal{P}_h(Ly) - L_h(\mathcal{P}_h y)$.

Definice 2.1. Buďte u, $v : \overline{\omega}_h \to \mathbf{R}$. Potom definujeme skalární součiny

$$(u, v)_h = \sum_{i=1}^{m_1-1} \sum_{j=1}^{m_2-1} h_1 h_2 u_{ij} v_{ij},$$
$$(u, v\rfloor = \sum_{i=1}^{m_1} \sum_{j=1}^{m_2-1} h_1 h_2 u_{ij} v_{ij},$$
$$(u, v\rceil = \sum_{i=1}^{m_1-1} \sum_{j=1}^{m_2} h_1 h_2 u_{ij} v_{ij}.$$

Definice 2.2. Buď $u : \overline{\omega}_h \to \mathbf{R}$. Potom definujeme normu

$$\|u\|_h = \sqrt{(u, u)_h}.$$

Definice 2.3. Buďte U, $V : \overline{\omega}_h \to \mathbf{R}^2$, $U = [U^1, U^2]$, $V = [V^1, V^2]$. Potom klademe

$$(U, V] = (U^1, V^1\rfloor + (U^2, V^2\rceil.$$

Definice 2.4. Buď $U : \overline{\omega}_h \to \mathbf{R}^2$, $U = [U^1, U^2]$. Potom definujeme normu

$$\|U]| = \sqrt{(U, U]}.$$

Definice 2.5. Buď $u : \overline{\omega}_h \to \mathbf{R}$. Potom definujeme síťový a zpětný gradient

$$\nabla_h u = [u_{x_1}, u_{x_2}], \quad \overline{\nabla}_h u = [u_{\bar{x}_1}, u_{\bar{x}_2}],$$

a síťový laplacián

$$\Delta_h u = u_{\bar{x}_1 x_1} + u_{\bar{x}_2 x_2}.$$

Definice 2.6. Buď $U : \overline{\omega}_h \to \mathbf{R}^2$, $U = [U^1, U^2]$. Potom definujeme síťovou divergenci

$$\operatorname{div}_h U = (U^1)_{x_1} + (U^2)_{x_2}.$$

Tvrzení 2.1 (Greenova formule)**.** Buďte u, $v : \overline{\omega}_h \to \mathbf{R}$ a nechť $u = v = 0$ na γ_h. Pak platí

$$\left(\operatorname{div}_h(p\overline{\nabla}_h u),\, v\right)_h = -\left(p\overline{\nabla}_h u,\, \overline{\nabla}_h v\right].$$

Důkaz. K dispozici máme jednorozměrnou Greenovu formuli: Jsou-li u, v funkce definované na jednorozměrné síti a splňující $u_0 = u_m = v_0 = v_m = 0$, pak

$$(v, (pu_{\bar{x}})_x)_h = -(pu_{\bar{x}}, v_{\bar{x}}].$$

Tento vztah můžeme použít pro jednorozměrná zúžení síťových funkcí u, v ve směru x_1. Dostaneme

$$\left(v_{\cdot j}, (pu_{\bar{x}_1})_{x_1 \cdot j}\right)_h = -((pu_{\bar{x}_1})_{\cdot j},\, v_{\bar{x}_1 \cdot j}], \quad j \in \widehat{m_2 - 1},$$

neboli

$$\sum_{i=1}^{m_1-1} h_1 v_{ij} (pu_{\bar{x}_1})_{x_1 ij} = -\sum_{i=1}^{m_1} h_1 p_{ij} u_{\bar{x}_1 ij} v_{\bar{x}_1 ij}, \quad j \in \widehat{m_2 - 1}.$$

Vynásobením h_2 a vysčítáním přes j dostáváme

$$(v, (pu_{\bar{x}_1})_{x_1})_h = -(v_{\bar{x}_1}, pu_{\bar{x}_1}\rfloor.$$

Obdobně bychom odvodili vztah

$$(v, (pu_{\bar{x}_2})_{x_2})_h = -(v_{\bar{x}_2}, pu_{\bar{x}_2}\rceil.$$

Sečtením posledních dvou rovností pak dostaneme

$$\begin{aligned}\left(\operatorname{div}_h(p\overline{\nabla}_h u), v\right)_h &= ((pu_{\bar{x}_1})_{x_1} + (pu_{\bar{x}_2})_{x_2}, v)_h = \\ &= -(v_{\bar{x}_1}, pu_{\bar{x}_1}\rfloor - (v_{\bar{x}_2}, pu_{\bar{x}_2}\rceil = -\left(\overline{\nabla}_h v, p\overline{\nabla}_h u\right]. \quad \square\end{aligned}$$

Lemma 2.1 (Sobolev)**.** Nechť $u : \overline{\omega}_h \to \mathbf{R}$, $u = 0$ na γ_h. Pak

$$\|u\|_h^2 \leq \frac{1}{8}\max\{L_1^2, L_2^2\}\|\overline{\nabla}_h u]|^2.$$

Důkaz. Podle lemmatu 1.2, aplikovaného na jednorozměrná zúžení funkce u ve směru osy x_1, resp. x_2 platí

$$\|u_{\cdot j}\|_h \leq \frac{L_1}{2}\|(u_{\cdot j})_{\bar{x}_1}]|, \quad \forall j \in \widehat{m_2 - 1},$$

resp.

$$\|u_{i\cdot}\|_h \leq \frac{L_2}{2}\|(v_{i\cdot})_{\bar{x}_2}]|, \quad \forall i \in \widehat{m_1 - 1}.$$

Po umocnění na druhou můžeme tyto odhady přepsat jako

$$\sum_{i=1}^{m_1-1} h_1 \left|u_{ij}\right|^2 \leq \frac{L_1^2}{4}\sum_{i=1}^{m_1} h_1 \left|u_{\bar{x}_1 ij}\right|^2, \qquad \Bigg| \cdot h_2, \sum_{j=1}^{m_2-1} \tag{56}$$

$$\sum_{j=1}^{m_2-1} h_1 \left|u_{ij}\right|^2 \leq \frac{L_2^2}{4}\sum_{i=1}^{m_2} h_2 \left|u_{\bar{x}_2 ij}\right|^2. \qquad \Bigg| \cdot h_1, \sum_{i=1}^{m_1-1} \tag{57}$$

Sečtením (56) a (57) dostaneme

$$\begin{aligned}\|u\|_h^2 = &\sum_{i=1}^{m_1-1}\sum_{j=1}^{m_2-1} h_1 h_2 \left|u_{ij}\right|^2 \leq \\ &\leq \frac{L_1^2}{8}\sum_{i=1}^{m_1}\sum_{j=1}^{m_2-1} h_1 h_2 \left|u_{\bar{x}_1 ij}\right|^2 + \frac{L_2^2}{8}\sum_{i=1}^{m_1-1}\sum_{j=1}^{m_2} h_1 h_2 \left|u_{\bar{x}_2 ij}\right|^2 \leq \\ &\leq \frac{1}{8}\max\left\{L_1^2, L_2^2\right\}\left(\sum_{i=1}^{m_1}\sum_{j=1}^{m_2-1} h_1 h_2 \left|u_{\bar{x}_1 ij}\right|^2 + \sum_{i=1}^{m_1-1}\sum_{j=1}^{m_2} h_1 h_2 \left|u_{\bar{x}_2 ij}\right|^2\right) = \\ &= \frac{1}{8}\max\left\{L_1^2, L_2^2\right\}\|\overline{\nabla}_h u]|^2. \quad \square\end{aligned}$$

2.2.1. *Metoda energetických nerovností.* Úlohu (54) zúžíme na síť a odečteme ji od (55). Položíme-li

$$L : y \mapsto -\frac{\partial}{\partial x_1}\left(p(x)\frac{\partial y}{\partial x_1}\right) - \frac{\partial}{\partial x_2}\left(p(x)\frac{\partial y}{\partial x_2}\right) + q(x)y,$$

$L_h : u \mapsto -(pu_{\bar{x}_1})_{x_1} - (pu_{\bar{x}_2})_{x_2} + qu$, dostaneme

$$L_h u - \mathcal{P}_h(Ly) = 0 \quad \text{na } \omega_h, \tag{58a}$$

$$u - \mathcal{P}_h y = 0 \quad \text{na } \gamma_h. \tag{58b}$$

Chyba aproximace $\Psi_h = \mathcal{P}_h(Ly) - L_h(\mathcal{P}_h y)$ je řádu $O(h_1 + h_2)$ a s její pomocí můžeme (58a) přepsat jako

$$L_h u - L_h(\mathcal{P}_h y) = \Psi_h.$$

Položíme-li $z = u - \mathcal{P}_h y$, můžeme tudíž (58) psát ve tvaru

$$L_h z = \Psi_h \quad \text{na } \omega_h, \tag{59}$$

$$z = 0 \quad \text{na } \gamma_h. \tag{60}$$

První z obou vztahů skalárně vynásobíme z. S využitím Greenovy formule pak dostaneme

$$\begin{aligned}(\Psi_h,\, z)_h &= (L_h z,\, z)_h = \big(-(p z_{\bar{x}_1})_{x_1} - (p z_{\bar{x}_2})_{x_2} + (qz,\, z\big)_h = \\ &= -\big(\mathrm{div}_h(p\overline{\nabla}_h z),\, z\big)_h + (qz,\, z)_h = \big(p\overline{\nabla}_h z,\, \overline{\nabla}_h z\big] + (qz,\, z)_h = \\ &= (p z_{\bar{x}_1},\, z_{\bar{x}_1}\rfloor + (p z_{\bar{x}_2},\, z_{\bar{x}_2}\rceil + (qz,\, z)_h.\end{aligned}$$

Podle základních předpokladů je $q \geq 0$, a proto $(qz,\, z)_h \geq 0$. Dále je $p \geq p_0 > 0$, takže

$$\big(p\overline{\nabla}_h z,\, \overline{\nabla}_h z\big] \geq p_0 \|\overline{\nabla}_h z]|^2.$$

Celkově jsme dokázali, že

$$(\Psi_h,\, z)_h \geq p_0 \|\overline{\nabla}_h z]|^2.$$

Podle lemmatu 2.1 a Schwarzovy nerovnosti je

$$\|z\|_h^2 \leq c\|\overline{\nabla} z]|^2 \leq \frac{c}{p_0}(\Psi_h,\, z)_h \leq \frac{c}{p_0}\|\Psi_h\|_h \|z\|_h$$

a odtud

$$\|z\|_h \leq \frac{c}{p_0}\|\Psi_h\|_h.$$

Diferenční schéma (55) je tedy korektní (mj. také stabilní) a $\|z\|_h$ se chová stejně jako $\|\Psi_h\|_h$, tj. jako $O(h_1 + h_2)$.

Poznámka 2.4. V případě, že $p \equiv \text{konst.}$, je dokonce $\Psi_h = O(h_1^2 + h_2^2)$.

3. Numerické řešení okrajových úloh pro PDE parabolického typu

Buďte $\Omega \subset \mathbf{R}^n$ omezená oblast, jejíž hranicí je nadplocha Γ po částech třídy $\mathcal{C}^1$, L je eliptický parciální diferenciální operátor na Ω, $T > 0$. Zabývejme se smíšenou úlohou pro lineární parabolickou parciální diferenciální rovnici

$$\frac{\partial y}{\partial t} - Ly = f \quad \text{na } (0,\, T) \times \Omega$$

společně s okrajovou podmínkou

$$\alpha(x)\frac{\partial y}{\partial \vec{n}} + \beta(x)y = \gamma(x) \quad \text{na } (0,\, T) \times \Gamma$$

a počáteční podmínkou

$$y(0,\, x) = y_0(x) \quad \text{na } \Omega.$$

3.1. **Metoda sítí.** Omezíme se na následující jednorozměrný případ:

$$\frac{\partial y}{\partial t} - D\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = f(t,\, x) \quad \text{na } (0,\, T) \times (a,\, b), \quad D > 0 \tag{61a}$$

$$y(t,\, a) = \gamma_1, \quad y(t,\, b) = \gamma_2 \quad \text{na } (0,\, T), \tag{61b}$$

$$y(0,\, x) = y_0(x) \quad \text{na } (a,\, b). \tag{61c}$$

Buď $N_T \in \mathbf{N}$ a označme $\tau = \frac{T}{N_T}$ časový krok. Na interval $(a,\, b)$ položíme prostorovou síť $\overline{\omega}_h$. Pro $k \in \{0,\, \dots,\, N_T\}$, $j \in \{0,\, \dots,\, m\}$ klademe

$$y_j^k := y(k\tau,\, jh).$$

Při řešení rovnic uvedeného typu vycházíme z formální analogie s obyčejnou diferenciální rovnicí: Místo toho, abychom na řešení pohlíželi jako na funkci $(t,\, x) \mapsto y(t,\, x)$, považujeme je za zobrazení $t \mapsto y(t,\, \cdot)$, které každému času $t \in (0,\, T)$ přiřazuje funkci prostorové proměnné. Síťovou funkci, která aproximuje řešení v čase $t = k\tau$, resp. $t = (k+1)\tau$, budeme značit u, resp. $\widehat{u}$.

3.1.1. *Explicitní schéma.* Rovnici (61a) nahradíme diferenční rovnicí

$$\frac{\widehat{u} - u}{\tau} - Du_{\bar{x}x} = f \quad \text{na } \omega_h.$$

Odtud

$$\widehat{u} = u + \tau D u_{\bar{x}x} + \tau f,$$

resp. po uzlech

$$u_j^{k+1} = u_j^k + \frac{\tau}{h^2} D\left(u_{j+1}^k - 2u_j^k + u_{j-1}^k\right) + \tau f_j^k.$$

Maticově můžeme získanou úlohu zapsat ve tvaru

$$\widehat{u} = \mathbf{A}u + \tau f, \tag{62}$$

kde

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 - D\frac{2\tau}{h^2} & D\frac{\tau}{h^2} & 0 & 0 & \dots \\ D\frac{\tau}{h^2} & 1 - D\frac{2\tau}{h^2} & D\frac{\tau}{h^2} & 0 & \dots \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \end{pmatrix}.$$

Opakovanou aplikací (62) dostaneme

$$u^k = \mathbf{A}u^{k-1} + \tau f^{k-1} = \mathbf{A}^2 u^{k-2} + \tau\mathbf{A} f^{k-2} + \tau f^{k-1} = \dots = \mathbf{A}^k u^0 + \dots.$$

Protože si nepřejeme, aby malá změna u^0 mohla způsobit velkou změnu u^k, chceme, aby $\sigma(\mathbf{A}) \subset (-1,\, 1)$. Matice $\mathbf{A}$ je 3-diagonální a má vlastní čísla

$$\lambda_i = 1 - 4\frac{\tau}{h^2} D \sin^2 \frac{i\pi}{2m}, \quad i \in \widehat{m-1}.$$

Poznámka 3.1. Odpovídající vlastní vektory jsou

$$\left\{ \sin \frac{i\pi j}{m} \right\}_{j=1}^{m-1}, \quad i \in \widehat{m-1}.$$

Požadujeme tedy, aby platilo

$$-1 < 1 - 4\frac{\tau}{h^2} D \sin^2 \frac{i\pi}{2m} < 1, \quad i \in \widehat{m-1},$$

tj.

$$\frac{\tau}{h^2} D \sin^2 \frac{i\pi}{2m} < \frac{1}{2}, \quad i \in \widehat{m-1}.$$

Toho dosáhneme volbou

$$D\frac{\tau}{h^2} < \frac{1}{2}.$$

Explicitní schéma je proto *podmíněně stabilní.*

3.1.2. *Implicitní schéma.* Rovnici (61a) nahradíme diferenční rovnicí

$$\frac{\widehat{u} - u}{\tau} - D\widehat{u}_{\bar{x}x} = \widehat{f} \quad \text{na } \omega_h.$$

Odtud

$$\widehat{u} - \tau D \widehat{u}_{\bar{x}x} = u + \tau \widehat{f},$$

resp. po uzlech

$$u_j^{k+1} - D\frac{\tau}{h^2}\left(u_{j+1}^{k+1} - 2u_j^{k+1} + u_{j-1}^{k+1}\right) = u_j^k + \tau f_j^{k+1}.$$

Maticově můžeme získanou úlohu zapsat ve tvaru

$$\mathbf{A}\widehat{u} = u + \tau \widehat{f}, \tag{63}$$

kde

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 + D\frac{2\tau}{h^2} & -D\frac{\tau}{h^2} & 0 & 0 & \dots \\ -D\frac{\tau}{h^2} & 1 + D\frac{2\tau}{h^2} & -D\frac{\tau}{h^2} & 0 & \dots \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \end{pmatrix}.$$

Opakovanou aplikací (63) dostaneme

$$u^k = \mathbf{A}^{-1}(u^{k-1} + \tau f^k) = (\mathbf{A}^{-1})^2 u^{k-2} + \tau \mathbf{A}^{-1} f^k + \tau (\mathbf{A}^{-1})^2 f^{k-1} = \dots = (\mathbf{A}^{-1})^k u^0 + \dots.$$

Tvrzení 3.1. Implicitní schéma je *nepodmíněně stabilní.*

Důkaz. Později dokážeme, že $\sigma(\mathbf{A}^{-1}) \subset (-1, 1)$. □

3.1.3. *Chyba aproximace diferenciálního operátoru $\frac{\partial}{\partial t} - L$ pro explicitní a implicitní schéma.* Diferenciální operátor $y \mapsto \frac{\partial y}{\partial t}$ aproximujeme dopřednou diferencí u_t v explicitním schématu a zpětnou diferencí $u_{\bar{t}}$ v implicitním schématu. Chyba je v obou případech řádu $O(\tau)$.

Diferenciální operátor $y \mapsto -y''$ aproximujeme v obou schématech diferencí $u_{\bar{x}x}$. Chyba je řádu $O(h^2)$.

Celková chyba aproximace diferenciálního operátoru $\frac{\partial}{\partial t} - L$ je tudíž v obou případech řádu $O(\tau + h^2)$.

3.1.4. *Crankovo-Nicolsonovo schéma.* Rovnici (61a) nahradíme diferenční rovnicí

$$\frac{\widehat{u} - u}{\tau} - \frac{D}{2}\left(\widehat{u}_{\bar{x}x} + u_{\bar{x}x}\right) = \frac{1}{2}\left(f + \widehat{f}\right) \quad \text{na } \omega_h. \tag{64}$$

Odtud

$$\widehat{u} - \tau\frac{D}{2}\widehat{u}_{\bar{x}x} = u + \frac{\tau D}{2} u_{\bar{x}x} + \frac{\tau}{2}\left(\widehat{f} + f\right).$$

Poznámka 3.2. Schéma nahrazuje rovnici (61a) v čase $\left(k + \frac{1}{2}\right)\tau$;

- výraz $\frac{1}{\tau}\left(u^{k+1} - u^k\right)$ nahrazuje $\frac{\partial y}{\partial t}\left((k + \frac{1}{2})\tau, \cdot\right)$ s přesností řádu $O(\tau^2)$ (jde o centrální diferenci),
- výraz $\frac{1}{2}\left(u_{\bar{x}x}^{k+1} + u_{\bar{x}x}^k\right)$ nahrazuje $\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}\left((k + \frac{1}{2})\tau, \cdot\right)$ s přesností řádu $O(\tau^2 + h^2)$,
- výraz $\frac{1}{2}\left(f^{k+1} + f^k\right)$ nahrazuje $f\left((k + \frac{1}{2})\tau, \cdot\right)$ s přesností řádu $O(\tau^2)$.

Tvrzení 3.2. Crankovo-Nicolsonovo schéma je nepodmíněně stabilní.

Důkaz. Položme
$$\widehat{u}_{\bar{t}} = \frac{\widehat{u}-u}{\tau}, \quad \varphi = \frac{1}{2}\left(\widehat{f}+f\right).$$
Pak můžeme (64) přepsat jako
$$\widehat{u}_{\bar{t}} - \varphi = \frac{D}{2}\left(\widehat{u}_{\bar{x}x} + u_{\bar{x}x}\right).$$
Tuto rovnici skalárně vynásobme výrazem $2\tau\widehat{u}_{\bar{t}}$. Využijeme-li Greenovu formuli, dostaneme díky okrajovým podmínkám (61b)
$$\begin{aligned}2\tau\|\widehat{u}_{\bar{t}}\|_h^2 - 2\tau\left(\widehat{u}_{\bar{t}},\, \varphi\right)_h &= \tau D\left(\widehat{u}_{\bar{t}},\, \widehat{u}_{\bar{x}x}+u_{\bar{x}x}\right)_h = D\left(\widehat{u}-u,\, (\widehat{u}+u)_{\bar{x}x}\right)_h = \\ &= -\, D\left((\widehat{u}-u)_{\bar{x}},\, (\widehat{u}+u)_{\bar{x}}\right] = -D\|\widehat{u}_{\bar{x}}]|^2 + D\|u_{\bar{x}}]|^2.\end{aligned}$$
Pomocí Schwarzovy a Youngovy nerovnosti dostaneme
$$2\tau\|\widehat{u}_{\bar{t}}\|_h^2 + D\|\widehat{u}_{\bar{x}}]|^2 - D\|u_{\bar{x}}]|^2 = 2\tau\left(\widehat{u}_{\bar{t}},\, \varphi\right)_h \leq 2\tau\|\widehat{u}_{\bar{t}}\|_h\|\varphi\|_h \leq \tau\|\widehat{u}_{\bar{t}}\|_h^2 + \tau\|\varphi\|_h^2$$
neboli
$$\tau\|\widehat{u}_{\bar{t}}\|_h^2 + D\|\widehat{u}_{\bar{x}}]|^2 - D\|u_{\bar{x}}]|^2 \leq \tau\|\varphi\|_h^2.$$
Tím spíš ovšem platí
$$D\|\widehat{u}_{\bar{x}}]|^2 - D\|u_{\bar{x}}]|^2 \leq \tau\|\varphi\|_h^2.$$
Odtud
$$\begin{aligned}D\|u_{\bar{x}}^{k+1}]|^2 &\leq D\|u_{\bar{x}}^{k}]|^2 + \tau\|\varphi^k\|_h^2 \leq D\|u_{\bar{x}}^{k-1}]|^2 + \tau\|\varphi^{k-1}]|_h^2 + \tau\|\varphi^k\|_h^2 \leq \ldots \leq \\ &\leq D\|u_{\bar{x}}^{0}]|^2 + \sum_{j=0}^{k}\tau\|\varphi^j\|_h^2.\end{aligned}$$

Původní úlohu (61) nahrazujeme diferenční úlohou
$$\frac{u^{k+1}-u^k}{\tau} = \frac{1}{2}D\left(u_{\bar{x}x}^{k+1}+u_{\bar{x}x}^{k}\right) + \frac{1}{2}\left(f^{k+1}-f^k\right), \qquad k = 1,\, \ldots,\, N_T - 1, \tag{65a}$$
$$u_0^k = \gamma_1, \quad u_m^k = \gamma_2, \qquad k = 1,\, \ldots,\, N_T, \tag{65b}$$
$$u_j^0 = y_{0j}, \qquad j = 0,\, \ldots,\, m. \tag{65c}$$
Odečtěme spojitou úlohu pro hladinu $k+\frac{1}{2}$ a tuto diskrétní úlohu. Chyba aproximace diferenciálního operátoru $\frac{\partial}{\partial t} - D\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ je
$$\begin{aligned}\Psi_{h,\tau} = \mathcal{P}_{h,\tau}\left(\frac{\partial y}{\partial t} - D\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}\right) - \frac{\left(\mathcal{P}_{h,\tau}y\right)^{k+1} - \left(\mathcal{P}_{h,\tau}y\right)^{k}}{\tau} + \\ + \frac{1}{2}D\left((\mathcal{P}_{h,\tau}y)_{\bar{x}x}^{k+1} + (\mathcal{P}_{h,\tau}y)_{\bar{x}x}^{k}\right) = O(h^2+\tau^2),\end{aligned}$$
kde $(\mathcal{P}_{h,\tau}y)_j^k = y(k\tau,\, a+jh)$, $j = 0, \ldots, m$, $k = 0, \ldots, N_T$. Položme $z = u - \mathcal{P}_{h,\tau}y$. Potom z splňuje soustavu rovnic
$$\begin{aligned}\frac{\widehat{z}-z}{\tau} &= \frac{1}{2}D(\widehat{z}_{\bar{x}x} + z_{\bar{x}x}) + \Psi_{h,\tau}, \\ z_0^k = z_m^k &= 0, \quad k = 1,\, \ldots,\, N_T, \\ z_j^0 &= 0, \quad j = 0,\, \ldots,\, m.\end{aligned}$$
Odtud a z předchozího vyplývá, že platí
$$D\|z_{\bar{x}}^{k+1}]|^2 \leq D\|z_{\bar{x}}^{0}]|^2 + \sum_{j=0}^{k}\tau\|\Psi^j\|_h^2 = \sum_{j=0}^{k}\tau\|\Psi^j\|_h^2.$$
Ze Sobolevových nerovností pak plyne
$$\|z^{k+1}\|_{h,0} \leq \frac{\sqrt{b-a}}{2}\|z_{\bar{x}}^{k+1}]| \leq \frac{\sqrt{b-a}}{2D}\sqrt{\sum_{j=0}^{k}\tau\|\Psi^j\|_h^2} = O(\tau^2+h^2),$$
tj. stabilita a konvergence. □

3.2. **Metoda přímek.** V metodě sítí jsme vycházeli z toho, že řešení úlohy (61) je zobrazení, které každému časovému okamžiku přiřadí funkci prostorové proměnné. Nabízí se též opačný pohled na věc, tj. sledovat časový vývoj ve zvoleném bodě $x \in \langle a, b\rangle$ jako funkci času. Postupujeme tak, že na interval $\langle a, b\rangle$ položíme síť a úlohu (61) převedeme na počáteční úlohu pro soustavu obyčejných diferenciálních rovnic

$$\begin{aligned} &\frac{\mathrm{d}u_j}{\mathrm{d}t} = D\frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} + f_j, && j \in \widehat{m-1}, \\ &u_0(t) = \gamma_1, \quad u_m(t) = \gamma_2, && t \in (0, T), \\ &u_j(0) = y_{0j}, && j \in \widehat{m-1}, \end{aligned}$$

stručně zapsáno

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}}{\mathrm{d}t} &= D\boldsymbol{u}_{\bar{x}x} + \boldsymbol{f}, \\ \boldsymbol{u}(0) &= \boldsymbol{y}_0. \end{aligned}$$

Tuto soustavu řešíme např. Rungovou-Kuttovou metodou.

4. Numerické řešení okrajových úloh pro PDE 1. řádu

4.1. **Zákony zachování.** Připomeňme úvahu známou z fyziky. Podobně jako ve fyzice budeme předpokládat, že jsme oprávněni provádět úpravy, které použijeme. Uvažme jednorozměrné proudění stlačitelné tekutiny ve směru osy x. Přírůstek množství tekutiny v prostoru mezi libovolnými dvěma body x_1, x_2 v libovolném čase t je dán

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{x_1}^{x_2} \varrho(t,\,x)\,\mathrm{d}x = (\varrho v)(t,\,x_1) - (\varrho v)(t,\,x_2)$$

(předpokládáme, že $x_1 < x_2$). Integrací předchozí rovnosti od t_1 do t_2 dostaneme *zákon zachování hmotnosti v integrálním tvaru*

$$\int_{x_1}^{x_2} \varrho(t_2,\,x)\,\mathrm{d}x - \int_{x_1}^{x_2} \varrho(t_1,\,x)\,\mathrm{d}x = \int_{t_1}^{t_2} (\varrho v)(t,\,x_1)\,\mathrm{d}t - \int_{t_1}^{t_2} (\varrho v)(t,\,x_2)\,\mathrm{d}t.$$

Jiné možné vyjádření dostaneme, jestliže zaměníme derivaci a integrál:

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial t}\varrho(t,\,x)\,\mathrm{d}x = -\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x}(\varrho v)(t,\,x)\,\mathrm{d}x.$$

Protože tento vztah platí pro všechna x_1, x_2, musí platit

$$\frac{\partial}{\partial t}\varrho(t,\,x) + \frac{\partial}{\partial x}(\varrho v)(t,\,x) = 0 \tag{66}$$

pro skoro všechna x. To je *zákon zachování hmotnosti v diferenciálním tvaru.* Další zákony zachování platí pro hybnost a energii, označíme-li tlak p a celkovou hustotu energie E, mají diferenciální tvar

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varrho v)(t,\,x) + \frac{\partial}{\partial x}(\varrho v^2 + p)(t,\,x) = 0 \tag{67a}$$

$$\frac{\partial E}{\partial t}(t,\,x) + \frac{\partial}{\partial x}(v[E+p])(t,\,x) = 0 \tag{67b}$$

Systém (66),(67) nazýváme Eulerovými rovnicemi pro pohyb stlačitelné tekutinu. Pokud zavedeme vektory

$$\boldsymbol{U} = (\varrho, \varrho v, E) \qquad , \qquad \boldsymbol{F}(\boldsymbol{U}) = (\varrho v, \varrho v^2 + p, v(E+p))$$

Můžeme zákony zachování zapsat elegantně v diferenciálním tvaru

$$\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U})\right) = \mathbf{0}. \tag{68}$$

popř. v integrálním tvaru

$$\int_{x_1}^{x_2} \boldsymbol{U}(t_2,\,x)\,\mathrm{d}x - \int_{x_1}^{x_2} \boldsymbol{U}(t_1,\,x)\,\mathrm{d}x = \int_{t_1}^{t_2} \boldsymbol{F}(\boldsymbol{U}(t,\,x_1))\,\mathrm{d}t - \int_{t_1}^{t_2} \boldsymbol{F}(\boldsymbol{U}(t,\,x_2))\,\mathrm{d}t.$$

Veličina $\boldsymbol{F}$ se nazývá *tok.* Zabývejme se dále úlohou (68).

Příklad 4.1. Zvolíme-li v jednorozměrném případě $F(u) = \frac{1}{2}u^2$, dostaneme *Burgersovu rovnici*

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} = 0.$$

Nyní odvodíme slabou formulaci úlohy (68). Vynásobme (68) skalárně zobrazením $\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{C}^1((t_1,\,t_2)\times\mathbf{R})$ a vzniklou rovnost integrujme přes $\langle t_1,\,t_2\rangle \times \langle x_1,\,x_2\rangle$. Dostaneme

$$\int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t}\boldsymbol{\varphi}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}t + \int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x}\left(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U})\right)\boldsymbol{\varphi}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}t = \mathbf{0}. \tag{69}$$

Je

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t}\boldsymbol{\varphi}\,\mathrm{d}t = [\boldsymbol{U}\boldsymbol{\varphi}]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \boldsymbol{U}\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial t}\,\mathrm{d}t$$

a podobně

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x}\left(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U})\right)\boldsymbol{\varphi}\,\mathrm{d}x = [\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U})\boldsymbol{\varphi}]_{x_1}^{x_2} - \int_{x_1}^{x_2} \boldsymbol{F}(\boldsymbol{U})\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial x}\,\mathrm{d}x.$$

Můžeme tedy (69) přepsat jako

$$\left[\int_{x_1}^{x_2} \boldsymbol{U}\boldsymbol{\varphi}\,\mathrm{d}x\right]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2} \boldsymbol{U}\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial t}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}t + \left[\int_{t_1}^{t_2} \boldsymbol{F}(\boldsymbol{U})\boldsymbol{\varphi}\,\mathrm{d}t\right]_{x_1}^{x_2} - \int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2} \boldsymbol{F}(\boldsymbol{U})\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial x}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}t = \mathbf{0}.$$

Za předpokladu, že $\boldsymbol{\varphi}(t_2, x) = \mathbf{0}$ pro všechna x a že $\boldsymbol{\varphi}(t, x) = \mathbf{0}$ pro $|x| \to +\infty$, odtud pro v absolutní hodnotě dost velká x_1, x_2 dostaneme

$$-\int_{x_1}^{x_2} \boldsymbol{U}(t_1, x)\boldsymbol{\varphi}(t_1, x)\,\mathrm{d}x - \int_{t_1}^{t_2}\int_{x_1}^{x_2} \left(\boldsymbol{U}\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial t} + \boldsymbol{F}(\boldsymbol{U})\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial x}\right)\mathrm{d}x\,\mathrm{d}t = \mathbf{0}.$$

Slabým řešením úlohy (68) nazýváme zobrazení $\boldsymbol{U}$, které splňuje předchozí vztah pro každé zobrazení $\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{C}^1((t_1, t_2) \times \mathbf{R})$ s danými vlastnostmi.

4.2. **Numerické metody pro nalezení slabého řešení.** V celém odstavci bude τ, resp. h značit časový, resp. prostorový krok; U_j^k pak bude značit $\boldsymbol{U}(k\tau, jh)$.

4.2.1. *Laxovo-Friedrichsovo schéma.*

$$U_j^{k+1} = U_j^k - \frac{\tau}{h}\left[\boldsymbol{F}_{\mathrm{num}}(U_j^k, U_{j+1}^k) - \boldsymbol{F}_{\mathrm{num}}(U_{j-1}^k, U_j^k)\right],$$

kde

$$\boldsymbol{F}_{\mathrm{num}}(\boldsymbol{U}, \boldsymbol{V}) = \frac{h}{2\tau}(\boldsymbol{U} - \boldsymbol{V}) + \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U}) + \boldsymbol{F}(\boldsymbol{V})\right)$$

je tzv. *numerický tok.*

4.2.2. *Laxovo-Wendroffovo schéma.*

$$U_{j+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(U_j^k + U_{j+1}^k) - \frac{\tau}{2h}\left[\boldsymbol{F}(U_{j+1}^k) - \boldsymbol{F}(U_j^k)\right],$$

$$U_j^{k+1} = U_j^k - \frac{\tau}{h}\left[\boldsymbol{F}(U_{j+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}}) - \boldsymbol{F}(U_{j-\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}})\right].$$

4.2.3. *MacCormackovo schéma.*

$$U_j^{k+1} = \frac{1}{2}(U_j^k + U_j^*) - \frac{\tau}{2h}\left[\boldsymbol{F}(U_j^*) - \boldsymbol{F}(U_{j-1}^*)\right],$$

kde

$$U_j^* = U_j^k - \frac{\tau}{h}\left[\boldsymbol{F}(U_{j+1}^k) - \boldsymbol{F}(U_j^k)\right].$$

4.2.4. *Podmínka stability.* Podmínka stability všech tří schémat je

$$\frac{\tau}{h} \le \frac{1}{\sigma(\boldsymbol{F}'(\boldsymbol{U}))},$$

kde σ značí spektrální poloměr.

5. Numerické řešení počátečních úloh pro obyčejné diferenciální rovnice

Hledáme řešení rovnice $y' = f(x,y)$, $y(x_0) = y_0$. Řekneme, že úloha je numericky vyřešena, právě když se podaří sestavit řešení ve tvaru $y(x_0+h) \doteq y(x_0) + \Delta y_0(x_0, y_0, h)$.

5.1. Analytická metoda.

Provedeme Taylorův rozvoj funkce y:

$$y(x_0+h) - y(x_0) = hy'(x_0) + \frac{h^2}{2} y''(x_0) + \cdots$$

Dále platí

$$y'(x_0) = f(x_0, y_0) = f_0$$

Tento vztah můžeme dál derivovat

$$\begin{aligned}
y''(x_0) &= \frac{\partial f}{\partial x}(x_0,y_0) + \frac{\partial f}{\partial y}(x_0,y_0) y'(x_0) = f_x + f_y f_0, \\
y'''(x_0) &= \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_0,y_0) + 2\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x_0,y_0) y'(x_0) + \\
&\quad + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x_0,y_0) y'^2(x_0) + \frac{\partial f}{\partial y}(x_0,y_0) y''(x_0) = \\
&= f_{x^2} + 2 f_{xy} f_0 + f_{y^2} f_0^2 + f_y(f_x + f_y f_0)
\end{aligned}$$

a tak lze pokračovat libovolně dlouho (za předpokladu, že f má derivace dostatečně vysokého řádu).

5.2. Runge-Kuttovy metody.

Předchozí metoda je výpočetně náročná, proto se v praxi používají následující metody, kde přírůstek hledáme ve tvaru

$$\Delta y_0 = p_1 k_1(h) + p_2 k_2(h) + \cdots + p_r k_r(h),$$

kde $k_i(h) = hf(\xi_i(h), \eta_i(h))$, $\xi_i(h) = x_0 + \alpha_i h$, $\eta_i = y_0 + \beta_{i1} k_1(h) + \beta_{i2} k_2(h) + \cdots + \beta_{i,i-1} k_{i-1}(h)$, $\alpha_1 = 0$.

$$\begin{aligned}
k_1(h) &= hf(x_0, y_0) \\
k_2(h) &= hf(x_0 + \alpha_2 h, y_0 + \beta_{21} k_1(h)) \\
k_3(h) &= hf(x_0 + \alpha_3 h, y_0 + \beta_{31} k_1(h) + \beta_{32} k_2(h)) \\
&\ \ \vdots \\
k_r(h) &= hf(x_0 + \alpha_r h, y_0 + \beta_{r1} k_1(h) + \cdots + \beta_{r,r-1} k_{r-1}(h))
\end{aligned}$$

$$y(x_0+h) \doteq y(x_0) + \underbrace{p_1 k_1(h) + p_2 k_2(h) + \cdots + p_r k_r(h)}_{\text{Runge-Kuttovský přírůstek}}.$$

Pod pojmem „skutečný přírůstek“ rozumíme $y(x_0+h) - y(x_0)$. Zbývá vyřešit volbu α, β, p.

Pokud rozvineme Runge-Kuttovský a skutečný přírůstek v mocninách h, chceme, aby se rozvoje shodovaly do co možná nejvyšší mocniny h. Budou-li se shodovat až do h^p, je chyba řádu h^{p+1}. Toho chceme dosáhnout pro libovolnou volbu pravé strany. Z toho budeme vycházet při volbě koeficientů α, β, p.

Označme rozdíl mezi správnou a spočtenou hodnotou

$$\varphi_r(h) = [y(x_0+h) - y(x_0)] - [p_1 k_1(h) + p_2 k_2(h) + \cdots + p_r k_r(h)].$$

Výše uvedená podmínka pak odpovídá podmínce

$$\varphi_r(0) = \varphi_r'(0) = \cdots = \varphi_r^{(s)}(0) = 0.$$

Pro $r = 1$:

$$\varphi_1(h) = [y(x_0+h) - y(x_0)] - [p_1 hf(x_0, y_0)]$$
$$\varphi_1'(0) = y'(x_0) - p_1 f_0 = f_0 - p_1 f_0 = (1-p_1) f_0$$

z toho vychází podmínka $p_1 = 1$. Výsledná metoda

$$y(x_0+h) \doteq y(x_0) + hf(x_0, y_0)$$

se označuje jako Eulerova. Pro $r = 2$:

$$\varphi_2(h) = [y(x_0 + h) - y(x_0)] - [p_1 k_1(h) + p_2 k_2(h)]$$

$$\begin{aligned}
k_1(h) &= hf(x_0, y_0)\\
k_2(h) &= hf(x_0 + \alpha_2 h, y_0 + \beta_{21} k_1(h))\\
k_1'(h) &= f(x_0, y_0)\\
k_2'(h) &= f(x_0 + \alpha_2 h, y_0 + \beta_{21} k_1(h)) + h\left[\frac{\partial f}{\partial x}\alpha_2 + \frac{\partial f}{\partial y}\beta_{21} k_1'(h)\right]\\
k_1''(h) &= 0\\
k_2''(h) &= 2\left[\frac{\partial f}{\partial x}(x_0 + \alpha_2 h, y_0 + \beta_{21} k_1(h)) + \frac{\partial f}{\partial y}\beta_{21} k_1'(h)\right] + h[\cdots]'
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
k_1'(0) &= f_0 & k_1''(0) &= 0\\
k_2'(0) &= f_0 & k_2''(0) &= 2(\alpha_2 f_x + \beta_{21} f_y f_0)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
y'(x) &= f(x, y) & y'(x_0) &= f_0\\
y''(x) &= \frac{\partial f}{\partial x}(x, y) + \frac{\partial f}{\partial y}(x, y) y'(x) & y''(x_0) &= f_x + f_y f_0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
0 &= \varphi_2'(0) = f_0 - [p_1 f_0 + p_2 f_0] = [1 - p_1 - p_2] f_0\\
0 &= \varphi_2''(0) = f_x + f_y f_0 - 2p_2(\alpha_2 f_x + \beta_{21} f_y f_0) = [1 - 2\alpha_2 p_2] f_x + [1 - 2\beta_{21} p_2] f_y f_0
\end{aligned}$$

Z toho vyplývá podmínka

$$\begin{aligned}
p_1 + p_2 &= 1\\
2\alpha_2 p_2 &= 1\\
2\beta_{21} p_2 &= 1.
\end{aligned}$$

V praxi se užívají následující volby:

$$\begin{aligned}
\alpha_2 &= \beta_{21} = 1 & \alpha_2 &= \beta_{21} = \frac{1}{2}\\
p_1 &= p_2 = \frac{1}{2} & p_1 &= 0 \quad p_2 = 1\\
k_1 &= hf(x_0, y_0) & k_1 &= hf(x_0, y_0)\\
k_2 &= hf(x_0 + h, y_0 + h) & k_2 &= hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{k_1}{2}\right)\\
y(x_0 + h) &\doteq y(x_0) + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) & y(x_0 + h) &\doteq y(x_0) + k_2
\end{aligned}$$

Pro $r = 3$:

$$\varphi_3(h) = [y(x_0 + h) - y(x_0)] - [p_1 k_1(h) + p_2 k_2(h) + p_3 k_3(h)]$$

$$
\begin{aligned}
k_1(h) &= hf(x_0, y_0)\\
k_2(h) &= hf(x_0+\alpha_2 h, y_0+\beta_{21}k_1)\\
k_3(h) &= hf(x_0+\alpha_2 h, y_0+\beta_{31}k_1+\beta_{32}k_2)\\
k_1'(h) &= f(x_0, y_0)\\
k_2'(h) &= f(x_0+\alpha_2 h, y_0+\beta_{21}k_1) + h\left[\frac{\partial f}{\partial x}\alpha_2 + \frac{\partial f}{\partial y}\beta_{21}k_1'\right]\\
k_3'(h) &= f(x_0+\alpha_2 h, y_0+\beta_{31}k_1+\beta_{32}k_2) + h\left[\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y}(\beta_{31}k_1'+\beta_{32}k_2')\right]\\
k_1''(h) &= 0\\
k_2''(h) &= 2\left[\frac{\partial f}{\partial x}(x_0+\alpha_2 h, y_0+\beta_{21}k_1)\alpha_2 + \frac{\partial f}{\partial y}\beta_{21}k'\right] + h[\cdots]'\\
k_3''(h) &= 2\left[\frac{\partial f}{\partial x}(x_0+\alpha_2 h, y_0+\beta_{31}k_1+\beta_{32}k_2)\alpha_3 + \frac{\partial f}{\partial y}(\beta_{31}k_1'+\beta_{32}k_2')\right] + h[\cdots]'\\
k_1'''(h) &= 0\\
k_2'''(h) &= 3\left[\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_0+\alpha_2 h, y_0+\beta_{21}k_1)\alpha_2^2 + 2\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}\alpha_2\beta_{21}k_1' + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(\beta_{21}k_1')^2\right] +\\
&\quad + h[\cdots]''\\
k_3'''(h) &= 3\left[\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_0+\alpha_2 h, y_0+\beta_{31}k_1+\beta_{32}k_2)\alpha_3^2 + 2\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}\alpha_3(\beta_{31}k_1'+\beta_{32}k_2') + \right.\\
&\quad \left. + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(\beta_{31}k_1'+\beta_{32}k_2') + \frac{\partial f}{\partial y}(\beta_{31}k_1''+\beta_{32}k_2'')\right] + h[\cdots]''
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
k_1'(0) &= f_0\\
k_1''(0) &= 0\\
k_1'''(0) &= 0\\
k_2'(0) &= f_0\\
k_2''(0) &= 2(\alpha_2 f_x + \beta_{21}f_y f_0)\\
k_2'''(0) &= 3(\alpha_2^2 f_{x^2} + 2\alpha_2\beta_{21}f_{xy}f_0 + \beta_{21}^2 f_{y^2}f_0^2)\\
k_3'(0) &= 0\\
k_3''(0) &= 2(\alpha_3 f_x + (\beta_{31}+\beta_{32})f_y f_0\\
k_3'''(0) &= 3(\alpha_3^2 f_{x^2} + 2\alpha_3(\beta_{31}+\beta_{32})f_{xy}f_0 + (\beta_{31}+\beta_{32})^2 f_{y^2}f_0^2 +\\
&\quad + 2\beta_{32}f_y(\alpha_2 f_x + \beta_{21}f_y f_0))
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
y'(x) &= f(x,y)\\
y''(x) &= \frac{\partial f}{\partial x}(x,y) + \frac{\partial f}{\partial y}(x,y)y'(x)\\
y'''(x) &= \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x,y) + 2\frac{\partial^2 f}{\partial x\partial y}(x,y)y'(x) + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x,y)y'^2(x) + \frac{\partial f}{\partial y}(x,y)y''(x)\\
y'(x_0) &= f_0\\
y''(x_0) &= f_x + f_y f_0\\
y'''(x_0) &= f_{x^2} + 2f_{xy}f_0 + f_{y^2}f_0^2 + f_y(f_x + f_y f_0)
\end{aligned}
$$

$$\begin{aligned}
\varphi_3'(0) &= f_0 - [p_1 f_0 + p_2 f_0 + p_3 f_0] = [1 - p_1 - p_2 - p_3] \\
\varphi_3''(0) &= f_x + f_y f_0 - [2p_2(\alpha_2 f_x + \beta_{21} f_y f_0) + 2p_3(\alpha_3 f_x + (\beta_{31} + \beta_{32}) f_y f_0)] = \\
&= f_x[1 - 2\alpha_2 p_2 - 2\alpha_3 p_3] + f_y f_0[1 - 2p_2\beta_{21} - 2p_3(\beta_{31} + \beta_{32})] \\
\varphi_3'''(0) &= f_{x^2}[1 - 3p_2\alpha_2^2 - 3p_3\alpha_3^2] + f_{xy} f_0[2 - 6p_2\alpha_2\beta_{21} - 6p_3\alpha_3(\beta_{31} + \beta_{32})] + \\
&\quad + f_0^2 f_{y^2}[1 - 3p_2\beta_{21}^2 - 3p_3(\beta_{31} + \beta_{32})^2] + f_y f_x[1 - 6p_3\alpha_2\beta_{32}] + \\
&\quad + f_y^2 f_0[1 - 6p_3\beta_{21}\beta_{32}],
\end{aligned}$$

z toho dostáváme

$$\begin{aligned}
1 - p_1 - p_2 - p_3 &= 0 \\
1 - 2\alpha_2 p_2 - 2\alpha_3 p_3 &= 0 \\
1 - 2p_2\beta_{21} - 2p_3(\beta_{31} + \beta_{32}) &= 0 \\
1 - 3p_2\alpha_2^2 - 3p_3\alpha_3^2 &= 0 \\
2 - 6p_2\alpha_2\beta_{21} - 6p_3\alpha_3(\beta_{31} + \beta_{32}) &= 0 \\
1 - 3p_2\beta_{21}^2 - 3p_3(\beta_{31} + \beta_{32})^2 &= 0 \\
1 - 6p_3\alpha_2\beta_{32} &= 0 \\
1 - 6p_3\beta_{21}\beta_{32} &= 0
\end{aligned}$$

Tyto rovnice jsou ovšem závislé a jsou ekvivalentní s následující soustavou:

$$\begin{aligned}
1 &= p_1 + p_2 + p_3 \\
\frac{1}{2} &= p_2\alpha_2 + p_3\alpha_3 \\
1 &= 3p_2\alpha_2^2 + 3p_3\alpha_3^2 \\
\alpha_2 &= \beta_{21} \\
\alpha_3 &= \beta_{31} + \beta_{32} \\
\frac{1}{6} &= p_3\beta_{32}\alpha_2.
\end{aligned}$$

Každé řešení této soustavy dává Runge-Kuttovu metodu. Čtvrtá derivace nulovat nejde. V praxi se používají následující metody:

$$\begin{aligned}
k_1 &= hf(x_0, y_0) \\
k_2 &= hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{k_1}{2}\right) \\
k_3 &= hf(x_0 + h, y_0 - k_1 + 2k_2) \\
y(x_0 + h) &\doteq y(x_0) + \frac{1}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3)
\end{aligned}$$

nebo

$$\begin{aligned}
k_1 &= hf(x_0, y_0) \\
k_2 &= hf\left(x_0 + \frac{h}{3}, y_0 + \frac{k_1}{3}\right) \\
k_3 &= hf\left(x_0 + \frac{2h}{3}, y_0 + \frac{2k_2}{3}\right) \\
y(x_0 + h) &\doteq y(x_0) + \frac{1}{4}(k_1 + 3k_3).
\end{aligned}$$

Pro $r = 4$: Pokud sestavíme polynomy pro $r = 4$ a požadovali $\varphi^{(4)} = 0$, dojdeme k následujícím 11 podmínkám:

$$
\begin{aligned}
\alpha_2 &= \beta_{21} \\
\alpha_3 &= \beta_{31} + \beta_{32} \\
\alpha_4 &= \beta_{41} + \beta_{42} + \beta_{43} \\
p_1 + p_2 + p_3 + p_4 &= 1 \\
p_2\alpha_2 + p_3\alpha_3 + p_4\alpha_4 &= \frac{1}{2} \\
p_2\alpha_2^2 + p_3\alpha_3^2 + p_4\alpha_4^2 &= \frac{1}{4} \\
p_2\alpha_2^3 + p_3\alpha_3^3 + p_4\alpha_4^3 &= \frac{1}{4} \\
p_3\beta_{32}\alpha_2 + p_4\beta_{42}\alpha_2 + p_4\beta_{43}\alpha_3 &= \frac{1}{6} \\
p_3\beta_{32}\alpha_2\alpha_3 + p_4\beta_{42}\alpha_2\alpha_4 + p_4\beta_{43}\alpha_3\alpha_4 &= \frac{1}{8} \\
p_3\beta_{32}\alpha_2^2 + p_4\beta_{42}\alpha_2^2 + p_4\beta_{43}\alpha_3^2 &= \frac{1}{12} \\
p_4\beta_{43}\beta_{32}\alpha_2 &= \frac{1}{24}
\end{aligned}
$$

Máme 13 neznámých, ale $\varphi_4^{(5)}$ už nejde nulovat. Uvedeme následující tři metody.

(1) Standardní Runge-Kuttova metoda:

$$
\begin{aligned}
k_1 &= hf(x_0, y_0) \\
k_2 &= hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{k_1}{2}\right) \\
k_3 &= hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{k_2}{2}\right) \\
k_4 &= hf(x_0 + h, y_0 + k_3) \\
y(x_0 + h) &\doteq y(x_0) + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)
\end{aligned}
$$

(2) Tříosminové pravidlo:

$$
\begin{aligned}
k_1 &= hf(x_0, y_0) \\
k_2 &= hf\left(x_0 + \frac{h}{3}, y_0 + \frac{k_1}{3}\right) \\
k_3 &= hf\left(x_0 + \frac{2h}{3}, y_0 - \frac{k_1}{3} + k_2\right) \\
k_4 &= hf(x_0 + h, y_0 + k_1 - k_2 + k_3) \\
y(x_0 + h) &\doteq y(x_0) + \frac{1}{8}(k_1 + 3k_2 + 3k_3 + k_4)
\end{aligned}
$$

(3)

$$
\begin{aligned}
k_1 &= hf(x_0, y_0) \\
k_2 &= hf\left(x_0 + \frac{h}{4}, y_0 + \frac{k_1}{4}\right) \\
k_3 &= hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 - \frac{k_2}{2}\right) \\
k_4 &= hf(x_0 + h, y_0 + k_1 - 2k_2 + 2k_3) \\
y(x_0 + h) &\doteq y(x_0) + \frac{1}{6}(k_1 + 4k_3 + 4k_4)
\end{aligned}
$$

Abychom dosáhli maximální chyby $O(h^6)$, nevystačíme s $r = 5$, ale až s $r = 6$. Proto se používají zejména metody s $r = 4$.

V praxi se nejčastěji používají metody s automatickým výběrem kroku. Nejjednodušší způsob je spočítat následující hodnotu s krokem h a $h/2$, je-li relativní rozdíl větší než nějaké ε, interval se dále půlí. Případně se krok může zase prodlužovat — např. mám počitadlo, kolikrát odchylka vyhovovala a když dosáhne určité hodnoty, zase zkusím krok prodloužit.

Příklad 5.1. Řešme rovnici $y' = y$, $y(0) = 1$. Víme, že řešením je $y(x) = e^x$. Pokud použijeme standardní Runge-Kuttovu metodu, máme

$$
\begin{aligned}
k_1 &= 0.1 * 1 = 0.1 \\
k_2 &= 0.1 * 1.05 = 0.105 \\
k_3 &= 0.1 * 1.0525 = 0.10525 \\
k_4 &= 0.1 * 1.10525 = 0.110525 \\
y(0.1) &= 1 + \frac{1}{6}[0.1 + 0.21 + 0.2105 + 0.110525] = 1 + \frac{1}{6} * 0.631025 \doteq 1.1051708333,
\end{aligned}
$$

přičemž $e^{0.1} = 1.105170918$.

Kteroukoli z Runge-Kuttových metod pro rovnici lze použít i pro systém rovnic.

Příklad 5.2. Mějme systém rovnic $y' = f(x, y, z)$, $z' = g(x, y, z)$ s počátečními podmínkami $y(x_0) = y_0$, $z(x_0) = z_0$. Standardní Runge Kuttova metoda pro tento systém je

$$
\begin{aligned}
k_1 &= hf(x_0, y_0, z_0) & l_1 &= hg(x_0, y_0, z_0) \\
k_2 &= hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{k_1}{2}, z_0 + \frac{l_1}{2}\right) & l_2 &= hg\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{k_1}{2}, z_0 + \frac{l_1}{2}\right) \\
k_3 &= hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{k_2}{2}, z_0 + \frac{l_2}{2}\right) & l_3 &= hg\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{k_2}{2}, z_0 + \frac{l_2}{2}\right) \\
k_4 &= hf(x_0 + h, y_0 + k_3, z_0 + l_3) & l_4 &= hg(x_0 + h, y_0 + k_3, z_0 + l_3)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
y(x_0 + h) &\doteq y(x_0) + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\
z(x_0 + h) &\doteq z(x_0) + \frac{1}{6}(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4)
\end{aligned}
$$

Rovnici n-tého řádu lze převést na systém a pak řešit Runge-Kuttovou metodou. Pro rovnici druhého řádu $y'' = f(x, y, y')$ existuje přímo Runge-Kutta-Nyströmův vzorec

$$\begin{aligned}
k_1 &= \frac{h^2}{2} f(x_0, y_0, y_0') \\
k_2 &= \frac{h^2}{2} f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{h}{2} y_0' + \frac{k_1}{4}, y_0' + \frac{k_1}{h}\right) \\
k_3 &= \frac{h^2}{2} f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{h}{2} y_0' + \frac{k_2}{4}, y_0' + \frac{k_2}{h}\right) \\
k_4 &= \frac{h^2}{2} f\left(x_0 + h, y_0 + h y_0' + k_3, y_0' + \frac{2k_3}{h}\right) \\
y(x_0 + h) &\doteq y(x_0) + h y'(x_0) + \frac{1}{3}(k_1 + k_2 + k_3) \\
y'(x_0 + h) &\doteq y'(x_0) + \frac{1}{3h}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)
\end{aligned}$$

5.3. **Řešení lineárních diferenčních rovnic.** Lineární diferenční rovnicí k-tého řádu nazýváme rovnici

$$a_k(n) y_{n+k} + a_{k-1}(n) y_{n+k-1} + \cdots + a_0(n) y_n = b_n,$$

kde $a_i(n)$, $b(n)$ jsou posloupnosti, $a_k(n) \neq 0$, $a_0(n) \neq 0$.

Řešením lineární diferenční rovnice je posloupnost y_n, která je jednoznačně dáno hodnotami $y_0, y_1, \ldots, y_{k-1}$, neboť pro y_i pak dostáváme jednoznačný rekurentní vztah. Pokud je $b(n) = 0$, nazýváme rovnici rovnicí bez pravé strany.

(1) Jsou-li $y_n^{(1)}, y_n^{(2)}, \ldots, y_n^{(k)}$ řešení rovnice bez pravé strany, pak jejich lineární kombinace

$$\sum_{i=1}^{k} c_i y_n^{(i)}$$

je také řešení.

(2) Jsou-li $y_n^{(1)}, y_n^{(2)}, \ldots, y_n^{(k)}$ řešení rovnice bez pravé strany a platí-li

$$\begin{vmatrix} y_0^{(1)} & y_0^{(2)} & \ldots & y_0^{(k)} \\ y_1^{(1)} & y_1^{(2)} & \ldots & y_1^{(k)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_{k-1}^{(1)} & y_{k-1}^{(2)} & \ldots & y_{k-1}^{(k)} \end{vmatrix} \neq 0$$

a Y_n je řešení rovnice bez pravé strany, pak existují jednoznačná $c_1, c_2, \ldots, c_k$ taková, že

$$Y_n = \sum_{i=1}^{k} c_i y_n^{(i)}.$$

Důkaz. Matice soustavy rovnic

$$\begin{aligned}
c_1 y_0^{(1)} + c_2 y_0^{(2)} + \cdots + c_k y_0^{(k)} &= Y_0 \\
c_1 y_1^{(1)} + c_2 y_1^{(2)} + \cdots + c_k y_1^{(k)} &= Y_1 \\
&\vdots \\
c_1 y_{k-1}^{(1)} + c_2 y_{k-1}^{(2)} + \cdots + c_k y_{k-1}^{(k)} &= Y_{k-1}
\end{aligned}$$

je regulární, tudíž má jednoznačné řešení. □

(3) Obecné řešení rovnice s pravou stranou má tvar

$$Y_n = \sum_{i=1}^{n} c_i y_n^{(i)} + p_n,$$

kde p_n je partikulární řešení.

5.4. **Diferenční rovnice s konstantními koeficienty.** Řešení rovnice tvaru

$$a_k y_{n+k} + a_{k-1} y_{n+k-1} + \cdots + a_0 y_n = 0$$

hledáme ve tvaru $y_n = z^n$. Po dosazení

$$a_k z^{n+k} + a_{k-1} z^{n+k-1} + \cdots + a_0 z^n = 0$$

a po vykrácení z^n

$$a_k z^k + a_{k-1} z^{k-1} + \cdots + a_0 = 0$$

dostaneme **charakteristickou rovnici**. Je-li z_i r-násobný kořen, řeší rovnici z_i^n a dále také $nz_i^n, n^2 z_i^n, \ldots, n^{r-1} z_i^n$.

Nástin důkazu. Dosazením do diferenční rovnice dostaneme

$$a_k(n+k)z^{n+k} + a_{k-1}(n+k-1)z^{n+k-1} + \cdots + a_0 n z^n,$$

po úpravě

$$n[\underbrace{a_k z^k + a_{k-1} z^{k-1} + \cdots + a_0}_{\text{charakteristický polynom}}] + z[\underbrace{k a_k z^{k-1} + (k-1) a_{k-1} z^{k-2} + \cdots + a_1}_{\text{derivace charakteristického polynomu}}] = 0.$$

Protože z je r-násobný kořen, je kořenem i 1., 2. až $r-1$-té derivace. □

Věta 5.1. Nechť charakteristická rovnice má kořeny $z_1, z_2, \ldots, z_s$ vzájemně různé, násobností $r_1, r_2, \ldots, r_s$. Potom řešení

$$z_1^n, nz_1^n, \ldots, n_1^{r-1} z_1^n, \ldots, z_s^n, nz_s^n, \ldots, n^{r_s-1} z_s^n$$

tvoří fundamentální systém.

Důkaz. Předpokládejme, že řešení jsou lineárně závislá. Potom pro každé n musí platit

$$p_1(n) z_1^n + p_2(n) z_2^n + \cdots + p_s(n) z_s^n = 0,$$

kde $p_1, p_2, \ldots, p_s$ jsou polynomy v n a alespoň jeden z nich je nenulový. Dokážeme, že to nemůže platit. To provedeme indukcí podle počtu nenulových polynomů s.

Pro $s = 1$: Buď $p_1(n) z_1^n = 0$. Po vykrácení z_1^n je $p_1(n) = 0$, což je spor.

$$p_1(n) z_1^n = -p_2(n) z_2^n - \ldots - p_s(n) z_s^n$$

Po vydělení z_1^n

$$p_1(n) = -p_2(n) \zeta_2^n - \ldots - p_s(n) \zeta_s^n,$$

kde $\zeta_i \neq 1$ a současně jsou vzájemně různá, neboť z_i jsou vzájemně různá. Tento vztah musí platit i pro $n+1$.

$$p_1(n+1) = -p_2(n+1) \zeta_2^{n+1} - \ldots - p_s(n) \zeta_s^{n+1}.$$

Odečtením dostaneme

$$p_1(n+1) - p_1(n) = -[p_2(n+1)\zeta_2 - p_2(n)]\zeta_2^n - \ldots - [p_s(n+1)\zeta_s - p_s(n+1)]\zeta_s^n.$$

Na levé straně máme teď polynom (ostře) nižšího stupně než p_1, protože nejvyšší mocniny se odečetly, naopak stupně polynomů na pravé straně se díky $\zeta_i \neq 1$ nezmění. Tímto způsobem lze postupně snížit stupeň levé strany až k nulovému polynomu. Podle indukčního předpokladu pak jsou všechny polynomy na pravé straně nulové. □

5.5. **Jednokrokové metody.**

Definice 5.1. Obecnou jednokrokovou metodou nazveme metodu danou formulí tvaru

$$y_{n+1} = y_n + h\Phi_f(x_n, y_n, h). \tag{70}$$

Definice 5.2. Formule (70) se nazývá **regulární**, jestliže funkce $\Phi_f(x, y, h)$ je definována a spojitá na množině, kde $x_0 \le x \le a$, $-\infty < y < +\infty$, $h \in \langle 0, h_0 \rangle$ $(h_0 > 0)$ a existuje-li konstanta M (nezávislá na x a h) tak, že

$$|\Phi_f(x, y, h) - \Phi_f(x, z, h)| \le M\, |y - z| \tag{71}$$

pro každé $x \in \langle x_0, a \rangle$, $y, z \in (-\infty, +\infty)$ a $h \in \langle 0, h_0 \rangle$.

Definice 5.3. Formule (70) se nazývá **stupně** p, existuje-li konstanta L a $p \in \mathbb{N}$ tak, že

$$\left| \Phi_f(t, y, h) - \frac{r(t+h) - y}{h} \right| \le Lh^p \tag{72}$$

pro každé $t \in \langle x_0, a \rangle$, $y \in (-\infty, +\infty)$, $h \in \langle 0, h_0 \rangle$, kde $r(x)$ je řešení rovnice $y' = f(x, y)$ na intervalu $\langle t, t + h \rangle$ s počáteční podmínkou $r(t) = y$.

Poznámka 5.1. $|h\Phi_f(t, y, h) - (r(t+h) - r(t))| \le Lh^{p+1}$.

Věta 5.2. Nechť je dána regulární obecná jednokroková formule (70), která je stupně $p \in \mathbb{N}$. Nechť $y(x)$ je řešení rovnice $y' = f(x, y)$ a $y_0, y_1, \ldots, y_N$ jsou hodnoty splňující vztah $y_{n+1} = y_n + h\Phi_f(x_n, y_n, h) + \delta_n$ pro $n = 0, 1, 2, \ldots, N - 1$. Pak pro $n = 0, 1, 2, \ldots, N$ platí

$$|y_n - y(x_n)| \le |y_0 - y(x_0)|\, e^{M(x_n - x_0)} + \left(Lh^p + \frac{\delta}{h} \right) \frac{e^{M(x_n - x_0)} - 1}{M},$$

kde

$$\delta = \max_{n=0,\ldots,N-1} |\delta_n|$$

a M a L jsou konstanty definované (71) a (72).

Důkaz. Buď $r_n = y_n - y(x_n)$ pro $n = 0, 1, \ldots, N$. Platí, že

$$\begin{aligned} r_{n+1} &= y_{n+1} - y(x_{n+1}) = y_n + h\Phi_f(x_n, y_n, h) + \delta_n - y(x_{n+1}) = \\ &= \underbrace{(y_n - y(x_n))}_{r_n} + h[\Phi_f(x_n, y_n, h) - \Phi_f(x_n, y(x_n), h)] + \\ &\quad + h\left[\Phi_f(x_n, y(x_n), h) - \frac{y(x_n + h) - y(x_n)}{h} \right] + \delta_n, \end{aligned}$$

s použitím $\delta \ge \delta_n$ a konstant M, L můžeme psát $|r_{n+1}| \le |r_n| + Mh\,|r_n| + Lh^{p+1} + \delta$. Zavedeme $R_0 = |r_0|$, $R_{n+1} = (1 + hM)R_n + Lh^{p+1} + \delta$, Platí, že $|r_n| \le R_n$. To dokážeme indukcí: $|r_{n+1}| \le R_n + MhR_n + Lh^{p+1} + \delta = R_{n+1}$.

Dostali jsme tak diferenční rovnici pro R_n. Rovnice bez pravé strany má tvar $R_{n+1} = (1+hM)R_n$, charakteristická rovnice je $z - (1 + hM) = 0$, obecné řešení rovnice bez pravé strany má tvar $R_n = C(1 + hM)^n$.

Hledáme partikulární řešení ve tvaru $P = (1 + hM)P + Lh^{p+1} + \delta$, z čehož dostáváme

$$P = \frac{Lh^{p+1} + \delta}{hM}.$$

Nakonec doladíme konstantu C:

$$R_n = C(1 + hM)^n - \left(Lh^p + \frac{\delta}{h} \right) \frac{1}{M},$$

$$|r_0| = C - \left(Lh^p + \frac{\delta}{h} \right) \frac{1}{M},$$

$$C = |r_0| + \left(Lh^p + \frac{\delta}{h} \right) \frac{1}{M}.$$

Obecné řešení rovnice s pravou stranou má tvar

$$R_n = |r_0|\,(1+hM)^n + \left(Lh^p + \frac{\delta}{h}\right)\frac{(1+hM)^n - 1}{M}.$$

Protože $1 + x < e^x$, je

$$\begin{aligned} R_n &\leq |r_0|\, e^{nhM} + \left(Lh^p + \frac{\delta}{h}\right)\frac{e^{nhM} - 1}{M} = \\ &= |y_0 - y(x_0)|\, e^{(x_n - x_0)M} + \left(Lh^p + \frac{\delta}{h}\right)\frac{e^{M(x_n - x_0)} - 1}{M}. \quad \square \end{aligned}$$

Poznámka 5.2. První člen je způsoben počáteční podmínkou, druhý je chyba metody, δ je zaokrouhlovací chyba počítače. Nemá cenu jít s h pod jistou mez, protože jinak se bude zvětšovat chyba δ/h. Jediným způsobem jak zvýšit přesnost je pak metoda vyššího řádu.

Poznámka 5.3. Závislost chyby je dost špatná, dá se zkonstruovat rovnice, kdy to bude nejhorší — chyba bude exponenciálně závislá.

Definice 5.4. nechť rovnice $y' = f(x, y)$ na intervalu $\langle x_0, +\infty)$ má řešení $y(x) = 0$, tj. $0 = f(x, 0)$. Toto nulové řešení se nazývá **stabilní vzhledem k soustavným poruchám**, jestliže pro každé $\varepsilon > 0$ existuje $\delta > 0$ tak, že pro každou spojitou funkci $\eta(x)$, která pro $x \in \langle x_0, +\infty)$ s výjimkou spočetného množství izolovaných bodů splňuje rovnici $\eta' = f(x, \eta) + g(x)$, kde $|\eta(0)| < \delta$, $|g(x)| \leq \delta$ pro $x \in \langle x_0, +\infty)$ a $g(x)$ je libovolná měřitelná funkce, platí nerovnost $|\eta(x)| < \varepsilon$ pro $x \in \langle x_0, +\infty)$, tj. poškodím-li počáteční podmínku a pravou stranu o δ, změní se řešení o ε.

Definice 5.5. Obecná jednokroková formule se nazývá **úplně regulární**, je-li funkce $\Phi_f(x, y, h)$ omezená, spojitá ve všech svých proměnných, stejnoměrně spojitá v x, lipschitzovská v y s konstantou M (nezávislou na x a h) a stejnoměrně spojitá v h.

Věta 5.3. Nechť je dána rovnice $y' = f(x, y)$ a na $\langle x_0, +\infty)$ platí $f(x, 0) = 0$. Nechť nulové řešení je stabilní vzhledem k soustavným poruchám. Nechť je dána úplně regulární jednokroková metoda (70) stupně $p \in \mathbb{N}$. Pak pro každé $\varepsilon > 0$ existují $h_1, \delta > 0$ tak, že pro každé řešení diferenční rovnice $y_{n+1} = y_n + h\Phi_f(x_n, y_n, h) + \delta_n$ pro $n = 0, 1, 2, \ldots$, pro které $|y_0| < \delta$, $\delta_n \leq h\delta$, $h < h_1$ splňuje nerovnost $|y_n| < \varepsilon$.

Důkaz. Buď

$$\eta(x) = y_n + \frac{y_{n+1} - y_n}{h}(x - x_n) = y_n + \left(\Phi_f(x_n, y_n, h) + \frac{\delta_n}{h}\right)(x - x_n)$$

pro $x \in \langle x_n, x_{n+1}\rangle$, $n = 0, 1, \ldots$. Buď $g(x) = \eta' - f(x, \eta)$, $|g(x)| \leq \delta_1$.

$$\begin{aligned} |\eta' - f(x, \eta)| \leq \left|\Phi_f(x_n, y_n, h) + \frac{\delta_n}{h} - f(x, \eta)\right| &\leq |\Phi_f(x_n, y_n, h) - \Phi_f(x_n, \eta, h)| + \\ &+ |\Phi_f(x_n, \eta, h) - \Phi_f(x, \eta, h)| + |\Phi_f(x, \eta, h) - f(x, \eta)| + \frac{|\delta_n|}{h} \end{aligned}$$

Protože Φ_f je lipschitzovské v y, je

$$|\Phi_f(x_n, y_n, h) - \Phi_f(x_n, \eta, h)| \leq M\,|\eta - y_n| \leq M\left|\Phi_f(x_n, y_n, h) + \frac{\delta_n}{h}\right| |x - x_0|\,.$$

To lze libovolně zmenšit volbou h_1 a δ.

Člen $|\Phi_f(x_n, \eta, h) - \Phi_f(x, \eta, h)|$ lze libovolně zmenšit volbou h_1 díky stejnoměrné spojitosti v x.

Buď $r'(x) = f(x, r(x))$, $r(x) = \eta(x)$. Protože

$$\lim_{h \to 0}\left|\Phi_f(x, \eta, h) - \frac{r(x+h) - \eta}{h}\right| = 0,$$

a Φ_f je spojitá v x, je $\Phi_f(x, \eta, 0) = r'(x) = f(x, \eta)$. Díky stejnoměrné spojitosti v h jde pro dostatečně malé h třetí člen k nule. $\square$

5.6. **Mnohokrokové (diferenční) metody.** Zabýváme se úlohou nalézt přibližné hodnoty řešení rovnice $y' = f(x,y)$, $y(x_0) = y_0$ v bodech $x_0, x_1, \ldots,$ přičemž $x_i = x_0 + ih$. K výpočtu y_{n+1} potřebujeme hodnoty $y_{m-k}, y_{m-k+1}, \ldots, y_m$, ale do pravé strany dosazujeme pouze jednou. Problém je pouze na počátku — tam se musí použít Runge-Kutta nebo Taylor.

Vycházíme z toho, že pro přesné y_i platí

$$y_{m+1} = y_{m-j} + \int\limits_{x_{m-j}}^{x_{m+1}} f(x,y(x))\mathrm{d}x. \tag{73}$$

Při numerickém výpočtu funkci $f(x,y(x))$ nahradíme interpolačním polynomem k uzlům $x_{m-k}, x_{m-k+1}, \ldots, x_m$ nebo $x_{m-k}, x_{m-k+1}, \ldots, x_m, x_{m+1}$. V prvním případě se jedná o **explicitní metody** — dostaneme explicitní vyjádření hodnoty y_{m+1}. V druhém případě jde o **implicitní metody** — ve vzorci vystoupí i $f(x_{m+1}, y_{m+1})$. Poté se buď y_{m+1} vypočte přímo z rovnice (méně obvyklé) nebo se vypočítá přibližná hodnota iteračně. Volbou $j = 0$ dostaneme tzv. **Adamsovy formule**.

5.6.1. *Explicitní Adamsovy formule.* Označme $f_i = f(x_i, y_i) = y'(x_i) = y'_i$. Použijeme Newtonův vzorec pro interpolaci vpřed, $f(x,y(x)) = L_{m,k}(x) + R_{m,k}(x)$, kde

$$L_{m,k}(x) = f_m + tf^1_{m-\frac{1}{2}} + \frac{t(t+1)}{2!}f^2_{m-1} + \cdots + \frac{t(t+1)\cdots(t+k-1)}{k!}f^k_{m-\frac{k}{2}},$$

$$R_{m,k} = \frac{(x-x_m)(x-x_{m-1})\cdots(x-x_{m-k})}{(k+1)!}\frac{\mathrm{d}^{k+1}}{\mathrm{d}x^{k+1}}f(\xi,y(\xi)) =$$
$$= h^{k+1}\frac{t(t+1)\cdots(t+k)}{(k+1)!}\frac{\mathrm{d}^{k+1}}{\mathrm{d}x^{k+1}}f(\xi,y(\xi)).$$

Po dosazení do (73) máme

$$\underbrace{y_{m+1} = y_m + \int\limits_{x_m}^{x_{m+1}} L_{m,k}(x)\mathrm{d}x}_{\text{přibližný vzorec pro výpočet } y_{m+1}} + \underbrace{\int\limits_{x_m}^{x_{m+1}} R_{m,k}(x)\mathrm{d}x}_{\text{chyba v jednom kroku}},$$

po substituci $x = x_m + th$

$$y_{m+1} = y_m + h\int\limits_0^1 \left[f_m + tf^1_{m-\frac{1}{2}} + \cdots + \frac{t(t+1)\cdots(t+k-1)}{k!}f^k_{m-\frac{k}{2}}\right]\mathrm{d}t,$$

$$y_{m+1} = y_m + h[f_m + a_1 f^2_{m-\frac{1}{2}} + \cdots + a_k f^k_{m-\frac{k}{2}}] + l_{m,k},$$

kde

$$a_i = \int\limits_0^1 \frac{t(t+1)\cdots(t+i-1)}{i!}\mathrm{d}t.$$

Některá a:

$$a_1 = \int\limits_0^1 t\mathrm{d}t = \frac{1}{2}, a_2 = \int\limits_0^1 \frac{t(t+1)}{2}\mathrm{d}t = \left[\frac{t^3}{6} + \frac{t^2}{4}\right]_0^1 = \frac{5}{12},\ a_3 = \frac{3}{8},\ a_4 = \frac{251}{720},$$
$$a_5 = \frac{95}{288},\ a_6 = \frac{19087}{60480},\ a_7 = \frac{5275}{17280},\ a_8 = \frac{1070017}{3628800}.$$

Užití Adamsových vzorců:

$$f^k_i = f_{i+\frac{k}{2}} - \binom{k}{1}f_{i+\frac{k}{2}-1} + \binom{k}{2}f_{i+\frac{k}{2}-2} - \cdots + (-1)^k\binom{k}{k}f_{i-\frac{k}{2}}$$

$$y_{m+1} \doteq y_m + h\left[y'_m + \frac{1}{2}(y'_m - y'_{m-1}) + \frac{5}{12}(y'_m - 2y'_{m-1} + y'_{m-2}) + \right.$$
$$\left. + \frac{3}{8}(y'_m - 3y'_{m-1} + 3y'_{m-2} - y'_{m-3}) \cdots \right]$$

$$k = 0: \ y_{m+1} \doteq y_m + hy'_m$$
$$k = 1: \ y_{m+1} \doteq y_m + \frac{h}{2}[3y'_m - y_{m-1}]$$
$$k = 2: \ y_{m+1} \doteq y_m + \frac{h}{12}[23y'_m - 16y'_{m-1} + 5y'_{m-2}]$$
$$k = 3: \ y_{m+1} \doteq y_m + \frac{h}{24}[55y'_m - 59y'_{m-1} + 37y'_{m-2} - 9y'_{m-3}].$$

Chyba $l_{m,k}$ bude

$$l_{m,k} = \int_{x_m}^{x_{m+1}} R_{m,k}(x)\mathrm{d}x = h^{k+2}\int_0^1 \frac{t(t+1)\cdots(t+k)}{(k+1)!}\frac{\mathrm{d}^{k+1}}{\mathrm{d}x^{k+1}}f(\xi, y(\xi))\mathrm{d}t =$$
$$= h^{k+2}y^{(k+2)}(\eta)a_{k+2}.$$

Zkráceně $|l_{m+k}| \leq h^{k+2}a_{k+1}M_{k+2}$.

5.6.2. *Implicitní Adamsovy formule.* Opět použijeme vzorec pro interpolaci vpřed, $f(x, y(x)) = L_{m,k}(x) + R_{m,k}(x)$,

$$L_{m,k}(x) = f_{m+1} + tf^1_{m+\frac{1}{2}} + \frac{t(t+1)}{2!}f^2_m + \cdots + \frac{t(t+1)\cdots(t+k)}{(k+1)!}f^{k+1}_{m-\frac{k-1}{2}},$$

$$R_{m,k}(x)h^{k+2}\frac{t(t+1)\cdots(t+k+1)}{(k+2)!}\frac{\mathrm{d}^{k+1}}{\mathrm{d}x^{k+2}}f(\xi, y(\xi)).$$

Dosadíme do (73),

$$y_{m+1} = y_m + \int_{x_m}^{x_{m+1}} L_{m,k}(x)\mathrm{d}x + \int_{x_m}^{x_{m+1}} R_{m,k}(x)\mathrm{d}x.$$

Zavedeme substituci,

$$y_{m+1} = y_m + \int_{-1}^{0} L_{m,k}(x)\mathrm{d}t + l_{m,k} =$$
$$= y_m + h\left[f_{m+1} + b_1 f^1_{m+\frac{1}{2}} + b_2 f^2_m + \cdots + b_{k+1}f_{m-\frac{k-1}{2}k+1}\right] + l_{m,k},$$

kde

$$b_i = \int_{-1}^{0} \frac{t(t+1)\cdots(t+i-1)}{i!}\mathrm{d}t.$$

Uvedeme některá b:

$$b_1 = \int_{-1}^{0} t\mathrm{d}t = -\frac{1}{2}, \ b_2 = -\frac{1}{12}, \ b_3 = -\frac{1}{24}, b_4 = -\frac{13}{720},$$
$$b_5 = -\frac{9}{160}, \ b_6 = -\frac{863}{60480}, b_7 = -\frac{275}{24135}, \ b_8 = -\frac{33953}{3628800}.$$

Konkrétní metody:

$$\begin{aligned}
&k=-1: \; y_{m+1} \doteq y_m + hy'_{m+1} \\
&k=0: \; y_{m+1} \doteq y_m + \frac{h}{2}[y'_{m+1} + y'_m] \\
&k=1: \; y_{m+1} \doteq y_m + \frac{h}{12}[5y'_{m+1} + 8y'_m - 1y'_{m-1}] \\
&k=2: \; y_{m+1} \doteq y_m + \frac{h}{24}[9y'_{m+1} + 19y'_m - 5y'_{m-1} + y'_{m-2}] \\
&k=3: \; y_{m+1} \doteq y_m + \frac{h}{720}[251y'_{m+1} + 646y'_m - 264y'_{m-1} + 106y'_{m-2} - 19y'_{m-3}]
\end{aligned}$$

Chyba aproximace je

$$\begin{aligned}
l_{m,k} = \int\limits_{x_m}^{x_{m+1}} R_{m,k}(x)\mathrm{d}x = h^{k+3} \int\limits_{-1}^{0} \frac{t(t+1)\cdots(t+k+1)}{(k+2)!} \frac{\mathrm{d}^{k+2}}{\mathrm{d}x^{k+2}} f(\xi, y(\xi))\mathrm{d}t = \\
= h^{k+3} y^{(k+3)}(\eta) b_{k+2},
\end{aligned}$$

celkem $|l_{n,k}| \leq h^{k+3} |b_{k+2}| M_{k+3}$.

Implicitní metody se používají v tzv. **metodách prediktor-korektor**. Nejprve se vypočte y_{m+1} pomocí explicitního vzorce, pak se získaná hodnota dosadí do pravé strany implicitního vzorce. Lze dokázat, že nová hodnota y_{m+1} je přesnější.

Definice 5.6. Obecná diferenční formule k-tého řádu pro řešení rovnice $y' = f(x,y)$ je formule tvaru

$$\sum_{i=0}^{k} \alpha_i y_{n+i} = h \sum_{i=0}^{k} \beta_i f(x_{n+i}, y_{n+i}), \tag{74}$$

kde $n \in \{0, 1, \ldots, N-k\}$ a $a_k \neq 0$. Pro $\beta_k = 0$ je to **explicitní formule**, pro $\beta_k \neq 0$ je to **implicitní formule**.

Definice 5.7. Diferenční formule (74) se nazývá **stupně** $p \in \mathbb{N}_0$, jestliže platí následujících $p+1$ podmínek:

$$\begin{aligned}
\sum_{i=0}^{k} \alpha_i = 0 \\
\sum_{i=0}^{k} \frac{i^s \alpha_i}{s!} = \sum_{i=0}^{k} \frac{i^{s-1}\beta_i}{(s-1)!} \quad \text{pro } s = 1, \ldots, p.
\end{aligned}$$

Známe-li hodnoty $y_n, y_{n+1}, \ldots, y_{n+k-1}$ přesně a vypočítáme-li y_{n+k}, je to s přesností $O(h^{p+1})$.

Důkaz.

$$\begin{aligned}
&\sum_{i=0}^{k}[\alpha_i y(x_n + ih) - h\beta_i f(x_n + ih, y(x_n + ih))] = \\
&\quad = \sum_{i=0}^{k}[\alpha_i y(x_n + ih) - h\beta_i y'(x_n + ih)] = c_{p+1} h^{p+1} y^{(p+1)}(x_n) + O(h^{p+1})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
y(x_n + ih) = y(x_n) + ihy'(x_n) + \frac{(ih)^2}{2!} y''(x_n) + \cdots + \frac{(ih)^{p+1}}{(p+1)!} y^{(p+1)}(x_n) + \\
+ \frac{(ih)^{p+2}}{(p+2)!} y^{(p+2)}(\xi_1)
\end{aligned}$$

$$y'(x_n + ih) = y'(x_n) + ihy''(x_n) + \cdots + \frac{(ih)^p}{p!} y^{(p+1)}(x_n) + \frac{(ih)^{p+1}}{(p+1)!} y^{(p+2)}(\xi_2)$$

□

Uvedené požadavky ještě nestačí k tomu, aby daly rozumnou metodu.

Příklad 5.3. Zkonstruujeme explicitní formuli 2. řádu, co nejpřesnější:

$$y_{n+2} + \alpha_1 y_{n+1} + \alpha_0 y_n = h(\beta_1 y'_{n+1} + \beta_0 y'_n).$$

Z podmínek pro stupeň formule máme

$$\begin{aligned} 1 + \alpha_1 + \alpha_0 &= 0 \\ 2 + \alpha_1 &= \beta_1 + \beta_2 \\ \frac{1}{2}(4 + \alpha_1) &= \beta_1 \\ \frac{1}{6}(8 + \alpha_1) &= \frac{1}{2}\beta_1. \end{aligned}$$

Víc podmínek si klást nelze, protože je u formule 2. řádu nelze splnit. Metoda má v jednom kroku přesnost $O(n^4)$. Řešení soustavy je $\alpha_1 = 4$, $\alpha_0 = -5$, $\beta_1 = 4$, $\beta_0 = 2$. Po dosazení

$$y_{n+2} = -4y_{n+1} + 5y_n + 4(4y'_{n+1} + 2y'_n).$$

Zkusíme řešit rovnici $y' = -y$, $y(0) = 1$. Víme, že řešení je $y(x) = e^{-x}$. Výše uvedená formule bude mít pro tuto rovnici tvar

$$y_{n+2} = -4(1 + h)y_{n+1} + (5 - 2h)y_n.$$

Zvolme krok $h = 0.1$, počáteční hodnotu $y_1 = e^{-0.1} \doteq 0.904837$. Dostaneme následující výsledky (IEEE Double, zaokrouhleno):

x	y_i	$(y_i - y(x_i)) \cdot 10^6$	y'_i	$(y'_i - y(x_i)) \cdot 10^6$
0.0	1.000000	0	1.000000	0
0.1	0.904837	0	0.904835	-2
0.2	0.818715	-15	0.818726	-4
0.3	0.740872	54	0.740812	-6
0.4	0.669997	-323	0.670313	-7
0.5	0.608200	1669	0.606522	-8
0.6	0.539907	-8905	0.548803	-9
0.7	0.543769	47183	0.496576	-10
0.8	0.198971	-250358	0.449319	-10
0.9	1.734618	1328048	0.406560	-10
1.0	-6.677259	-7045138	0.367869	-10
2.5			30.828821	30746736

Definice 5.8. Formule (74) se nazývá **stabilní podle Dahlquista**, jestliže všechny kořeny polynomu $\alpha_k\lambda^k + \alpha_{k-1}\lambda^{k-1} + \cdots + \alpha_0$ jsou v absolutní hodnotě menší nebo rovny 1 a ty, které jsou v absolutní hodnotě rovny 1, jsou jednoduché.

Lemma 5.1. Nechť $y(x)$ je řešení rovnice $y' = f(x, y)$ v intervalu $\langle x_0, a\rangle$, nechť f je definována, spojitá a lipschitzovská vzhledem k y s konstantou M na $\langle x_0, a\rangle \times \langle -\infty, +\infty\rangle$. Pak pro každé celé n: $0 \le n \le N$ označme $u_n = y(x_n) - \lambda f(x_n, y(x_n))$, kde λ je libovolně zvolená hodnota taková, že $|\lambda|\, M < 1$.

Rovnice $z - \lambda f(x_n, z) = \tilde{u}_n$ má jediné řešení $z = \tilde{y}_n$ a platí

$$|\tilde{y}_n - y_n| \le \frac{1}{1 - |\lambda|\, M}\, |\tilde{u}_n - u_n|\,.$$

Důkaz. Zavedeme zobrazení $F(z) = \lambda f(x_n, z) + \tilde{u}_n$ $\mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$, dokážeme, že $F(z)$ je kontrahující, tedy $F(z) = z$ má právě jedno řešení. Protože platí

$$|F(z) - F(y)| = |\lambda|\, |f(x, z) - f(x, y)| \le M\, |\lambda|\, |z - y|$$

a $M\,|\lambda| < 1$, je $F(x)$ kontrahující a výše uvedená rovnice má jediné řešení. Dále platí

$$|\tilde{y}_n - y_n| = |\lambda f(x_n, \tilde{y}_n) + \tilde{u}_n - \lambda f(x_n, y_n) - u_n| \le |\tilde{u}_n - u_n| + |\lambda|\, M\, |\tilde{y}_n - y_n|\,,$$

z toho po úpravě

$$|\tilde{y}_n - y_n| \le \frac{1}{1 - |\lambda|\, M} \, |\tilde{u}_n - u_n| \, .$$

□

Lemma 5.2. Nechť je dán polynom

$$\varrho(t) = \sum_{i=0}^{k} \alpha_i t^i$$

a matice

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ 0 & 0 & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \\ -\frac{\alpha_0}{\alpha_k} & -\frac{\alpha_0}{\alpha_k} & & & -\frac{\alpha_{k-1}}{\alpha_k} \end{pmatrix}.$$

Zřejmě $\varrho(t)$ je násobkem charakteristického polynomu matice $\mathbf{A}$. Nechť pro každý kořen t_i polynomu $\varrho(t)$ platí $|t_i| \le 1$ a nechť ty kořeny, pro které $|t_i| = 1$, jsou jednoduché.

Zvolme nějakou maticovou normu. Pak existuje konstanta G, která závisí pouze na koeficientech $\varrho(t)$ tak, že platí $\|\mathbf{A}^n\| \le G$ pro $n \in \mathbb{N}$.

Jestliže pro všechny kořeny $\varrho(t)$ platí $|t_i| < 1$, pak existují konstanty G_1 a $0 < \gamma < 1$ tak, že $\|\mathbf{A}^n\| \le G_1 \gamma^n$ pro $n \in \mathbb{N}$.

Důkaz. $\mathbf{A}$ je regulární, tudíž ji lze zapsat jako

$$\mathbf{A} = \mathbf{T}^{-1} \begin{pmatrix} J_1 & & \\ & J_2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix} \mathbf{T},$$

$$\mathbf{A}^n = \mathbf{T}^{-1} \begin{pmatrix} J_1^n & & \\ & J_2^n & \\ & & \ddots \end{pmatrix} \mathbf{T}.$$

Pro maximovou normu platí $\|\mathbf{A}^n\|_{\mathrm{I}} \le \left\|\mathbf{T}^{-1}\right\|_{\mathrm{I}} \tilde{G} \, \|\mathbf{T}\|_{\mathrm{I}} \le \tilde{\tilde{G}}$, neboť vlastní čísla jsou buď menší než 1, v tom případě jsou prvky J_i^n k nule, vlastní číslo 1 může být pouze jednonásobné, v tom případě ale $J = (1)$, takže J_i^n jsou omezeny konstantou. Pro jiné normy to platí díky topologické ekvivalenci.

Je-li $\varrho(\mathbf{A}) < 1$, pak existuje $\varepsilon > 0$ takové, že i $\varrho(\mathbf{A}) + \varepsilon < 1$. Pak

$$\mathbf{A} = (\varrho(\mathbf{A}) + \varepsilon)\mathbf{T}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{1}{\varrho(\mathbf{A})+\varepsilon} J_1 & & \\ & \frac{1}{\varrho(\mathbf{A})+\varepsilon} J_2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix} \frac{1}{\varrho(\mathbf{A}) + \varepsilon} T$$

a

$$\|\mathbf{A}^n\| \le \left\|\mathbf{T}^{-1}\right\| \left\| \begin{matrix} \left(\frac{1}{\varrho(\mathbf{A})+\varepsilon} J_1\right)^n & & \\ & \left(\frac{1}{\varrho(\mathbf{A})+\varepsilon} J_2\right)^n & \\ & & \ddots \end{matrix} \right\| \|\mathbf{T}\| \, (\varrho(\mathbf{A}) + \varepsilon)^n.$$

□

Lemma 5.3. Nechť $\varphi_k, \psi_k, \chi_k$ jsou konečné posloupnosti čísel pro $k = 0, 1, \ldots, n$, $\chi_k \ge 0$. Nechť

$$\varphi_k \le \psi_k + \sum_{i=0}^{k-1} \chi_i \varphi_i \quad \text{pro } k = 0, 1, \ldots, n.$$

Potom platí

$$\varphi_n \le \psi_n + \sum_{i=0}^{n-1} \chi_i \psi_i \prod_{j=i+1}^{n-1} (1 + \chi_j).$$

Důkaz. Zavedeme další posloupnost

$$\Phi_k = \psi_k + \sum_{i=0}^{k-1} \chi_i \Phi_i,$$

$\Phi_0 = \psi_0$. Indukcí dokážeme, že $\varphi_k \leq \Phi_k$. Pro $k = 0$ to z definice platí, pokud to platí až do $k - 1$, je

$$\sum_{i=0}^{k-1} \chi_i \varphi_i \leq \sum_{i=0}^{k-1} \chi_i \Phi_i,$$

neboť $\chi_i \geq 0$, což bylo dokázat.

Dále dokážeme, že

$$\Phi_n = \psi_n + \sum_{i=0}^{n-1} \chi_i \psi_i \prod_{j=i+1}^{n-1} (1 + \chi_j).$$

Pro $k = 0$ to opět z definice platí, předpokládejme platnost až do $k - 1$. Z definice je

$$\begin{aligned}
\Phi_k &= \psi_k + \chi_0 \Phi_0 + \chi_1 \Phi_1 + \cdots + \chi_{k-1} \Phi_{k-1} = \\
&= \psi_k + \chi_0 \psi_0 + \\
&\quad + \chi_1 [\psi_1 + \chi_0 \psi_0] + \\
&\quad + \chi_2 [\psi_2 + \chi_0 \psi_0 (1 + \chi_1) + \chi_1 \psi_1] + \\
&\quad + \chi_3 [\psi_3 + \chi_0 \psi_0 (1 + \chi_1)(1 + \chi_2) + \chi_1 \psi_1 (1 + \chi_2) + \chi_2 \psi_2] + \\
&\quad + \chi_4 [\psi_4 + \chi_0 \psi_0 (1 + \chi_1)(1 + \chi_2)(1 + \chi_3) + \chi_1 \psi_1 (1 + \chi_2)(1 + \chi_3) + \\
&\quad\quad + \chi_2 \psi_2 (1 + \chi_3) + \chi_3 \varphi_3] + \\
&\quad + \chi_{k-1} [\psi_{k-1} + \chi_0 \psi_0 (1 + \chi_1)(1 + \chi_2) \cdots (1 + \chi_{k-1}) + \\
&\quad\quad + \chi_1 \psi_1 (1 + \chi_2) \cdots (1 + \chi_{k-1}) + \cdots] = \\
&= \psi_k + \chi_0 \psi_0 [1 + \chi_1 + \chi_2 (1 + \chi_1) + \chi_3 (1 + \chi_1)(1 + \chi_2) + \\
&\quad\quad + \chi_4 (1 + \chi_1)(1 + \chi_2)(1 + \chi_3) + \cdots + \chi_0 \psi_0 (1 + \chi_1) \cdots (1 + \chi_{k-1})] = \cdots
\end{aligned}$$

Budeme vytýkat $(1 + \chi_1)$, $(1 + \chi_2)$ až $(1 + \chi_{k-1})$. □

Věta 5.4. Nechť pravá strana diferenciální rovnice $y' = f(x, y)$ je definována a spojitá v intervalu $x_0 \leq x \leq a$, $-\infty < y < +\infty$ a splňuje vzhledem k y Lipschitzovu podmínku s konstantou M. Nechť $y(x)$ je řešení rovnice na intervalu $\langle x_0, a\rangle$ a nechť má spojité derivace do řádu $p+1$, kde $p \geq 1$. Nechť uvažovaná diferenční formule řádu k je stupně p a stabilní podle Dahlquista. Nechť $y_0, y_1, \ldots, y_n$ jsou hodnoty vypočítané podle vzorců

$$\sum_{i=0}^{k} \alpha_i y_{n+i} = h \sum_{i=0}^{k} \beta_i f(x_{n+i}, y_{n+i}) + \delta_n \text{ pro } n = 0, 1, \ldots, N - k$$

a y_i pro $i = 0, 1, \ldots, k - 1$ je dáno. Pak (pro dostatečně malá h) platí

$$|y_n - y(x_n)| \leq \frac{G}{1 - |\lambda|\, M} \left[(1 + |\lambda|\, M)\vartheta + \frac{|x_n - x_0|}{|\alpha_n|} \left(\frac{\delta}{h} + K h^p \right) \right] e^{G\tilde{M}(x_n - x_0)},$$

kde $n = 0, 1, \ldots, N$,

$$\vartheta = \max_{i=0,1,\ldots,k-1} |y_i - y(x_i)|\,, \quad \delta = \max_{i=0,1,\ldots,N-k} |\delta_i|\,, \quad \lambda = h\frac{\beta_k}{\alpha_k}$$

a $\tilde{G}$, $\tilde{M}$, K jsou konstanty, které závisí jen na koeficientech formule a na diferenciální rovnici a jsou nezávislé na h pro dostatečně malá h.

Důkaz. Označme $y_n - y(x_n) = r_n$. Odečtením vztahů

$$\sum_{i=0}^{k} \alpha_i y_{n+i} = h \sum_{i=0}^{k} \beta_i f(x_{n+i}, y_{n+i}) + \delta_n$$

$$\sum_{i=0}^{k} \alpha_i y(x_{n+i}) = h \sum_{i=0}^{k} \beta_i f(x_{n+i}, y(x_{n+i})) - l_n,$$

přičemž $l_n \leq Kh^{p+1}$, dostaneme

$$\sum_{i=0}^{k} \alpha_i r_{n+i} = h \sum_{i=0}^{k} \beta_i [f(x_{n+i}, y_{n+i}) - f(x_{n+i}, y(x_{n+i}))] + \delta_n + l_n. \tag{75}$$

Označme $u_n = y(x_n) - \lambda f(x_n, y(x_n))$, $\tilde{u}_n = y_n - \lambda f(x_n, y_n)$. Podle lemmatu 5.1 se dá odhadnout

$$|r_n| \leq \frac{1}{1 - |\lambda| M} |\tilde{u}_n - u_n| .$$

Místo r_n budeme dále odhadovat $\tilde{u}_n - u_n$. Platí, že

$$\sum_{i=0}^{k} \alpha_i (\tilde{u}_{n+i} - u_{n+i}) = \sum_{i=0}^{k} \alpha_i r_{n+i} - \lambda \sum_{i=0}^{k} \alpha_i [f(x_{n+i}, y_{n+i}) - f(x_{n+i}, y(x_{n+i}))] =$$

$$= h \sum_{i=0}^{k} (\beta_i - \frac{\beta_k}{\alpha_k} \alpha_i) [f(x_{n+i}, y_{n+i}) - f(x_{n+i}, y(x_{n+i}))] + \delta_n + l_n = q_n.$$

Pro $i = k$ dostaneme $\beta_k - \frac{\beta_k}{\alpha_k} \alpha_k = 0$, takže stačí sčítat od 0 do $k - 1$. Zavedeme vektory

$$\vec{u}^{(n)} = \begin{pmatrix} \tilde{u}_n - u_n \\ \tilde{u}_{n+1} - u_{n+1} \\ \vdots \\ \tilde{u}_{n+k-1} - u_{n+k-1} \end{pmatrix}, \quad \vec{q}^{(n)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \frac{q_n}{\alpha_k} \end{pmatrix}$$

a matici

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ 0 & 0 & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \\ -\frac{\alpha_0}{\alpha_k} & -\frac{\alpha_1}{\alpha_k} & & \cdots & -\frac{\alpha_{k-1}}{\alpha_k} \end{pmatrix}.$$

Potom platí, že $\vec{u}^{(n+1)} = A\vec{u}^{(n)} + \vec{q}^{(n)}$. Až do $k - 1$-té složky je to jasné, pro poslední složku to vyplývá z předchozí rovnosti.

Dále je

$$\vec{u}^{(n)} = \mathbf{A}\vec{u}^{(n-1)} + \vec{q}^{(n-1)} = \mathbf{A}^2\vec{u}^{(n-2)} + \mathbf{A}\vec{q}^{(n-2)} + \vec{q}^{(n-1)},$$

$$\vec{u}^{(n)} = \mathbf{A}^n\vec{u}^{(0)} + \sum_{i=0}^{n-1} \mathbf{A}^{n-1-i}\vec{q}^{(i)}.$$

Pomocí vektoru $\vec{u}^{(n)}$ provedeme odhad r_{n+i} nezávislý na i:

$$|r_{n+i}| \leq \frac{1}{1 - |\lambda| M} |\tilde{u}_{n+i} - u_{n+i}| \leq \frac{1}{1 - |\lambda| M} \left\| \vec{u}^{(n)} \right\|_{\mathrm{I}},$$

neboť pro $i = 0, \ldots, k - 1$ jsou to složky $\vec{u}^{(n)}$.

$$\left\| \vec{q}^{(n)} \right\|_{\mathrm{I}} = \frac{1}{|\alpha_k|} |q_n| \leq \frac{Mh}{|\alpha_k|} \sum_{i=0}^{k-1} \left| \beta_i - \frac{\beta_k}{\alpha_k} \alpha_i \right| |r_{n+i}| + \frac{1}{|\alpha_k|} \left(\delta + Kh^{p+1} \right) \leq$$

$$\leq h \underbrace{\left[\frac{M}{|\alpha_k|} \sum_{i=0}^{k-1} \left| \beta_i - \frac{\beta_k}{\alpha_k} \alpha_i \right| \right] \frac{1}{1 - |\lambda| M}}_{\tilde{M}} \left\| \vec{u}^{(n)} \right\|_{\mathrm{I}} + \frac{1}{|\alpha_k|} (\delta + Kh^{p+1})$$

$$\left\| \vec{q}^{(n)} \right\|_{\mathrm{I}} \leq \tilde{M}h \left\| \vec{u}^{(n)} \right\|_{\mathrm{I}} + \frac{1}{\alpha_k} (\delta + Kh^{p+1})$$

Protože podle lemmatu 5.2 mají všechny mocniny $\mathbf{A}$ společný odhad G, platí

$$\left\|\vec{u}^{(n)}\right\|_{\mathrm{I}} \leq \|\mathbf{A}^n\|_{\mathrm{I}} \left\|\vec{u}^{(0)}\right\|_{\mathrm{I}} + \tilde{M}h \sum_{i=0}^{n-1} \left\|\mathbf{A}^{n-i-1}\right\|_{\mathrm{I}} \left\|\vec{u}^{(i)}\right\|_{\mathrm{I}} +$$
$$+ \frac{\delta + Kh^{p+1}}{|\alpha_k|} \sum_{i=0}^{n-1} \left\|\mathbf{A}^{n-i-1}\right\|_{\mathrm{I}} \leq$$
$$\leq \underbrace{G\tilde{M}h}_{\chi_i} \sum_{i=0}^{n-1} \underbrace{\left\|\vec{u}^{(i)}\right\|_{\mathrm{I}}}_{\varphi_i} + \underbrace{Gn\frac{\delta + Kh^{p+1}}{|\alpha_k|} + G\left\|\vec{u}^{(0)}\right\|_{\mathrm{I}}}_{\psi_n}.$$

Podle lemmatu 5.3 z toho, že platí

$$\varphi_k \leq \psi_k + \sum_{i=0}^{k-1} \chi_i \varphi_i,$$

vyplývá, že

$$\varphi_n \leq \psi_n + \sum_{i=0}^{n-1} \chi_i \psi_i \prod_{j=i+1}^{n-1} (1 + \chi_j)$$

$$\left\|\vec{u}^{(n)}\right\|_{\mathrm{I}} \leq G\tilde{M}h \sum_{i=0}^{n-1} \left[Gi\frac{\delta + Kh^{p+1}}{|\alpha_k|} + G\left\|\vec{u}^{(0)}\right\|_{\mathrm{I}}\right] (1 + G\tilde{M}h)^{n-i-1} +$$
$$+ Gn\frac{\delta + Kh^{p+1}}{|\alpha_k|} + G\left\|\vec{u}^{(0)}\right\|_{\mathrm{I}}$$

$$\left\|\vec{u}^{(n)}\right\|_{\mathrm{I}} \leq G\left\|\vec{u}^{(0)}\right\|_{\mathrm{I}} \left[1 + G\tilde{M}h \sum_{i=0}^{n-1} (1 + G\tilde{M}h)^{n-i-1}\right] +$$
$$+ \frac{\delta + Kh^{p+1}}{|\alpha_k|} \left[Gn + G\tilde{M}h \sum_{i=0}^{n-1} Gi(1 + G\tilde{M}h)^{n-i-1}\right]$$

Protože

$$\sum_{i=0}^{n-1} iq^{n-1-i} = \sum_{j=1}^{n-1} \sum_{i=0}^{j-1} q^i,$$

je druhá hranatá závorka rovna

$$Gn + G\tilde{M}h \sum_{j=1}^{n-1} G\frac{(1 + G\tilde{M}h)^j - 1}{G\tilde{M}h} = Gn + G\sum_{j=1}^{n-1} (1 + G\tilde{M}h)^j - G(n-1) =$$
$$= G + G(1 + G\tilde{M}h)\frac{(1 + G\tilde{M}h)^{n-1} - 1}{G\tilde{M}h} = \frac{1}{\tilde{M}h}[(1 + G\tilde{M}h)^n - 1].$$

$$\left\|\vec{u}^{(n)}\right\|_{\mathrm{I}} \leq G\left\|\vec{u}^{(0)}\right\|_{\mathrm{I}} [1 + (1 + G\tilde{M}h)^n - 1] + \frac{\delta + Kh^{p+1}}{|\alpha_k|} \frac{1}{\tilde{M}h}[(1 + G\tilde{M}h)^n - 1],$$

to lze dále upravit:

$$\left\|\vec{u}^{(n)}\right\|_{\mathrm{I}} \leq G\left\|\vec{u}^{(0)}\right\|_{\mathrm{I}} (1 + G\tilde{M}h)^n + \frac{1}{|\alpha_k|\,\tilde{M}} \left(\frac{\delta}{h} + Kh^p\right) [(1 + G\tilde{M}h)^n - 1]$$

Využijeme nyní toho, že $1 + G\tilde{M}h < e^{G\tilde{M}h}$, tedy $(1 + G\tilde{M}h)^n < e^{nG\tilde{M}h} = e^{G\tilde{M}(x_n - x_0)}$ a dále $e^{G\tilde{M}(x_n - x_0)} - 1 < G\tilde{M}(x_n - x_0)e^{G\tilde{M}(x_n - x_0)}$. To první je jasné, to druhé vyplývá třeba z Taylorova rozvoje e^x.

$$\left\|\vec{u}^{(n)}\right\|_{\mathrm{I}} \leq G\left\|\vec{u}^{(0)}\right\|_{\mathrm{I}} e^{G\tilde{M}(x_n - x_0)} + \frac{G(x_n - x_0)}{|\alpha_k|} \left(\frac{\delta}{h} + Kh^p\right) e^{G\tilde{M}(x_n - x_0)}$$

Po vynásobení $1/(1 - |\lambda|\, M)$, dostáváme hledanou nerovnost. Stačí si uvědomit, že

$$\begin{aligned}|\tilde{u}_i - u_i| &= |y_i - y(x_i) - \lambda[f(x_i, y_i) - f(x_i, y(x_i))]| \leq \\ &= |y_i - y(x_i)| + |\lambda|\, M\, |y_i - y(x_i)| = (1 + |\lambda|\, M)\, |y_i - y(x_i)| = \\ &= (1 + |\lambda|\, M)\vartheta.\end{aligned}$$

□

Poznámka 5.4. δ_n je zaokrouhlovací chyba počítače a ani počáteční podmínky nejsou dány přesně. Opět nelze jít s h libovolně nízko, pro další zvýšení přesnosti lze použít jedině metodu vyššího řádu.