Numerička analiza

24. predavanje

Autor: Nela Bosner & Tina Bosner

Predavač: Tina Bosner

tinab@math.hr

web.math.hr/~nela/nad.html

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Numeričko rješavanje diferencijalnih jednadžbi:
  - Inicijalni problem za obične diferencijalne jednadžbe.
    - Eulerova metoda.
    - Runge–Kutta metode.
    - Implicitna trapezna metoda
    - Apsolutna stabilnost i krute jednadžbe
    - Linearne višekoračne metode

Inicijalni problem za obične diferencijalne jednadžbe

Obične diferencijalne jednadžbe

Rješavanje diferencijalnih jednadžbi je problem koji se često javlja u raznim primjenama.

- Dok je nekim jednadžbama rješenje moguće eksplicitno izraziti pomoću poznatih funkcija, daleko su brojnije one jednadžbe za koje ne možemo napisati egzaktno rješenje.
- Stoga takve jednadžbe rješavamo numerički.
- Ponekad je čak brže i jednostavnije izračunati rješenje numeričkim putem umjesto dugotrajnim analitičkim postupkom.

Opisat ćemo nekoliko najčešćih numeričkih metoda za rješavanje običnih diferencijalnih jednadžbi (skraćeno ODJ).

Sustav običnih diferencijalnih jednadžbi

Rješavat ćemo obične diferencijalne jednadžbe oblika

$$y'(x) = f(x, y(x)), \quad y \in \langle a, b \rangle,$$

- uz zadani početni uvjet $y(a) = y_0$ — inicijalni problem
- ili uz zadani rubni uvjet $r(y(a), y(b)) = 0$, gdje je r neka zadana funkcija — rubni problem.

Sustav običnih diferencijalnih jednadžbi je općenitiji problem:

$$\begin{aligned} y_1' &= f_1(x, y_1, \ldots, y_n), \\ y_2' &= f_2(x, y_1, \ldots, y_n), \\ &\vdots \\ y_n' &= f_n(x, y_1, \ldots, y_n). \end{aligned}$$

Sustav običnih diferencijalnih jednadžbi (nast.)

Međutim, koristeći vektorsku notaciju

$$\mathbf{y} = [y_1, \ldots, y_n]^T \quad \text{i} \quad \mathbf{f} = [f_1, \ldots, f_n]^T$$

sustav pišemo u obliku analognom jednoj jednadžbi:

$$\mathbf{y}'(x) = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}(x)),$$

te primijenjujemo iste numeričke metode kao za rješavanje diferencijalne jedne jednadžbe, vodeći računa o tome da se umjesto skalarnih funkcija y i f javljaju vektorske funkcije $\mathbf{y}$ i $\mathbf{f}$.

Diferencijalne jednadžbe višeg reda

Diferencijalne jednadžbe višeg reda

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

supstitucijama

$$y_1 = y, \quad y_2 = y', \quad \ldots, \quad y_n = y^{(n-1)}$$

svodimo na sustav jednadžbi prvog reda:

$$\begin{aligned}
y_1' &= y' = y_2, \\
y_2' &= y'' = y_3, \\
&\;\;\vdots \\
y_{n-1}' &= y^{(n-1)} = y_n, \\
y_n' &= y^{(n)} = f(x, y, y', y'', \ldots, y^{(n-1)}) = f(x, y_1, y_2, y_3, \ldots, y_n).
\end{aligned}$$

Diferencijalne jednadžbe višeg reda (nastavak)

I u ovom slučaju možemo koristiti metode razvijene za jednu diferencijalnu jednadžbu.

I za sustav diferencijalnih jednadžbi i za jednadžbu višeg reda razlikujemo inicijalni (početni ili Cauchyjev) problem i rubni problem.

Teorija inicijalnog problema za ODJ

Ovdje pretpostavljamo da je

$$y' = f(x, y)$$

sustav od n običnih diferencijalnih jednadžbi, $\| \ \|$ norma na $\mathbb{R}^n$, i $\|A\|$ odgovarajuća operatorska norma inducirana gornjom vektorskom normom.

Teorem. Neka je f neprekidna funkcija, definirana na pruzi

$$S = \{(x, y) \mid a \le x \le b,\ y \in \mathbb{R}^n\}, \quad a, b \text{ su konačne.}$$

Nadalje, pretpostavimo da postoji konstanta L takva da

$$\|f(x, y_1) - f(x, y_2)\| \le L\|y_1 - y_2\|$$

za sve $x \in [a, b]$ i za sve $y_1, y_2 \in \mathbb{R}^n$ ("Lipschitzov uvjet").

Teorija inicijalnog problema za ODJ (nastavak)

Tada za svaki $x_0 \in [a, b]$ i za svaki $y_0 \in \mathbb{R}^n$ postoji točno jedna funkcija $y(x)$ takva da je

- $y \in C^{(1)}[a, b]$,
- $y'(x) = f(x, y(x))$ za $x \in [a, b]$,
- $y(x_0) = y_0$.

Iz teorema srednje vrijednosti slijedi da je Lipschitzov uvjet zadovoljen ako parcijalne derivacije $\partial f_i / \partial y_j$, $i, j = 1, \ldots, n$ postoje na pruzi S, neprekidne su i ograničene na S. Zato sa

$$F_N(a, b)$$

definiramo skup funkcija f za koje sve parcijalne derivacije do uključivo reda N postoje na pruzi S, neprekidne su i ograničene na S. (Za gornji teorem je $f \in F_1(a, b)$.)

Teorija inicijalnog problema za ODJ (nastavak)

Sljedeći teorem govori da rješenje inicijalnog problema ovisi neprekidno o početnom uvjetu.

Teorem. Neka je $f : S \to \mathbb{R}^n$ neprekidna na pruzi $S = \{(x,y) \mid a \leq x \leq b,\ y \in \mathbb{R}^n\}$ i zadovoljava Lipschitzov uvjet

$$\|f(x,y_1) - f(x,y_2)\| \leq L\|y_1 - y_2\|$$

za sve $(x, y_i) \in S$, $i = 1, 2$. Neka je $x_0 \in [a,b]$. Tada za rješenje $y(x;s)$ inicijalnog problema

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

vrijedi

$$\|y(x;s_1) - y(x;s_2)\| \leq e^{L|x-x_0|}\|s_1 - s_2\|$$

za sve $x \in [a,b]$. ■

Numeričko rješavanje inicijalnog problema

U metodama koje ćemo opisati ne računamo izraz za funkciju $y(x)$ (to čak u općenitom slučaju nije niti moguće), nego računamo aproksimativne vrijednosti $y_i \approx y(x_i)$ za egzaktne vrijednosti od y izvrijednjene u diskretnim točkama x_i, $i = 0, 1, \ldots, n$.

- Diskretne točke x_i su često ekvidistantne: $x_i = x_0 + ih$, $h = (b - a)/n$.
- Zbog toga i aproksimacije rješenja y_i ovise o koraku h.
- Važan problem za svaku metodu je da li aproksimacija za točku x konvergira ka $y(x)$ kada $n \to \infty$, tj. $h \to 0$, i kako brzo.

Eulerova metoda

Ideja Eulerove metode

Eulerova metoda je zasigurno najjednostavnija metoda za rješavanje inicijalnog problema za ODJ oblika

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

Metoda se zasniva na ideji da se y' u gornjoj jednadžbi zamijeni s podijeljenom razlikom

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

pa rješenje diferencijalne jednadžbe zadovoljava

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

Izvod Eulerove metode

Zanemarivanjem kvadratnog člana u gornjem razvoju dobivamo aproksimaciju

$$y(x+h) \approx y(x) + hf(x, y(x)).$$

Ova formula je točnija što je h manji, tako da za $h = b - a$ aproksimacija

$$y(b) \approx y(a) + (b-a)f(a, y(a)) = y_0 + hf(a, y_0)$$

može biti jako neprecizna. Stoga interval $[a, b]$ podijelimo na n jednakih dijelova te stavimo

$$h = \frac{b-a}{n}, \quad x_i = a + ih, \quad i = 0, \ldots, n.$$

Korištenjem gornjeg izraza za aproksimaciju, prvo aproksimiramo rješenje u točki $x_1 = a + h$

$$y(x_1) \approx y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0).$$

Izvod Eulerove metode (nastavak)

Dobivenu aproksimaciju y_1 iskoristimo za računanje aproksimacije rješenja u točki $x_2 = x_1 + h$:

$$y_2 = y_1 + hf(x_1, y_1),$$

te postupak ponavljamo sve dok ne dođemo do kraja intervala $b = x_n$.

Opisani postupak nazivamo Eulerova metoda, i možemo ga kraće zapisati rekurzijom

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i), \quad i = 1, \ldots, n,$$

gdje je početni uvjet y_0 zadan kao inicijalni uvjet diferencijalne jednadžbe. Dobivene vrijednosti y_i su aproksimacije rješenja diferencijalne jednadžbe u točkama x_i.

Kvaliteta Eulerove metode

Postavlja se pitanje: kako dobro egzaktno rješenje diferencijalne jednadžbe $y(x)$ zadovoljava jednadžbu Eulerove metode, tj. koji je odnos između

$$y(x+h) \quad \text{i} \quad y(x) + hf(x, y(x)),$$

odnosno praktičije je gledati kako se ponaša

$$\frac{y(x+h) - y(x)}{h} - f(x, y(x)).$$

Pretpostavimo da f ima dovoljno neprekidnih parcijalnih derivacija. Rješenje diferencijalne jednadžbe y razvijmo u Taylorov red oko točke x:

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2} y''(x) + \cdots + \frac{h^p}{p!} y^{(p)}(x + \theta h),$$

za $0 < \theta < 1$.

Kvaliteta Eulerove metode (nastavak)

Zbog toga što je $y'(x) = f(x, y(x))$, i uz oznake za parcijalne derivacije $f_x = \frac{\partial f}{\partial x}$ i $f_{xy} = \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$, imamo

$$\begin{aligned}
y''(x) &= \frac{d}{dx} f(x, y(x)) = f_x(x, y(x)) + f_y(x, y(x)) y'(x) \\
&= f_x(x, y(x)) + f_y(x, y(x)) f(x, y(x)), \\
y'''(x) &= f_{xx}(x, y(x)) + 2 f_{xy}(x, y(x)) f(x, y(x)) + \\
&\quad + f_{yy}(x, y(x)) f(x, y(x))^2 + f_y(x, y(x)) y''(x),
\end{aligned}$$

i tako dalje. Zbog toga je

$$\begin{aligned}
\frac{y(x+h) - y(x)}{h} &= y'(x) + \frac{h}{2} y''(x) + \cdots + \frac{h^{p-1}}{p!} y^{(p)}(x + \theta h) \\
&= f(x, y(x)) + \frac{h}{2} [f_x(x, y(x)) + f_y(x, y(x)) f(x, y(x))] + \cdots
\end{aligned}$$

Kvaliteta Eulerove metode (nastavak)

Možemo zaključiti da je za Eulerovu metodu

$$\frac{y(x+h) - y(x)}{h} - f(x, y(x)) = O(h),$$

pa za nju kažemo da je metoda reda 1, jer se u gornjoj ocjeni pojavljuje prva potencija od h. To i ujedno znači da Eulerova metoda nije jako točna i sporo konvergira prema rješenju.

Kasnije ćemo vidjeti detaljnjiju definiciju ovog pojma i vezu sa brzinom globalne konvergencije.

Runge–Kutta metode

Ideja jednokoračnih metoda

Koristeći sličnu ideju kao u Eulerovoj metodi, diferencijalnu jednadžbu

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

na intervalu $[a, b]$, možemo rješavati tako da podijelimo interval $[a, b]$ na n jednakih podintervala, označivši

$$h = \frac{b-a}{n}, \quad x_i = a + ih, \quad i = 0, \ldots, n.$$

Sada y_{i+1}, aproksimaciju rješenja u točki x_{i+1}, računamo iz y_i korištenjem aproksimacije oblika

$$y(x+h) \approx y(x) + h\Phi(x, y(x), h; f),$$

te dobivamo rekurziju:

$$y_{i+1} = y_i + h\Phi(x_i, y_i, h; f), \quad i = 0, \ldots, n.$$

Jednokoračne metode

Funkciju Φ nazivamo funkcija prirasta, a različit izbor te funkcije definira različite metode.

- Uočimo da je funkcija f iz diferencijalne jednadžbe parametar od Φ (tj. Φ zavisi o f).
- Tako je npr. u Eulerovoj metodi

$$\Phi(x, y, h; f) = f(x, y).$$

Metode gornjeg oblika zovemo jednokoračne metode (jer za aproksimaciju y_{i+1} koristimo samo vrijednost y_i u prethodnoj točki x_i, tj. u jednom koraku dobijemo y_{i+1} iz y_i).

Da bismo pojednostavili zapis, ubuduće ćemo f izostaviti kao argument funkcije Φ.

Lokalna pogreška diskretizacije

O odabiru funkcije Φ ovisi i točnost metode. Za očekivati je da ako izaberemo Φ tako da aproksimacija točnog rješenja $y(x+h)$

$$y(x+h) \approx y(x) + h\Phi(x, y(x), h; f),$$

bude što točnija, da će točnija biti i aproksimacija y_i za $y(x_i)$ dana rekurzijom

$$y_{i+1} = y_i + h\Phi(x_i, y_i, h; f), \quad i = 0, \ldots, n.$$

Pogrešku aproksimacije:

$$\tau(x; h) = \Delta(x; h) - \Phi(x, y(x), h),$$

gdje je $y(x)$ točno rješenje diferencijalne jednadžbe i

$$\Delta(x; h) = \frac{y(x+h) - y(x)}{h},$$

nazivamo lokalna pogreška diskretizacije.

Lokalna pogreška diskretizacije (nastavak)

Za razumne jednokoračne metode zahtjevat ćemo da je

$$\lim_{h\to 0} \tau(x;h) = 0.$$

U tom slučaju je

$$0 = \lim_{h\to 0} (\Delta(x;h) - \Phi(x,y(x),h)) = f(x,y) - \lim_{h\to 0} \Phi(x,y(x),h),$$

tj.

$$\lim_{h\to 0} \Phi(x,y(x),h) = f(x,y).$$

Konzistentnost jednokoračne metode

Definicija. Jednokoračnu metodu zovemo konzistentnom ako za svaki $f \in F_1(a,b)$, $x \in [a,b]$ i $y \in \mathbb{R}$ lokalna pogreška diskretizacije τ zadovoljava

$$\lim_{h \to 0} \tau(x;h) = 0.$$

Ukoliko je još $f \in F_p(a,b)$ i

$$\tau(x;h) = \mathcal{O}(h^p)$$

kažemo da je metoda reda p.

Što je veći p metoda je točnija.

Točnost jednokoračne metode

Pod točnošću metode podrazumijevamo ponašanje pogreške

$$y(x_i) - y_i.$$

- Zbog jednostavnosti promatrat ćemo pogrešku u fiksiranoj točki b.
- Ako je jednokoračna metoda reda p, tada se može pokazati (teorem kasnije)

  $$y(b) - y_n = \mathcal{O}(h^p).$$

  tj. $\lim_{n\to\infty}(y(b) - y_n) = 0$ za sve $x \in [a, b]$ i $f \in F_p(a, b)$, te kažemo da je jednokoračna metoda konvergentna.
- Uočimo da je $h = (b - a)/n$ te da je y_n uvijek (za svaki n) aproksimacija za $y(b)$.

Definicija Runge–Kutta metoda

Najpoznatije jednokoračne metode su svakako Runge–Kutta metode. Kod njih je funkcija Φ oblika

$$\Phi(x, y, h) = \sum_{j=1}^{r} \omega_j k_j(x, y, h),$$

a k_j su zadani s

$$k_j(x, y, h) = f\left(x + c_j h, y + h \sum_{l=1}^{r} a_{jl} k_l(x, y, h, f)\right), \quad j = 1, \ldots, r$$

Broj r zovemo broj stadija Runge–Kutta (RK) metode, i on označava koliko puta moramo računati funkciju f u svakom koraku.

Definicija Runge–Kutta metoda (nastavak)

Različit izbor koeficijenata ω_j, c_j i a_{jl} definira različite metode.

- Ovi koeficijenti se najčešće biraju tako da red metode bude što je moguće veći.
- Iz definicije vidimo da se k_j nalazi na lijevoj i na desnoj strani jednadžbe, tj. zadan je implicitno te govorimo o implicitnoj Runge–Kutta metodi.
- U praksi se najviše koriste metode gdje je $a_{jl} = 0$ za $l \geq j$. Tada k_j možemo izračunati preko $k_1, \ldots, k_{j-1}$, tj. funkcije k_j su zadane eksplicitno. Takve RK metode nazivamo eksplicitnima.
- Nadalje, obično se dodaje uvjet (objašnjenje kasnije)

$$\sum_{l=1}^{r} a_{jl} = c_j.$$

Odabir koeficijenata u Runge–Kutta metodi

Primjer odabira koeficijenata prikazat ćemo na RK metodi s dva stadija:

$$\Phi(x, y, h) = \omega_1 k_1(x, y, h) + \omega_2 k_2(x, y, h),$$

$$k_1(x, y, h) = f(x, y),$$

$$k_2(x, y, h) = f(x + ah, y + ahk_1).$$

Razvojem k_2 u Taylorov red po varijabli h dobivamo

$$\begin{aligned} k_2(x, y, h) = f + h(f_x a + f_y a f) + \\ + \frac{h^2}{2}(f_{xx}a^2 + 2f_{xy}a^2 f + f_{yy}a^2 f^2) + \mathcal{O}(h^3), \end{aligned}$$

gdje su f_x i f_y prve parcijalne derivacije funkcije $f = f(x, y)$ po x, odnosno y, a f_{xx}, f_{xy} i f_{yy} odgovarajuće druge parcijalne derivacije.

Odabir koeficijenata u Runge–Kutta metodi (n.)

Razvoj rješenja diferencijalne jednadžbe $y(x)$ ima oblik

$$\begin{aligned} y(x+h) = y(x) + hf + \frac{h^2}{2}(f_x + f_y f) + \\ + \frac{h^3}{6}[f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2 + f_y(f_x + f_y f)] + \mathcal{O}(h^4). \end{aligned}$$

Ovdje smo iskoristili da je $y(x)$ rješenje diferencijalne jednadžbe:

$$y'(x) = f(x, y) = f,$$

te pravila za deriviranje

$$\begin{aligned} y''(x) &= f_x + f_y f, \\ y'''(x) &= f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2 + f_y(f_x + f_y f). \end{aligned}$$

Odabir koeficijenata u Runge–Kutta metodi (n.)

Sada je lokalna pogreška diskretizacije jednaka

$$
\begin{aligned}
\frac{y(x+h)-y(x)}{h} - \Phi(x, y(x), h) = \\
&= \frac{y(x+h)-y(x)}{h} - (\omega_1 k_1(x,y,h) + \omega_2 k_2(x,y,h) \\
&= (1-\omega_1-\omega_2) f + h(f_x + f_y f)\left(\frac{1}{2} - \omega_2 a\right) \\
&\quad + h^2 \left[(f_{xx} + 2 f_{xy} f + f_{yy} f^2) \cdot \left(\frac{1}{6} - \frac{\omega_2 a^2}{2}\right) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{6} f_y (f_x + f_y f) \right] \\
&\quad + \mathcal{O}(h^3).
\end{aligned}
$$

Odabir koeficijenata u Runge–Kutta metodi (n.)

Da bi metoda bila reda 1 koeficijente treba odabrati tako da se poništi prvi član u gornjem razvoju:

$$1 - \omega_1 - \omega_2 = 0.$$

Ukoliko je zadovoljeno i

$$\frac{1}{2} - \omega_2 a = 0$$

metoda će biti reda 2. Uvođenjem slobodnog koeficijenta t rješenje ove dvije jednadžbe možemo napisati u obliku:

$$\omega_2 = t \neq 0, \quad \omega_1 = 1 - t, \quad a = \frac{1}{2t}.$$

Uočimo da t ne možemo odabrati tako da poništimo i član uz h^2 tako da metoda bude reda 3. Ukoliko je $\omega_2 = 0$, radi se o metodi s jednim stadijem, i to upravo o Eulerovoj metodi.

Runge–Kutta metode s 2 stadija

- Za $t = 1/2$ dobivamo Heunovu metodu:
$$\begin{aligned} \Phi &= \frac{1}{2}\,(k_1 + k_2), \\ k_1 &= f(x, y), \\ k_2 &= f(x + h, y + hk_1). \end{aligned}$$
- Za $t = 1$ se dobiva modificirana Eulerova metoda:
$$\Phi = f\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2}\,f(x, y)\right).$$

Runge–Kutta metode s 4 stadija

Najraširenije su metode sa četiri stadija. Odgovarajuće jednadžbe koje moraju zadovoljavati koeficijenti RK-4 metoda su:

$$
\begin{aligned}
\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4 &= 1, \\
\omega_2 c_2 + \omega_3 c_3 + \omega_4 c_4 &= \frac{1}{2}, \\
\omega_2 c_2^2 + \omega_3 c_3^2 + \omega_4 c_4^2 &= \frac{1}{3}, \\
\omega_3 c_2 a_{32} + \omega_4 (c_2 a_{42} + c_3 a_{43}) &= \frac{1}{6}, \\
\omega_2 c_2^3 + \omega_3 c_3^3 + \omega_4 c_4^3 &= \frac{1}{4}, \\
\omega_3 c_2^2 a_{32} + \omega_4 (c_2^2 a_{42} + c_3^2 a_{43}) &= \frac{1}{12}, \\
\omega_3 c_2 c_3 a_{32} + \omega_4 (c_2 a_{42} + c_3 a_{43}) c_4 &= \frac{1}{8}, \\
\omega_4 c_2 a_{32} a_{43} &= \frac{1}{24},
\end{aligned}
$$

Runge–Kutta metode s 4 stadija (nastavak)

gdje je

$$c_1 = 0, \qquad c_2 = a_{21},$$
$$c_3 = a_{31} + a_{32}, \qquad c_4 = a_{41} + a_{42} + a_{43}.$$

- 1. uvjet treba biti zadovoljen da bi metoda bila reda 1,
- 2. uvjet za red 2,
- 3. i 4. uvjeti za red 3,
- 5., 6., 7. i 8. uvjeti za red 4.

Ukupno imamo 10 koeficijenata i 8 jednadžbi ukoliko je metoda reda 4. Metoda s četiri stadija može postići najviše red četiri, tj. ne možemo dva stupnja slobode iz sustava jednadžbi iskoristiti da red metode podignemo na pet.

Klasična Runge–Kutta metoda (RK-4)

Evo nekoliko primjera RK-4 metoda.

Najpopularnija je "klasična" Runge–Kutta metoda, koja se u literaturi najčešće naziva Runge–Kutta ili RK-4 metoda (iako je to samo jedna u nizu Runge–Kutta metoda):

$$
\begin{aligned}
\Phi &= \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \\
k_1 &= f(x, y), \\
k_2 &= f\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2}k_1\right), \\
k_3 &= f\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2}k_2\right), \\
k_4 &= f\left(x + h, y + hk_3\right).
\end{aligned}
$$

3/8-ska Runge–Kutta metoda

Spomenimo još i 3/8-sku metodu:

$$
\begin{aligned}
\Phi &= \frac{1}{8}(k_1 + 3k_2 + 3k_3 + k_4),\\
k_1 &= f(x, y),\\
k_2 &= f\left(x + \frac{h}{3}, y + \frac{h}{3}k_1\right),\\
k_3 &= f\left(x + \frac{2}{3}h, y - \frac{h}{3}k_1 + hk_2\right),\\
k_4 &= f(x + h, y + h(k_1 - k_2 + k_3))
\end{aligned}
$$

Gillova metoda

...i Gillovu metodu:

$$\begin{aligned}
\Phi &= \frac{1}{6}\Big(k_1 + (2-\sqrt{2})k_2 + (2+\sqrt{2})k_3 + k_4\Big),\\
k_1 &= f(x,y),\\
k_2 &= f\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2}\,k_1\right),\\
k_3 &= f\left(x + \frac{h}{2}, y + h\frac{\sqrt{2}-1}{2}\,k_1 + h\frac{2-\sqrt{2}}{2}\,k_2\right),\\
k_4 &= f\left(x + h, y - h\frac{\sqrt{2}}{2}\,k_2 + h\frac{2+\sqrt{2}}{2}\,k_3\right).
\end{aligned}$$

Odnos broja stadija i reda RK metode

Općenito, za metode

- s 1, 2, 3 i 4 stadija najveći mogući red metode odgovara broju stadija,
- s 5, 6 i 7 stadija najveći mogući red je 4, 5 i 6, tj. za jedan manji od broja stadija,
- s 8 i više stadija najveći mogući red barem za dva manji od broja stadija.

To je razlog zašto su metode s četiri stadija najpopularnije.

- Red je 4, a da bismo postigli red 5 trebamo povećati broj stadija barem za dva, što povećava složenost metode.

Generalizacija za sisteme

Ako rješavamo sistem diferencijalnih jednadžbi

$$\mathbf{y}'(x) = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}(x)), \quad \mathbf{y}(a) = \mathbf{y}_0,$$

gdje su

$$\mathbf{y} = [y_1, \ldots, y_n]^T \quad \text{i} \quad \mathbf{f} = [f_1, \ldots, f_n]^T,$$

tada se Eulerova metoda vrlo jednostavno generalizira za taj problem tako da se skalarne veličine zamjene vektorskim:

$$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{y}_i + h\mathbf{f}(x_i, \mathbf{y}_i), \quad i = 1, \ldots, m$$

ili po komponentama

Generalizacija za sisteme (nastavak)

$$
\begin{aligned}
y_{1,i+1} &= y_{1,i} + hf_1(x, y_{1,i}, \ldots, y_{n,i}),\\
y_{2,i+1} &= y_{2,i} + hf_2(x, y_{1,i}, \ldots, y_{n,i}),\\
&\ \vdots\\
y_{n,i+1} &= y_{n,i} + hf_n(x, y_{1,i}, \ldots, y_{n,i}).
\end{aligned}
$$

Slično se generaliziraju i Runge–Kutta metode, gdje sada i parametri k_j i funkcija prirasta Φ postaju vektori. Na primjer za Klasičnu Runge–Kutta metodu i, radi jednostavnosti, $n = 2$, po komponentama imamo (kod dva indeksa prvi se uvijek odnosti na komponentu u vektoru $\mathbf{y}$):

Generalizacija za sisteme (nastavak)

$$
\begin{aligned}
k_{1,1} &= f_1(x_i, y_{1,i}, y_{2,i}) \\
k_{2,1} &= f_2(x_i, y_{1,i}, y_{2,i}) \\
k_{1,2} &= f_1(x_i + \frac{h}{2}, y_{1,i} + \frac{h}{2}k_{1,1}, y_{2,i} + \frac{h}{2}k_{2,1}) \\
k_{2,2} &= f_2(x_i + \frac{h}{2}, y_{1,i} + \frac{h}{2}k_{1,1}, y_{2,i} + \frac{h}{2}k_{2,1}) \\
k_{1,3} &= f_1(x_i + \frac{h}{2}, y_{1,i} + \frac{h}{2}k_{1,2}, y_{2,i} + \frac{h}{2}k_{2,2}) \\
k_{2,3} &= f_2(x_i + \frac{h}{2}, y_{1,i} + \frac{h}{2}k_{1,2}, y_{2,i} + \frac{h}{2}k_{2,2}) \\
k_{1,4} &= f_1(x_i + h, y_{1,i} + hk_{1,3}, y_{2,i} + hk_{2,3}) \\
k_{2,4} &= f_2(x_i + h, y_{1,i} + hk_{1,3}, y_{2,i} + hk_{2,3}) \\
y_{1,i+1} &= y_{1,i} + \frac{h}{6}(k_{1,1} + 2k_{1,2} + 2k_{1,3} + k_{1,4}) \\
y_{2,i+1} &= y_{2,i} + \frac{h}{6}(k_{2,1} + 2k_{2,2} + 2k_{2,3} + k_{2,4})
\end{aligned}
$$

Još o koeficijentima za RK metode

U prijašnjem smo poglavlju pokazali da za RK-2 i RK-4 metode treba vrijediti

$$\sum_j \omega_j = 1$$

da bi ove bile konzistentne s redom većim od 1. To vrijedi i općenito za sve RK metode, što ćemo pokazati u sljedećem teoremu.

Teorem. Runge–Kutta metoda sa s stadija ima red konzistencije veći ili jednak 1 ako i samo ako je

$$\sum_{j=1}^{s} \omega_j = 1.$$

Još o koeficijentima za RK metode (nastavak)

Dokaz. Teorem srednje vrijednosti daje nam ocjene

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

i

$$k_j = f\left(x + c_j h, y + h\sum_l a_{jl}k_l\right) = f(x,y) + \mathcal{O}(h),$$

pa lokalna pogreška diskretizacije

$$\tau(x;h) = \frac{y(x+h) - y(x)}{h} - \sum_j \omega_j k_j$$

zadovoljava

$$\tau(x;h) = y'(x) + \mathcal{O}(h) - \sum_j \omega_j [f(x,y) + \mathcal{O}(h)].$$

Još o koeficijentima za RK metode (nastavak)

Budući da je y rješenje diferencijalne jednadžbe $y' = f(x, y)$, vrijedi

$$\begin{aligned}\tau(x; h) &= f(x, y) - \sum_j \omega_j f(x, y) + \mathcal{O}(h) \\ &= f(x, y)\left(1 - \sum_j \omega_j\right) + \mathcal{O}(h),\end{aligned}$$

odakle lagano slijedi tvrdnja teorema. ■

Još o koeficijentima za RK metode (nastavak)

Slijedeća zanimljivost vezana je uz određivanje koeficijenata c_j. U definiciji metode smo spomenuli da je uobičajeni izbor

$$c_j = \sum_l a_{jl}.$$

Međutim, ostaje pitanje da li možemo povećati red konzistencije drugačijim izborom koeficijenata c_j. Odgovor je ne, i to nam pokazuje sljedeći teorem.

Još o koeficijentima za RK metode (nastavak)

Teorem. Neka je RK metoda zadana s

$$y_{i+1} = y_i + h \sum_{j=1}^{s} \tilde{k}_j, \qquad \tilde{k}_j = f\left(x + \tilde{c}_j, y + h \sum_{l=1}^{s} a_{jl} \tilde{k}_l\right) \; (*)$$

reda konzistencije $\tilde{p}$, te neka je p red konzistencije metode

$$y_{i+1} = y_i + h \sum_{j=1}^{s} k_j, \qquad k_j = f\left(x + c_j, y + h \sum_{l=1}^{s} a_{jl} k_l\right), \; (**)$$

gdje je $c_j = \sum_{l=1}^{s} a_{jl}$. Tada je $p \geq \tilde{p}$.

Još o koeficijentima za RK metode (nastavak)

Dokaz. Neka je y rješenje diferencijalne jednadžbe

$$y' = f(x, y).$$

Tada je

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y \\ x \end{bmatrix}$$

rješenje jednadžbe

$$\mathbf{y}' = \begin{bmatrix} y' \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x, y) \\ 1 \end{bmatrix} = \mathbf{f}(\mathbf{y}).$$

Neka je $\tilde{\mathbf{y}}_i$ aproksimacija za $\mathbf{y}(x_i)$ dobivena prvom metodom $(*)$. S $\tilde{y}_i$ i $\tilde{x}_i$ označit ćemo komponente vektora $\tilde{\mathbf{y}}_i$:

$$\tilde{\mathbf{y}}_i = \begin{bmatrix} \tilde{y}_i \\ \tilde{x}_i \end{bmatrix}.$$

Još o koeficijentima za RK metode (nastavak)

Budući da je red metode $\tilde{p}$, vrijedi (to ćemo pokazati kasnije)

$$\|\tilde{\mathbf{y}}_i - \mathbf{y}(x_i)\| = \mathcal{O}(h^{\tilde{p}}).$$

Uočimo da je

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathbf{k}}_j = \mathbf{f}\left(\mathbf{y} + \sum_l a_{jl}\tilde{\mathbf{k}}_l\right) &= \begin{bmatrix} \tilde{k}_j \\ 1 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} f\left(x + h\sum_l a_{jl}, y + h\sum_l a_{jl}\tilde{k}_l\right) \\ 1 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} f\left(x + c_j h, y + h\sum_l a_{jl}\tilde{k}_l\right) \\ 1 \end{bmatrix},
\end{aligned}$$

gdje $\tilde{k}_l$ označava prvu komponentu vektora $\tilde{\mathbf{k}}_l$.

Još o koeficijentima za RK metode (nastavak)

Uočimo da je $\tilde{k}_j = k_j$, a k_j je definiran drugom metodom $(**)$, te vrijedi

$$\tilde{\mathbf{y}}_{i+1} = \tilde{\mathbf{y}}_i + h \sum_j \omega_j \tilde{\mathbf{k}}_j = \begin{bmatrix} \tilde{y}_i \\ \tilde{x}_i \end{bmatrix} + h \sum_j \omega_j \begin{bmatrix} k_j \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} y_i + h \sum\limits_j \omega_j k_j \\ \tilde{x}_i + h \sum\limits_j \omega_j \end{bmatrix}.$$

Iz $\sum\limits_j \omega_j = 1$ izlazi da je $\tilde{x}_{i+1} = \tilde{x}_i + h$, a upotrebom matematičke indukcije zaključimo da je $\tilde{x}_i = x_i = x_0 + ih$.

Još o koeficijentima za RK metode (nastavak)

Sada je

$$\begin{bmatrix} \tilde{y}_{i+1} \\ x_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{y}_i + h \sum_j \omega_j k_j \\ x_{i+1} \end{bmatrix}.$$

Ukoliko s y_i označimo aproksimaciju rješenja jednadžbe $y' = f(x, y)$ dobivenog drugom metodom $(**)$, zbog istih početnih uvjeta slijedi da je $y_i = \tilde{y}_i$. Ova činjenica povlači

$$\tilde{\mathbf{y}}_i - \mathbf{y}(x_i) = \begin{bmatrix} \tilde{y}_i \\ \tilde{x}_i \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} y(x_i) \\ x_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_i - y(x_i) \\ 0 \end{bmatrix}$$

te za bilo koju od uobičajenih normi $\| \, \|_1$, $\| \, \|_2$ ili $\| \, \|_\infty$ vrijedi

$$\|y_i - y(x_i)\| = \|\tilde{\mathbf{y}}_i - \mathbf{y}(x_i)\| = \mathcal{O}(h^{\tilde{p}}),$$

pa je druga metoda $(**)$ reda barem $\tilde{p}$, tj. vrijedi $p \geq \tilde{p}$. ■

Konvergencija jednokoračnih metoda

Od sad pa na dalje pretpostavit ćemo da je $f \in F_1(a,b)$, a s y ćemo označiti egzaktno rješenje inicijalnog problema

$$y' = f(x,y), \quad y(x_0) = y_0, \quad x_0 \in [a,b], \quad y_0 \in \mathbb{R}.$$

Uočimo da pretpostavka $f \in F_1(a,b)$ povlači egzistenciju i jedinstvenost rješenja y na intervalu $[a,b]$ (V. Teorem s početka ovog predavanja). Neka $\Phi(x,y;h)$ definira jednokoračnu metodu

$$y_{i+1} = y_i + h\Phi(x_i, y_i; h), \quad i = 0, 1, 2, \ldots$$

gdje je $x_{i+1} = x_i + h$. Zanima nas ponašanje pogreške

$$e_i = y_i - y(x_i).$$

Konvergencija jednokoračnih metoda (nastavak)

Za fiksirani $x \in [a, b]$ definiramo korak

$$h_n = \frac{x - x_0}{n}$$

i globalnu pogrešku diskretizacije

$$e(x; h_n) = y_n - y(x).$$

Sada za svaki $n \in \mathbb{N}$ vrijedi $x_n = x$, te možemo promatrati globalnu pogrešku diskretizacije kada $n \to \infty$.

Definicija. Jednokoračna metoda je konvergentna ako

$$\lim_{n \to \infty} e(x; h_n) = 0$$

za sve $x \in [a, b]$ i sve $f \in F_1(a, b)$.

Konvergencija jednokoračnih metoda (nastavak)

Pokazat ćemo da su metode reda $p > 0$ konvergentne, i štoviše, da vrijedi

$$e(x; h_n) = \mathcal{O}(h_n^p).$$

Red globalne pogreške diskretizacije je dakle jednak redu lokalne pogreške diskretizacije. Prvo ćemo dokazati sljedeću lemu.

Lema. Ako brojevi ξ_i zadovoljavaju ocjenu oblika

$$|\xi_{i+1}| \leq (1+\delta)|\xi_i| + B, \quad \delta > 0, \quad B \geq 0, \quad i = 0, 1, 2, \ldots$$

tada je

$$|\xi_n| \leq e^{n\delta}|\xi_0| + \frac{e^{n\delta} - 1}{\delta} B.$$

Konvergencija jednokoračnih metoda (nastavak)

Dokaz. Iz pretpostavke direktno slijedi

$$
\begin{aligned}
|\xi_1| &\le (1+\delta)|\xi_0| + B, \\
|\xi_2| &\le (1+\delta)^2|\xi_0| + B(1+\delta) + B, \\
&\ \ \vdots \\
|\xi_n| &\le (1+\delta)^n|\xi_0| + B\big[1 + (1+\delta) + (1+\delta)^2 + \cdots + (1+\delta)^{n-1}\big] \\
&= (1+\delta)^n|\xi_0| + B\,\frac{(1+\delta)^n - 1}{\delta} \\
&\le e^{n\delta}|\xi_0| + B\,\frac{e^{n\delta} - 1}{\delta},
\end{aligned}
$$

jer je $0 < 1 + \delta < e^{\delta}$ za $\delta > 0$. ∎

Konvergencija jednokoračnih metoda (nastavak)

Teorem. Za $x_0 \in [a,b]$, $y_0 \in \mathbb{R}$, promatramo inicijalni problem

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

koji ima jedinstveno rješenje $y(x)$. Neka je funkcija Φ neprekidna na

$$G = \{(x,y,h) \mid x \in [a,b],\ |y - y(x)| \leq \gamma,\ |h| \leq h_0\},$$

za $h_0 > 0$, $\gamma > 0$ i neka postoje pozitivne konstante M i N takve da je

$$|\Phi(x,y_1;h) - \Phi(x,y_2;h)| \leq M|y_1 - y_2|$$

za sve $(x,y_i,h) \in G$, $i = 1,2$, i

$$|\tau(x;h)| = |\Delta(x;h) - \Phi(x,y(x);h)| \leq N|h|^p, \quad p > 0$$

za sve $x \in [a,b]$, $h \leq h_0$.

Konvergencija jednokoračnih metoda (nastavak)

Tada postoji $\bar{h}$, $0 < \bar{h} \leq h_0$, takav da globalna pogreška diskretizacije zadovoljava

$$|e(x; h_n)| \leq |h_n|^p N \, \frac{e^{M|x-x_0|} - 1}{M}$$

za sve $x \in [a, b]$ i $h_n = (x - x_0)/n$, $n = 1, 2, \ldots$, uz $|h_n| \leq \bar{h}$. Ako je $\gamma = \infty$, tada je $\bar{h} = h_0$.

Dokaz. Funkcija

$$\widetilde{\Phi}(x, y; h) = \begin{cases} \Phi(x, y; h), & \text{za } (x,y,h) \in G, \\ \Phi(x, y(x) + \gamma; h), & \text{za } x \in [a,b],\ |h| \leq h_0,\ y \geq y(x) + \gamma, \\ \Phi(x, y(x) - \gamma; h), & \text{za } x \in [a,b],\ |h| \leq h_0,\ y \leq y(x) - \gamma \end{cases}$$

je očito neprekidna na $\tilde{G} = \{(x, y, h) \mid x \in [a, b],\ y \in \mathbb{R},\ |h| \leq h_0\}$ i...

Konvergencija jednokoračnih metoda (nastavak)

…zadovoljava uvjet

$$|\widetilde{\Phi}(x, y_1; h) - \widetilde{\Phi}(x, y_2; h)| \le M|y_1 - y_2|$$

za sve $(x, y_i, h) \in \tilde{G}$, $i = 1, 2$. Zbog $\widetilde{\Phi}(x, y(x); h) = \Phi(x, y(x); h)$ također vrijedi

$$|\Delta(x; h) - \widetilde{\Phi}(x, y(x); h)| \le N|h|^p, \quad \text{za } x \in [a, b], \quad |h| \le h_0.$$

Neka jednokoračna metoda generirana s $\widetilde{\Phi}$ definira aproksimacije $\tilde{y}_i$ za $y(x_i)$, $x_i = x_0 + ih$:

$$\tilde{y}_{i+1} = \tilde{y}_i + h\widetilde{\Phi}(x_i, \tilde{y}_i; h).$$

Zbog

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + h\Delta(x_i; h),$$

Konvergencija jednokoračnih metoda (nastavak)

za pogrešku $\tilde{e}_i = \tilde{y}_i - y(x_i)$, oduzimanjem, dobivamo rekurzivnu formulu

$$\begin{aligned} \tilde{e}_{i+1} = \tilde{e}_i + h\big[\widetilde{\Phi}(x_i, \tilde{y}_i; h) - \widetilde{\Phi}(x_i, y(x_i); h)\big] + \\ + h\big[\widetilde{\Phi}(x_i, y(x_i); h) - \Delta(x_i; h)\big]. \end{aligned}$$

Zbog uvjeta koje zadovoljava $\widetilde{\Phi}(x, y; h)$ imamo

$$\begin{aligned} |\widetilde{\Phi}(x_i, \tilde{y}_i; h) - \widetilde{\Phi}(x_i, y(x_i); h) &\leq M|\tilde{y}_i - y(x_i)| = M|\tilde{e}_i|, \\ |\widetilde{\Phi}(x_i, y(x_i); h) - \Delta(x_i; h)| &\leq N|h|^p, \end{aligned}$$

te dobivamo rekurzivnu ocjenu

$$|\tilde{e}_{i+1}| \leq (1 + |h|M)|\tilde{e}_i| + N|h|^{p+1}.$$

Konvergencija jednokoračnih metoda (nastavak)

Korištenjem $\tilde{e}_0 = \tilde{y}_0 - y(x_0) = 0$, iz prethodne leme slijedi

$$|\tilde{e}_k| \le N|h|^p \frac{e^{M|x_k - x_0|} - 1}{M}.$$

Neka je sada $x \in [a, b]$, $x \neq x_0$, fiksiran i $h = h_n = (x - x_0)/n$, $n > 0$. Tada zbog $x_n = x_0 + nh = x$ i zbog $\tilde{e}(x; h_n) = \tilde{e}_n$ slijedi

$$|\tilde{e}(x; h_n)| \le N|h|^p \frac{e^{M|x - x_0|} - 1}{M}$$

za sve $x \in [a, b]$ i h_n za koje je $|h_n| \le h_0$.

Budući da je $|x - x_0| \le |b - a|$ i $\gamma > 0$, postoji $\bar{h}$, $0 < \bar{h} \le h_0$ takav da je $|\tilde{e}(x; h_n)| \le \gamma$ za sve $x \in [a, b]$, $|h_n| \le \bar{h}$, tj. za jednokoračnu metodu generiranu s Φ:

$$y_{i+1} = y_i + h\Phi(x_i, y_i; h)$$

Konvergencija jednokoračnih metoda (nastavak)

imamo za $|h| \leq \bar{h}$, zbog definicije za $\widetilde{\Phi}$,

$$\tilde{y}_i = y_i, \quad \tilde{e}_i = e_i \quad \text{i} \quad \widetilde{\Phi}(x_i, \tilde{y}_i; h) = \Phi(x_i, y_i; h).$$

Tvrdnja teorema dakle slijedi za sve $x \in [a, b]$ i sve $h_n = (x - x_0)/n$, $n = 1, 2, \ldots$, uz $|h_n| \leq \bar{h}$. ■

Iz prethodnog teorema posebno slijedi da je metoda reda $p > 0$, koja u okolini rješenja zadovoljava Lipschitzov uvjet, konvergentna.

- Uočimo da je ovaj uvjet ispunjen ako $\frac{\partial}{\partial y}\Phi(x, y; h)$ postoji i neprekidna je u domeni G danoj u teoremu.
- Teorem, također, daje i gornju ogradu za globalnu pogrešku diskretizacije, koja u principu može biti izračunata ako znamo M i N. To je u praksi nepraktično.

Runge–Kutta–Fehlbergove metode

Kod prethodno opisanih jednokoračnih metoda pretpostavili smo da je korak integracije h konstantan tijekom cijelog postupka rješavanja diferencijalne jednadžbe, očito je da se h može mijenjati u svakom koraku integracije, pa jednokoračnu metodu možemo pisati u obliku:

$$y_{i+1} = y_i + h_i \Phi(x_i, y_i, h_i).$$

Prvo ćemo pokazati kako se određuje duljina koraka h_i tako da bude postignuta neka unaprijed zadana točnost ε.

Neka su s Φ i $\bar{\Phi}$ zadane dvije metode reda p i $p+1$. Tada računamo aproksimacije

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + h_i \Phi(x_i, y_i, h_i), \\ \bar{y}_{i+1} &= y_i + h_i \bar{\Phi}(x_i, y_i, h_i). \end{aligned}$$

Runge–Kutta–Fehlbergove metode (nastavak)

Znamo da iz definicije reda konzistencije slijedi:

$$y(x_i + h_i) = y(x_i) + h_i \Phi(x_i, y(x_i), h_i) + C(x_i) h_i^{p+1} + \mathcal{O}(h_i^{p+2}),$$

$$y(x_i + h_i) = y(x_i) + h_i \bar{\Phi}(x_i, y(x_i), h_i) + \mathcal{O}(h_i^{p+2}).$$

Cilj je da pogreška u i-tom koraku bude manja od ε. Stoga ćemo pretpostaviti da je aproksimacija y_i za $y(x_i)$ točna, tj. $y_i = y(x_i)$. Sada oduzimanjem gornje dvije jednadžbe slijedi

$$h_i [\bar{\Phi}(x_i, y_i, h_i) - \Phi(x_i, y_i, h_i)] = C(x_i) h_i^{p+1} + \mathcal{O}(h_i^{p+2}).$$

Iz prve dvije jednakosti oduzimanjem slijedi

$$h_i [\bar{\Phi}(x_i, y_i, h_i) - \Phi(x_i, y_i, h_i)] = \bar{y}_{i+1} - y_{i+1}.$$

Runge–Kutta–Fehlbergove metode (nastavak)

Kombiniranjem prethodnih izraza dobit ćemo

$$\begin{aligned} \bar{y}_{i+1} - y_{i+1} &\approx C(x_i) h_i^{p+1} + \mathcal{O}(h_i^{p+2}) \\ y(x_{i+1}) - y_{i+1} &\approx C(x_i) h_i^{p+1} + \mathcal{O}(h_i^{p+2}) \end{aligned}$$

Zanemarivanjem viših članova u razvoju pogreške, dobivamo

$$\bar{y}_{i+1} - y_{i+1} \approx C(x_i) h_i^{p+1}$$

i

$$\bar{y}_i - y_i \approx C(x_{i-1}) h_{i-1}^{p+1}.$$

Uz pretpostavku da se član $C(x)$ u pogrešci ne mijenja brzo, tj. $C(x_i) \approx C(x_{i-1})$, uvjet da pogreška u i-tom koraku bude manja od ε sada glasi:

Odabir koraka

$$\varepsilon \geq |y(x_{i+1}) - y_{i+1}| \approx |C(x_i)h_i^{p+1}| \approx |C(x_{i-1})h_i^{p+1}|$$
$$\approx \left|\frac{\bar{y}_i - y_i}{h_{i-1}^{p+1}}\right| h_i^{p+1},$$

odnosno

$$h_i^{p+1} \leq h_{i-1}^{p+1} \, \frac{\varepsilon}{|\bar{y}_i - y_i|}.$$

Iz ovoga slijedi da za novi korak trebamo izabrati

$$h_i = h_{i-1} \sqrt[p+1]{\frac{\varepsilon}{|\bar{y}_i - y_i|}}.$$

Ukoliko je prethodni korak bio uspješan, tada je zadovoljeno

$$|\bar{y}_i - y_i| \leq \varepsilon,$$

te je stoga $h_i \geq h_{i-1}$. Ako gornja nejednakost ne vrijedi, $(i-1)$-vi korak treba ponoviti uz manji h_{i-1}.

Odabir koraka (nastavak)

Mnogi iz prakse preporučaju izbor koraka

$$h_i = \alpha h_{i-1} \sqrt[p+1]{\frac{\varepsilon}{|\bar{y}_i - y_i|}}.$$

gdje je α pogodno odabran korigirajući faktor, koji služi da ispravi pogrešku nastalu odbacivanjem viših članova u ocjeni pogreške. Obično je $\alpha = 0.9$.

- Čim izračunamo h_i najbolje je odmah provjeriti da li će biti ispunjeno $|\bar{y}_{i+1} - y_{i+1}| \leq \varepsilon$, i ukoliko to nije ispunjeno izračunati novi h_i^{novi} iz starog $h_i^{stari} = h_i$

$$h_i^{novi} = \alpha h_i^{stari} \sqrt[p+1]{\frac{\varepsilon}{|\bar{y}_{i+1} - y_{i+1}|}}.$$

na isti način kao što se h_i računa iz h_{i-1}.

Odabir parametara RK–Fehlbergove metode

Prikazani izbor koraka vrijedi za bilo koji par jednokoračnih metoda reda p i $p+1$.

- Primjena Runge–Kutta metoda zahtijevala bi jednu metodu sa s stadija i jednu sa $s+1$ stadija, što općenito znači da bismo u svakom koraku funkciju f iz diferencijalne jednadžbe trebali računati $2s+1$ puta.
- Postupak se može pojednostavniti ako prvih s stadija $k_1, \ldots, k_s, k_{s+1}$ korištenih za računanje funkcije prirasta $\bar{\Phi}$ iskoristimo za računanje funkcije Φ:

$$\Phi(x, y, h) = \sum_{i=1}^{s} \omega_i k_i(x, y, h),$$

$$\bar{\Phi}(x, y, h) = \sum_{i=1}^{s+1} \bar{\omega}_i k_i(x, y, h).$$

Odabir parametara RK–Fehlbergove metode

Sada u svakom koraku funkciju f računamo samo $s+1$ puta.

Ovu ideju ćemo ilustrirati na paru Runge–Kutta metoda reda 2 i 3. Promatramo metode s 3 i 4 stadija:

$$\Phi(x,y,h) = \sum_{i=1}^{3} \omega_i k_i(x,y,h),$$

$$\bar{\Phi}(x,y,h) = \sum_{i=1}^{4} \bar{\omega}_i k_i(x,y,h).$$

- Da bi metoda definirana s $\bar{\Phi}$ bila reda 3 trebaju biti zadovoljena prva četiri uvjeta za odabir parametara RK metode, što je ukupno 4 jednadžbe i 10 koeficijenata.

Odabir parametara RK–Fehlbergove metode

- Nadalje, metoda reda 2 s 3 stadija ima 3 dodatna koeficijenta (ω_1, ω_2 i ω_3) i treba zadovoljavati 2 dodatna uvjeta (prva dva uvjeta za odabir parametara RK metode).
- Sveukupno, 13 koeficijenata u ovom paru metoda treba zadovoljavati 6 uvjeta.
- Preostalih 7 stupnjeva slobode iskoristit ćemo za smanjivanje broja računanja funkcije f.
- Naime, zahtijevat ćemo da $k_4(x_i, y_i, h_i, f)$, zadnji stadij iz računanja $\bar{\Phi}$ u i-tom koraku, iskoristimo kao $k_1(x_{i+1}, y_{i+1}, h_{i+1}, f)$, prvi stadij u $(i+1)$-om koraku:

Odabir parametara RK–Fehlbergove metode

$$\begin{aligned} f(x + c_4 h_i, y_i + h_i(a_{41}k_1 + a_{42}k_2 + a_{43}k_3) &= f(x_{i+1}, y_{i+1}) \\ &= f(x_i + h_i, y_i + h_i\Phi(x_i, y_i, h_i, f)) \\ &= f(x_i + h_i, y_i + h_i(\omega_1 k_1 + \omega_2 k_2 + \omega_3 k_3) \end{aligned}$$

Odavde slijede dodatna 3 uvjeta:

$$a_{41} = \omega_1, \quad a_{42} = \omega_2, \quad a_{43} = \omega_3.$$

Uvjet $c_4 = 1$ automatski je ispunjen zbog

$$\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 = 1.$$

Jedno od rješenja ovog sustava jednadžbi je prikazano u sljedećoj tablici.

Odabir parametara RK–Fehlbergove metode

i	c_i	a_{ij} $j=1$	$j=2$	$j=3$	ω_i	$\bar{\omega}_i$
1	0				$\frac{214}{891}$	$\frac{533}{2106}$
2	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$			$\frac{1}{33}$	0
3	$\frac{27}{40}$	$-\frac{189}{800}$	$\frac{729}{800}$		$\frac{650}{891}$	$\frac{800}{1053}$
4	1	$\frac{214}{891}$	$\frac{1}{33}$	$\frac{650}{891}$		$-\frac{1}{78}$

Implicitna trapezna metoda

Metode za ODJ iz integracijskih metoda

Jednokoračne metode možemo shvatiti kao primjenu integracijskih metoda na integraciju ODJ

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

Integracijom prethodne jednadžbe slijedi

$$y(x_{i+1}) - y(x_i) = \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x))dx = \mathcal{I}_i.$$

Dakle, vrijednost $y(x_{i+1})$ možemo izračunati iz prethodne vrijednosti $y(x_i)$ ako znamo izračunati integral $\mathcal{I}_i$. Korištenjem integracijskih metoda dobivamo:

- formula lijevog ruba $\longrightarrow$ Eulerova metoda

$$\mathcal{I}_i \approx hf(x_i, y(x_i))$$

Metode za ODJ iz integracijskih formula (n.)

- formula desnog ruba $\longrightarrow$ implicitna Eulerova metoda

$$\mathcal{I}_i \approx hf(x_{i+1}, y(x_{i+1}))$$

- formula srednje točke $\longrightarrow$ modificirana Eulerova metoda

$$\mathcal{I}_i \approx hf\left(x_i + \frac{h}{2}, y\left(x_i + \frac{h}{2}\right)\right),$$

pri čemu se koristi aproksimacija

$$y(x_i + h/2) \approx y(x_i) + \frac{h}{2}y'(x_i) = y(x_i) + \frac{h}{2}f(x_i, y(x_i)).$$

- trapezna formula $\longrightarrow$ Imlicitna trapezna metoda ili Crank–Nicolsonova metoda

$$\mathcal{I}_i \approx \frac{h}{2}(f(x_i, y(x_i)) + f(x_{i+1}, y(x_{i+1})))$$

Imlicitna trapezna metoda

Dakle, primjenom trapezne formule na integraciju ODJ dobit ćemo metodu oblika

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})).$$

Budući da se y_{i+1} javlja i na lijevoj i na desnoj strani jednadžbe, radi se o implicitnoj metodi.

- U svakoj iteraciji rješava se gornji problem nekom od metoda za numeričko rješavanje nelinearnih jednadžbi, npr. Newtonovom metodom sa fiksnim brojem iteracija.
- Implicitna trapezna metoda je reda 2, budući da je takva točnost i trapezne integracijske formule.

Zašto koristiti implicitne metode?

Zašto koristimo implicitne metode, kada kod njih u svakom koraku moramo rješavati nelinearnu jednadžbu?

Zato što su one puno efikasnije kod rješavanja krutih (“stiff”) jednadžbi.

Apsolutna stabilnost i krute jednadžbe

Problemi za eksplicitne metode

U mnogim primjenama rješenje incijalnog problema

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

približava se stacionarnom rješenju $y = \bar{y}$ za koje je $f(x, \bar{y}) = 0$ za sve x.

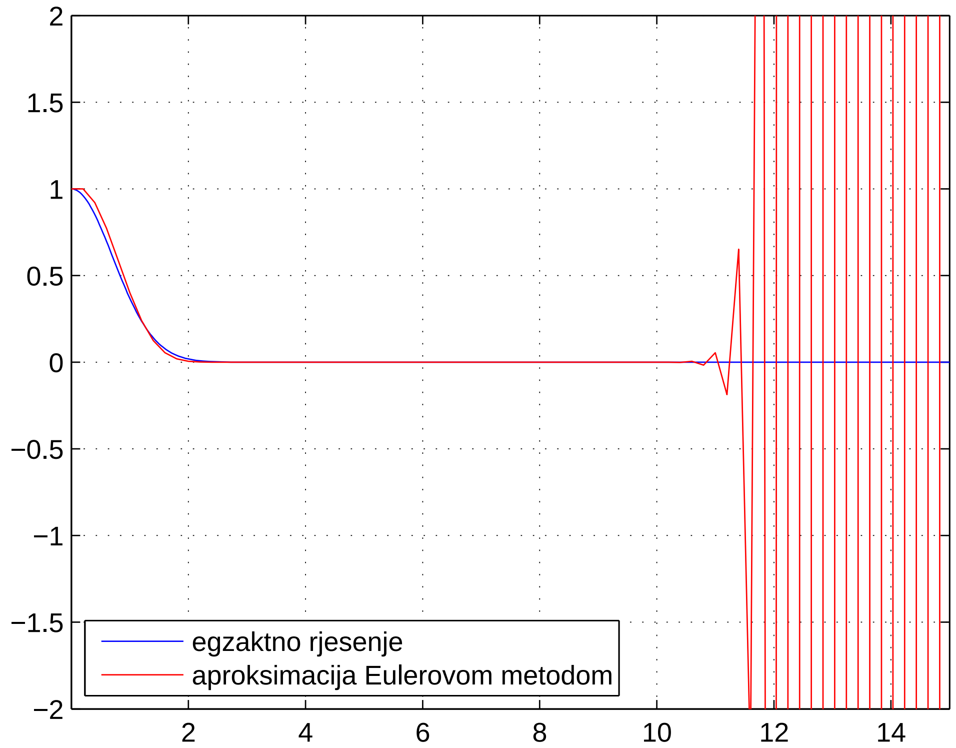
Numeričke aproksimacije rješenja mogu biti vrlo netočne u slučaju kada se približavaju stacionarnom rješenju.

Primjer. Rješenje $y(x) = e^{-x^2}$ inicijalnog problema

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

približava se stacionarnom rješenju $y = 0$. Na sljedećoj slici prikazana je aproksimacija dobivena Eulerovom metodom za korak $h = 0.2$.

Primjer nestabilnosti Eulerove metode



Slika ilustrira problem — nestabilnost na koju nailaze mnoge numeričke metode za rješavanje diferencijalnih jednadžbi sa fiksnim korakom.

Apsolutna stabilnost Eulerove metode

Da bismo bolje razumjeli uzrok ovakve nestabilnosti, razmotrimo jednostavniji problem: primjena Eulerove metode na inicijalni problem

$$y' = \lambda y, \qquad y(0) = y_0,$$

gdje je λ konstanta. Za Eulerovu metodu je

$$y_{i+1} = y_i + h\lambda y_i = (1 + h\lambda) y_i.$$

Zbog toga imamo

$$\begin{aligned} y_0 &= y_0 \quad \text{(inicijalni uvjet)} \\ y_1 &= (1 + h\lambda) y_0 \\ y_2 &= (1 + h\lambda) y_1 = (1 + h\lambda)^2 y_0 \\ &\cdots\cdots\cdots \\ y_i &= (1 + h\lambda) y_{i-1} = (1 + h\lambda)^i y_0 \end{aligned}$$

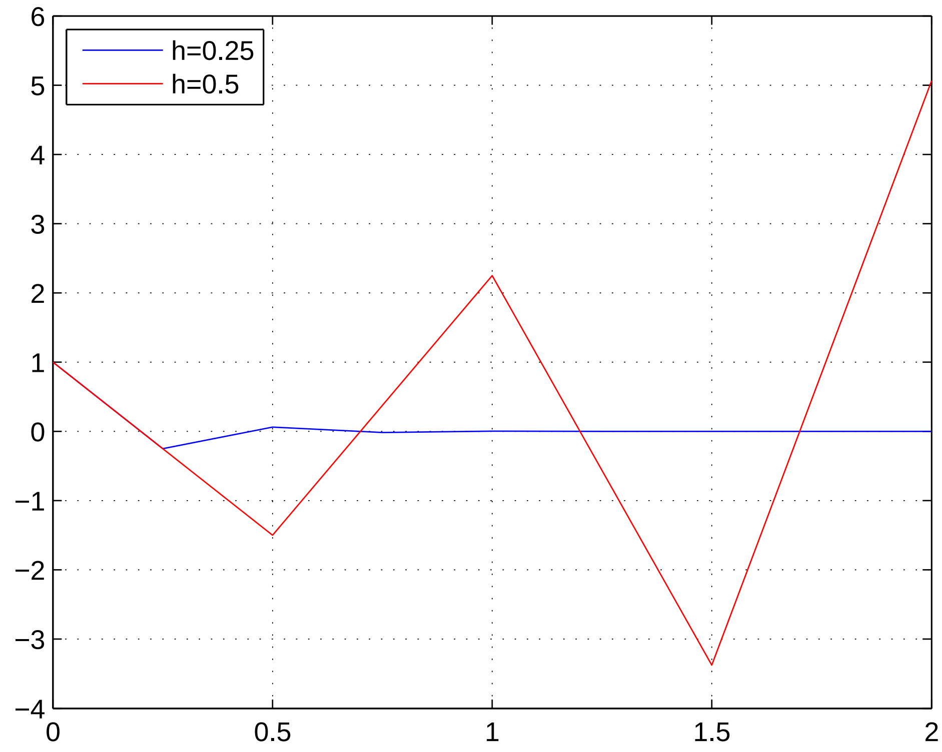
Apsolutna stabilnost Eulerove metode (nast.)

Kada je $\lambda < 0$, egzaktno rješenje $y(x) = y_0 e^{\lambda x}$ približava se stacionarnom rješenju $y = 0$.

- Aproksimacija rješenja dobivena Eulerovom metodom $y_i = (1 + \lambda h)^i y_0$ također se približava ka $y = 0$ samo ako je
$$|1 + \lambda h| < 1, \quad \text{tj.} \quad \lambda h \in \langle -2, 0 \rangle.$$
- Kada je $1 + \lambda h < -1$, aproksimacija će ispoljiti rastuće oscilacije oko $y = 0$.

Sljedeća slika prikazuje aproksimacije rješenja dobivene Eulerovom metodom inicijalnog problema $y' = -5y$, $y(0) = 1$, za $h = 0.25$ i $h = 0.5$.

Apsolutna stabilnost Eulerove metode (nast.)



Apsolutna stabilnost Eulerove metode (nast.)

Općenitije, pretpostavimo da se rješenje inicijalnog problema približava stacionarnom rješenju $y = 0$. Tada iz Taylorovog teorema slijedi

$$\begin{aligned} f(x,y) &= f(x,0) + \frac{\partial f}{\partial y}(x,0)y + O(|y|^2) \\ &= \frac{\partial f}{\partial y}(x,0)y + O(|y|^2), \end{aligned}$$

jer je $f(x,0) = 0$. Inicijalni problem

$$y' = \frac{\partial f}{\partial y}(x,0)y, \qquad y(x_0) = y_0$$

nazivamo linearizirana forma polaznog problema. Kada je $\frac{\partial f}{\partial y}(x,0) \neq 0$ očekujemo da će, u grubo, Eulerova metoda biti stabilna kada je $h\frac{\partial f}{\partial y}(x,0)$ unutar intervala stabilnosti $\langle -2, 0\rangle$.

Interval apsolutne stabilnosti

Na temelju prethodnih razmatranja možemo dati sljedeću definiciju.

Definicija. Interval apsolutne stabilnosti numeričke metode je interval vrijednosti λh za koje se aproksimacija y_i rješenja $y(x_i) = y_0 e^{\lambda x_i}$ jednadžbe $y' = \lambda y, \; y(0) = y_0$ približava nuli kada $i \to \infty$.

Apsolutna stabilnost Runge–Kutta metoda

Interval apsolutne stabilnosti za Runge–Kutta metode može se naći na sličan način kao kod Eulerove metode.

Nađimo interval absolutne stabilnosti za RK metodu sa 2 stadija: modificiranu Eulerovu metodu

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_i + h, y_i + hf(x_i, y_i))].$$

Kako je $f(x_i, y_i) = \lambda y_i$ imamo

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= \left(1 + h\lambda + \frac{1}{2}h^2\lambda^2\right) y_i \\ &= \left(1 + h\lambda + \frac{1}{2}h^2\lambda^2\right)^i y_0. \end{aligned}$$

Apsolutna stabilnost Runge–Kutta metoda (n.)

Prema tome aproksimacija se približava $y = 0$ kada je

$$\left|1 + h\lambda + \frac{1}{2}h^2\lambda^2\right| < 1.$$

Budući da je $1 + h\lambda + \frac{1}{2}h^2\lambda^2 = \frac{1}{2}(h\lambda + 1)^2 + \frac{1}{2}$ gornji uvjet na λh je ekvivalentan $|\lambda h + 1| < 1$, odakle slijedi da je interval apsolutne stabilnosti za modificiranu Eulerovu metodu jednak

$$\lambda h \in \langle -2, 0\rangle,$$

kao i za Eulerovu metodu.

Iz definicije iteracija bilo koje Runge–Kutta metoda, jasno je da će njihova primjena na problem $y' = \lambda y,\ y(0) = y_0$ dati jednadžbu oblika

$$y_{i+1} = P(h\lambda)y_i, \qquad P \text{ polinom.}$$

Apsolutna stabilnost Runge–Kutta metoda (n.)

Za prethodno opisane metode imali smo:

Eulerova metoda	$P(z) = 1 + z$
Modificirana Eulerova metoda	$P(z) = 1 + z + \frac{1}{2}z^2$

Budući da iz $y_{i+1} = P(h\lambda)y_i$ slijedi $y_{i+1} = P(h\lambda)^i y_0$ uvjet na apsolutnu stabilnost je

$$|P(h\lambda)| < 1.$$

Može se pokazati da je polinom $P(z)$ jednak za sve metode koje imaju isti red globalne greške diskretizacije.
U sljedećoj tablici nalaze se intervali apsolutne stabilnosti za eksplicitne Runga–Kutta metode sa globalnim greškama diskretizacije reda 1 do 4.

Intervali apsolutne stabilnosti Runge–Kutta m.

Red gl. greške	$P(z)$	Interval aps. stab.
1	$1+z$	$\langle -2, 0 \rangle$
2	$1+z+\frac{1}{2}z^2$	$\langle -2, 0 \rangle$
3	$1+z+\frac{1}{2}z^2+\frac{1}{6}z^3$	$\langle -2.51, 0 \rangle$
4	$1+z+\frac{1}{2}z^2+\frac{1}{6}z^3+\frac{1}{24}z^4$	$\langle -2.78, 0 \rangle$

Apsolutna stabilnost implicitne trapezne metode

Uvrštavamo $f(x, y) = \lambda y$ u jednadžbu implicitne trapezne metode:

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + \frac{h}{2}(\lambda y_i + \lambda y_{i+1}) \\ &= \left(1 + \frac{1}{2}h\lambda\right) y_i + \frac{1}{2}h\lambda y_{i+1}, \end{aligned}$$

odakle slijedi

$$\left(1 - \frac{1}{2}h\lambda\right) y_{i+1} = \left(1 + \frac{1}{2}h\lambda\right) y_i.$$

Budući da je $h\lambda < 0$ izraz uz y_{i+1} u prethodnoj jednadžbi je različit od nule, i njime možemo podijeliti cijelu jednadžbu.

Apsolutna stabilnost implicitne trapezne metode

Dobivamo

$$
\begin{aligned}
y_{i+1} &= \frac{2 + h\lambda}{2 - h\lambda} y_{i+1} \\
&= \left(\frac{2 + h\lambda}{2 - h\lambda} \right)^{i+1} y_0.
\end{aligned}
$$

Dakle, aproksimacija se približava $y = 0$ ako je

$$
\left| \frac{2 + h\lambda}{2 - h\lambda} \right| < 1,
$$

a to je ispunjeno za sve $\lambda h < 0$. Znači, interval apsolutne stabilnosti za implicitnu trapeznu metodu je

$$
\lambda h \in \langle -\infty, 0 \rangle.
$$

Krute jednadžbe (sustavi)

Implicitne metode su efikasnije za rješavanje krutih ("stiff") jedadžbi (sustava).

- Primjenom numeričke metode na krutu jednadžbu veći utjecaj na veličinu koraka h_i ima interval apsolutne stabilnosti nego uvjet na održavanje male lokalne pogreške diskretizacije.
- Takve jednadžbe se teško rješavaju pomoću eksplicitnih Runge–Kutta metoda jer zahtijevaju puno vrlo sitnih koraka (kao npr. za jednadžbu $y' = \lambda y$, $\lambda < 0$ kada je $|\lambda|$ velik), dok za implicitnu trapeznu metodu to nije slučaj.

Primjer apsolutne stabilnosti metoda

Rješavamo inicijalni problem

$$\begin{aligned} y'(x) &= -100(y(x) - \cos x) - \sin x, \qquad x \in [0,1], \\ y(0) &= 1, \end{aligned}$$

Ako napravimo transformaciju varijable:

$$z = y - \cos(x)$$

tada se gornji problem transformira u:

$$\begin{aligned} z'(x) &= -100z, \qquad x \in [0,1], \\ z(0) &= 0. \end{aligned}$$

Egzaktno rješenje ovog problema je $z = 0$, a rješenje originalnog problema je $y = \cos(x)$.

Primjer apsolutne stabilnosti metoda (nastavak)

Originalni problem rješavat ćemo

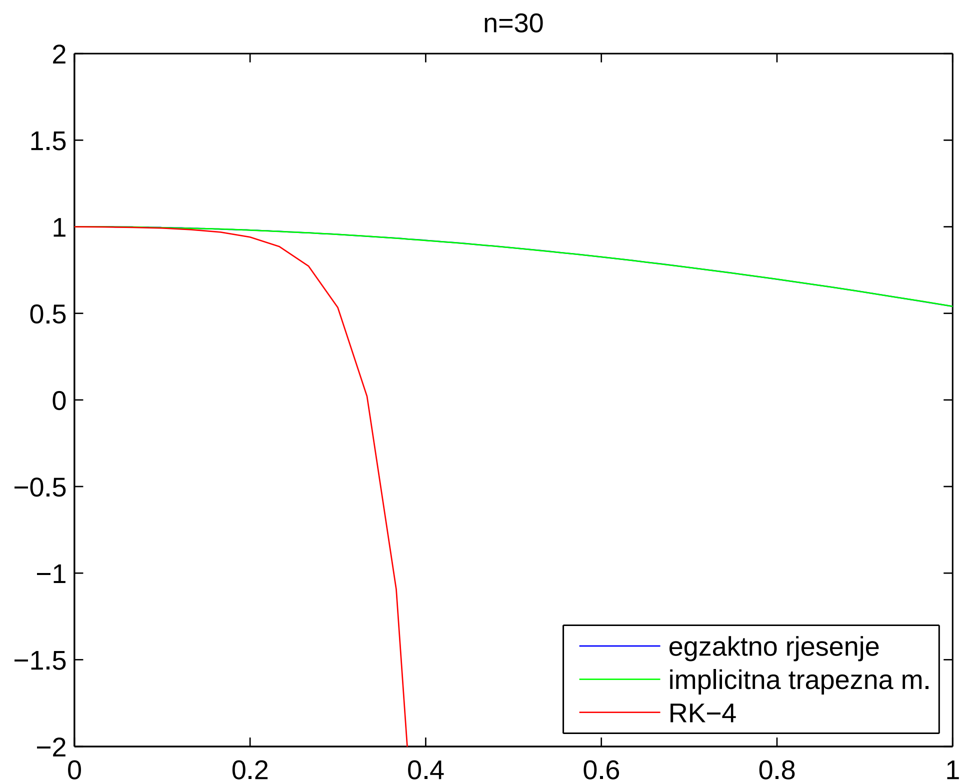
- klasičnom Runge–Kutta metodom (RK-4)
- implicitnom trapeznom metodom

Vidimo da na transformirani problem (pa onda i na originalni) možemo primijeniti prethodna razmatranja, što znači da

- klasična Runge–Kutta metoda će biti apsolutno stabilna za $100h = 100/n < 2.78$
- implicitna trapezna metoda će biti apsolutno stabilna za sve h, odnosno n.

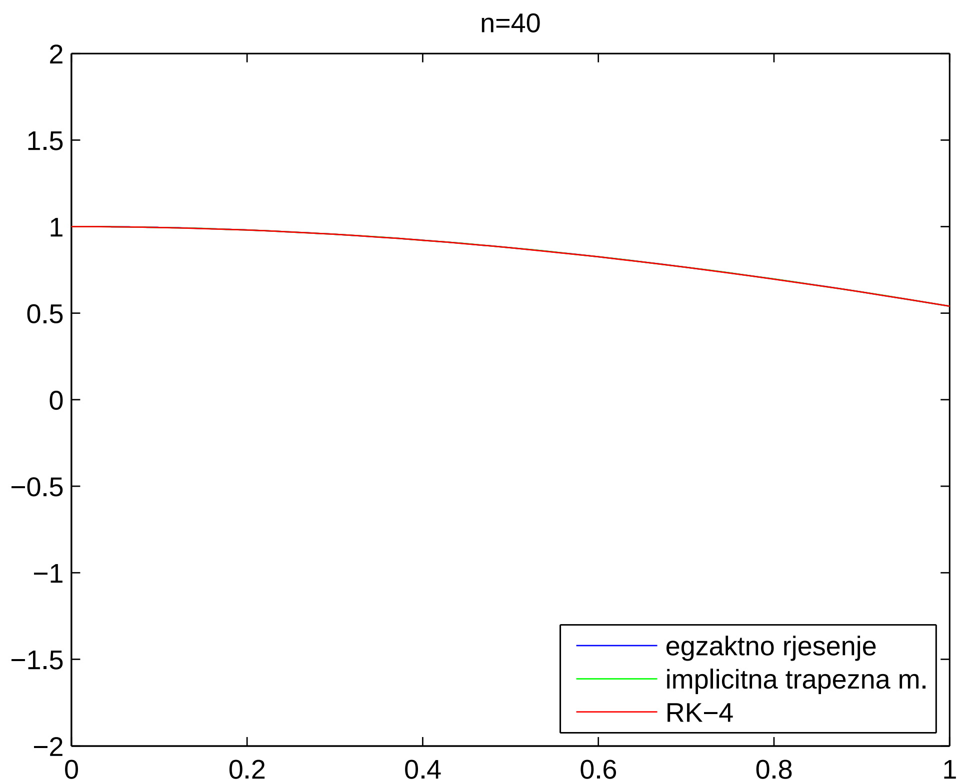
Sljedeće slike nam potvrđuju ove pretpostavke.

Primjer apsolutne stabilnosti metoda (nastavak)



Aproksimacije dobivene RK-4 metodom i implicitnom trapeznom metodom za $n = 30$. U ovom slučaju je $100/30 = 3.33 > 2.78$ pa RK-4 nije stabilna.

Primjer apsolutne stabilnosti metoda (nastavak)



Aproksimacije dobivene RK-4 metodom i implicitnom trapeznom metodom za $n = 40$. U ovom slučaju je $100/40 = 2.5 < 2.78$ pa je RK-4 stabilna.

Linearne višekoračne metode

Ponovo ODJ metode iz integracijskih metoda

Kod jednokoračnih metoda je za aproksimaciju y_{i+1} u točki x_{i+1} bilo potrebno poznavanje samo aproksimacije y_i u točki x_i.

Promatrajmo ponovno diferencijalnu jednadžbu

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

Integracijom, te primjenom formule srednje točke za aproksimaciju integrala, slijedi da je

$$y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}) = \int\limits_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} y'(x)\, dx = \int\limits_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x, y(x))\, dx$$

$$\approx 2hf(x_i, y(x_i)).$$

Ponovo ODJ metode iz integracijskih metoda

Gornja formula vodi na rekurzivno definiranu aproksimaciju

$$y_{i+1} = y_{i-1} + 2hf(x_i, y_i).$$

- U ovoj metodi za određivanje vrijednosti y_{i+1} trebamo poznavati prethodne vrijednosti y_i i y_{i-1}, a budući da je se radi o dvije točke, govorimo o dvokoračnoj metodi.
- Aproksimacija y_{i+1} zadana je eksplicitno s izrazom na desnoj strani, pa govorimo o eksplicitnoj metodi.

Ako umjesto formule srednje točke pri računanju integrala primijenimo Simpsonovu formulu, dobivamo drugu aproksimaciju:

Ponovo ODJ metode iz integracijskih metoda

$$y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}) = \int\limits_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x, y(x))\, dx$$

$$\approx \frac{h}{3} \left[f(x_{i-1}, y(x_{i-1})) + 4f(x_i, y(x_i)) + f(x_{i+1}, y(x_{i+1})) \right],$$

što vodi na metodu

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{3} \left[f(x_{i-1}, y_{i-1}) + 4f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}) \right].$$

Ovdje se y_{i+1} javlja i na lijevoj strani i na desnoj strani kao argument funkcije f. Dakle, y_{i+1} je zadan implicitno, pa govorimo o implicitnoj dvokoračnoj metodi.

Uočimo da gornjim formulama ne možemo odrediti y_1, pa za njegovo određivanje treba upotrebiti jednu od jednokoračnih metoda.

Definicija opće višekoračne metode

Općenito, linearne višekoračne metode su oblika

$$\sum_{j=0}^{r} \alpha_j y_{i+1-j} = h \sum_{j=0}^{r} \beta_j f_{i+1-j},$$

gdje je $f_k = f(x_k, y_k)$, $\alpha_0 \neq 0$ i $|\alpha_r| + |\beta_r| \neq 0$.

- Ovu metodu zovemo r-koračna metoda.
- Ukoliko je $\beta_0 = 0$ metoda je eksplicitna,
- a za $\beta_0 \neq 0$ metoda je implicitna.

Uočimo da prikaz višekoračne metode pomoću koeficijenata α_j i β_j nije jedinstven jer npr. koeficijenti $2\alpha_0, \ldots, 2\alpha_r$ i $2\beta_0, \ldots, 2\beta_r$ definiraju istu metodu. Često se koristi normalizacija $\alpha_0 = 1$ te je zapis metode oblika:

$$y_{i+1} + \sum_{j=1}^{r} \alpha_j y_{i+1-j} = \beta_0 f(x_{i+1}, y_{i+1}) + h \sum_{j=1}^{r} \beta_j f_{i+1-j}.$$

Definicija opće višekoračne metode (nastavak)

Primjenom različitih integracijskih metoda možemo dobiti cijeli niz višekoračnih metoda. Integracijom jednadžbe $y'(x) = f(x, y(x))$ na nekom zadanom intervalu $[x_{p-j}, x_{p+k}]$ dobivamo

$$y(x_{p+k}) - y(x_{p-j}) = \int\limits_{x_{p-j}}^{x_{p+k}} f(t, y(t))\, dt.$$

Ukoliko podintegralnu funkciju $f(t, y(t))$ zamijenimo interpolacijskim polinomom P_q stupnja q koji interpolira $f(t, y(t))$ u točkama x_i, tj. ako je

$$P_q(x_i) = y'(x_i) = f(x_i, y(x_i)), \quad i = p, p-1, \ldots, p-q,$$

korištenjem interpolacijskog polinoma u Lagrangeovoj formi

Definicija opće višekoračne metode (nastavak)

$$P_q(x) = \sum_{i=0}^{q} f(x_{p-i}, y(x_{p-i}))\ell_i(x), \quad \ell_i(x) = \prod_{\substack{l=0 \\ l\neq i}}^{q} \frac{x - x_{p-l}}{x_{p-i} - x_{p-l}},$$

dobivamo izraz

$$y(x_{p+k}) - y(x_{p-j}) \approx \sum_{i=0}^{q} f(x_{p-i}, y(x_{p-i})) \int\limits_{x_{p-j}}^{x_{p+k}} \ell_i(t)\, dt$$

$$= h \sum_{i=0}^{q} \beta_{qi} f(x_{p-i}, y(x_{p-i})),$$

gdje smo s β_{qi} označili

$$\beta_{qi} = \frac{1}{h} \int\limits_{x_{p-j}}^{x_{p+k}} \ell_i(t)\, dt = \int\limits_{-j}^{k} \prod_{\substack{l=0 \\ l\neq i}}^{q} \frac{s+l}{-i+l}\, ds, \quad i = 0, \ldots, q.$$

Definicija opće višekoračne metode (nastavak)

Zamjenom vrijednosti $y(x_i)$ aproksimacijama y_i dobivamo višekoračnu metodu oblika

$$y_{p+k} = y_{p-j} + h \sum_{i=0}^{q} \beta_{qi} f_{p-i}.$$

Najpoznatiji primjeri višekoračnih metoda ovog tipa su

- Adams–Bashforthova metoda i
- Adams–Moultonova metoda.

Adams–Bashforthova metoda

U Adams–Bashforthovoj metodi je $k = 1$ i $j = 0$ te metoda glasi:

$$y_{p+1} = y_p + h(\beta_{q0} f_p + \beta_{q1} f_{p-1} + \cdots + \beta_{qq} f_{p-q}).$$

Sljedeća tablica prikazuje koeficijente β_{qi} za ovu metodu, izračunate prema prethodnoj formuli.

	i				
β_{qi}	0	1	2	3	4
β_{0i}	1				
$2\beta_{1i}$	3	-1			
$12\beta_{2i}$	23	-16	5		
$24\beta_{3i}$	55	-59	37	-9	
$720\beta_{4i}$	1901	-2774	2616	-1274	251

Adams–Moultonova metoda

Izborom $k = 0$ i $j = 1$ dobijamo Adams–Moultonove metode:

$$y_{p+1} = y_p + h(\beta_{q0} f_{p+1} + \beta_{q1} f_p + \cdots + \beta_{qq} f_{p+1-q}).$$

Za razliku od eksplicitnih Adams–Basforthovih metoda, ove metode su implicitne. Koeficijenti su im prikazani u sljedećoj tablici.

	i				
β_{qi}	0	1	2	3	4
β_{0i}	1				
$2\beta_{1i}$	1	1			
$12\beta_{2i}$	5	8	-1		
$24\beta_{3i}$	9	19	-5	1	
$720\beta_{4i}$	251	646	-264	106	-19

Ostale višekoračne metode

Od ostalih višekoračnih metoda izvedene iz ovih formula, poznatije su još

- Nyströmove ($k = 1$ i $j = 1$) i
- Milneove metode ($k = 0$ i $j = 2$).

Metode za ODJ iz formula za deriviranje

Niz metoda možemo dobiti i pomoću formula za deriviranje. Neka je $P(x)$ polinom koji interpolira $y(x)$ u točkama x_{n-i}:

$$P(x_{n-i}) = y(x_{n-i}), \quad i = 0, \ldots, k.$$

Korištenjem interpolacijskog polinoma u Lagrangeovoj formi, polinom $P(x)$ možemo prikazati u obliku

$$P(x) = \sum_{i=0}^{k} \ell_i(x) y(x_{n-i}), \quad \ell_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{k} \frac{x - x_{n-j}}{x_{n-i} - x_{n-j}}.$$

Deriviranjem u čvoru x_{n-r} dobivamo

$$P'(x_{n-r}) = \frac{1}{h} \sum_{i=0}^{k} h\ell_i'(x_{n-r}) y(x_{n-i}).$$

Metode za ODJ iz formula za deriviranje (nast.)

Supstitucijama $y_{n-i} \approx y(x_{n-i})$ i $f_{n-r} = f(x_{n-r}, y_{n-r}) \approx P'(x_{n-r})$ dobivamo metodu

$$\sum_{i=0}^{k} \alpha_i y_{n-i} = h f_{n-r}.$$

Uvođenjem oznake $p = (x - x_n)/h$, vidimo da koeficijenti

$$\alpha_i = h\ell_i'(x_{n-r}) = \frac{d}{dp} \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{k} \frac{p+j}{j-i} \Bigg|_{p=-r} = \frac{1}{r-i} \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i,r}}^{k} \frac{j-r}{j-i}$$

ne ovise o čvorovima x_{n-i} i koraku mreže h.

Metode za ODJ iz formula za deriviranje (nast.)

Za $r = 1$ dobivamo eksplicitnu metodu

$$\sum_{i=0}^{k} \alpha_i y_{n-i} = h f_{n-1},$$

dok je za izbor $r = 0$ metoda implicitna:

$$\sum_{i=0}^{k} \alpha_i^* y_{n-i} = h f_n.$$

Zbog alternativnog načina izvoda ovih metoda korištenjem podijeljenih razlika unazad, ove metode poznate su pod nazivom BDF metode (engl. backward difference formulas).

Koeficijenti za eksplicitne i implicitne BDF metode su prikazani u sljedećim dvjema tablicama.

Metode za ODJ iz formula za deriviranje (nast.)

k	η_1	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6	α_7
1	1	1						
2	2	0	1					
3	3	$-\frac{3}{2}$	3	$-\frac{1}{2}$				
4	4	$-\frac{10}{3}$	6	$-\frac{10}{3}$	$\frac{1}{3}$			
5	5	$-\frac{65}{12}$	10	-5	$\frac{5}{3}$	$-\frac{1}{4}$		
6	6	$-\frac{77}{10}$	15	-10	30	$-\frac{3}{2}$	$\frac{1}{5}$	
7	7	$-\frac{203}{20}$	21	$-\frac{35}{2}$	$\frac{35}{3}$	$-\frac{21}{4}$	$\frac{7}{5}$	$-\frac{1}{6}$

Metode za ODJ iz formula za deriviranje (nast.)

k	η_1^*	α_1^*	α_2^*	α_3^*	α_4^*	α_5^*	α_6^*	α_7^*
1	1	1						
2	$\frac{2}{3}$	$\frac{4}{3}$	$-\frac{1}{3}$					
3	$\frac{6}{11}$	$\frac{18}{11}$	$-\frac{9}{11}$	$\frac{2}{11}$				
4	$\frac{12}{25}$	$\frac{48}{25}$	$-\frac{36}{25}$	$\frac{16}{25}$	$-\frac{3}{25}$			
5	$\frac{60}{137}$	$\frac{300}{137}$	$-\frac{300}{137}$	$\frac{200}{137}$	$-\frac{75}{137}$	$\frac{12}{137}$		
6	$\frac{60}{147}$	$\frac{360}{147}$	$-\frac{450}{147}$	$\frac{400}{147}$	$-\frac{225}{147}$	$\frac{72}{147}$	$-\frac{10}{147}$	
7	$\frac{140}{363}$	$\frac{20}{363}$	$-\frac{1470}{363}$	$\frac{4900}{1089}$	$-\frac{1225}{363}$	$\frac{588}{363}$	$-\frac{490}{1089}$	$\frac{20}{363}$

Konzistentnost višekoračne metode

Kao i kod jednokoračnih metoda, prvo ćemo promatrati koliko dobro rješenje diferencijalne jednadžbe

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0, \quad x_0 \in [a, b], \quad y_0 \in \mathbb{R}$$

zadovoljava rekurzivnu formulu

$$\sum_{j=0}^{r} \alpha_j y_{i+1-j} = h \sum_{j=0}^{r} \beta_j f(x_{i+1-j}, y_{i+1-j}),$$

koja definira višekoračnu metodu. U gornju ćemo rekurziju umjesto y_j uvrstiti rješenje diferencijalne jednadžbe $y(x_j)$, a zatim dobiveni izraz razviti u Taylorov red:

$$\sum_{j=0}^{r} \alpha_j y(x_{i+1-j}) - h \sum_{j=0}^{r} \beta_j f(x_{i+1-j}, y(x_{i+1-j})) = \sum_{j=0}^{\infty} C_j h^j.$$

Konzistentnost višekoračne metode (nastavak)

Rekurzivna formula biti će točnija što je više prvih članova u razvoju jednako nuli. Općenito, ukoliko je $C_0 = C_1 = \cdots = C_p = 0$ i $C_{p+1} \neq 0$, kažemo da je metoda reda p. Ukoliko je $p \geq 1$ kažemo da je metoda konzistentna.

Primjer. Tako za metodu

$$y_{i+1} = y_{i-1} + 2hf(x_i, y_i)$$

uvrštavanje točnog rješenja i razvoj u red oko točke x_i daje

$$y(x_{i+1}) - y(x_{i-1}) - 2hy'(x_i) = \sum_{j=0}^{\infty} y^{(j)}(x_i)\frac{h^j}{j!} - \sum_{j=0}^{\infty} y^{(j)}(x_i)\frac{(-1)^j h^j}{j!} - 2hy'($$

$$= \sum_{j=1}^{\infty} y^{(2j+1)}(x_i)\frac{2}{(2j+1)!}h^{2j+1} = \frac{y^{(3)}(x_i)}{3}h^3 + \mathcal{O}(h^5) = \mathcal{O}(h^3),$$

Konzistentnost višekoračne metode (nastavak)

te je ova metoda reda 2. Uočimo da smo iskoristili da je y rješenje diferencijalne jednadžbe, tj. da vrijedi $y'(x_i) = f(x_i, y(x_i))$. Pretpostavili smo da je $y \in C^\infty(a,b)$, no očito je dovoljno zahtijevati da y ima neprekidnu treću derivaciju, tj. $y \in C^3(a,b)$. ■

Dakle, prethodni izraz pokazuje kvalitetu aproksimacije višekoračne metode. U daljnjem tekstu koristiti ćemo malo promijenjen izraz za pogrešku, tzv. lokalnu pogrešku diskretizacije:

$$\tau(x;h) = \frac{1}{h} \sum_{j=0}^{r} \alpha_j y(x + (1-j)h) - \sum_{j=0}^{r} \beta_j y'(x + (1-j)h),$$

gdje je y egzaktno rješenje diferencijalne jednadžbe.

Konzistentnost višekoračne metode (nastavak)

Uočimo da je lokalna pogreška diskretizacije dobivena uvrštavanjem točnog rješenja u rekurziju metode uz zamjenu $x = x_i$. Sada možemo definirati konzistenciju metode.

Definicija. Višekoračnu metodu zovemo konzistentnom ako za svaki $f \in F_1(a, b)$ i $x \in [a, b]$ lokalna pogreška diskretizacije τ zadovoljava

$$\lim_{h \to 0} \tau(x; h) = 0.$$

Ukoliko je

$$\tau(x; h) = \mathcal{O}(h^p)$$

kažemo da je metoda reda p.

Red $(r+1)$-koračne Adams–Bashforthove m.

Pokažimo da je red $(r+1)$-koračne Adams–Bashforthove metode jednak $r+1$.
Iskoristimo li rekurziju za Adams–Bashforthovu metodu uvrštavanjem točnog rješenja $y(x)$, dobivamo

$$\tau(x;h) = \frac{1}{h}(y(x+h)) - y(x)) - \sum_{i=0}^{r} \beta_{ri} y'(x - ih).$$

Radi jednostavnosti, označimo $x_{p+j} = x + jh$, $j = -r, \ldots, 1$.
Sada je lokalna pogreška diskretizacije jednaka

$$\tau(x;h) = \frac{1}{h}(y(x_{p+1})) - y(x_p)) - \sum_{i=0}^{r} \beta_{ri} y'(x_{p-i}).$$

Uvrštavanjem izraza za koeficijente β_{ri}, dobivamo

Red $(r+1)$-koračne Adams–Bashforthove m.

$$\tau(x;h) = \frac{1}{h} \int\limits_{x_p}^{x_{p+1}} y'(t)\,dt - \sum_{i=0}^{r} \left(\frac{1}{h} \int\limits_{x_p}^{x_{p+1}} \ell_i(t)\,dt \right) y'(x_{p-i})$$

$$= \frac{1}{h} \int\limits_{x_p}^{x_{p+1}} y'(t)\,dt - \frac{1}{h} \int\limits_{x_p}^{x_{p+1}} P_r(t)\,dt = \frac{1}{h} \int\limits_{x_p}^{x_{p+1}} [y'(t) - P_r(t)]\,dt,$$

gdje je P_r polinom koji interpolira y' u točkama $x_{p-r}, \ldots, x_p$. Primjenom ocjene za pogrešku interpolacije

$$y'(t) - P_r(t) = \omega(t)\,\frac{y^{(r+2)}(\xi(t))}{(r+1)!}, \quad \xi(t) \in \langle x_{p-r}, x_p \rangle,$$

$$\omega(t) = (t - x_{p-r})(t - x_{p-r+1}) \cdots (t - x_p),$$

Red $(r+1)$-koračne Adams–Bashforthove m.

dobivamo

$$\tau(x;h) = \frac{1}{h} \int\limits_{x_p}^{x_{p+1}} \omega(t) \, \frac{y^{r+2}(\xi(t))}{(r+1)!} \, dt.$$

Budući da su $x_{p-r}, \ldots, x_p$ sve nultočke polinoma ω, ω ne mijenja predznak na intervalu $[x_p, x_{p+1}]$ pa vrijedi

$$\tau(x;h) = \frac{y^{r+2}(\eta)}{(r+1)!} \, \frac{1}{h} \int\limits_{x_p}^{x_{p+1}} \omega(t) \, dt.$$

Supstitucijom $u = (t - x_p)/h$ dobivamo

$$t - x_{p-j} = h(u+j) \quad \text{i} \quad \omega(t) = h^{r+1} u(u+1) \cdots (u+r),$$

pa gornji integral prelazi u

Red $(r+1)$-koračne Adams–Bashforthove m.

$$\tau(x;h) = \frac{y^{r+2}(\eta)}{(r+1)!}\,\frac{1}{h}\,h^{r+1}h\int\limits_0^1 u(u+1)\cdots(u+r)\,du$$

$$= h^{r+1}\,\frac{y^{r+2}(\eta)}{(r+1)!}\int\limits_0^1\prod_{j=0}^{r}(u+j)\,du,$$

te je red $(r+1)$-koračne Adams–Bashforhove metode jednak $r+1$.

Red r-koračne Adams–Moultonove m.

Razmatranjem analognim onom u prethodnom primjeru pokazuje se da je red r-koračne Adams–Moultonove metode za jedan veći od broja koraka i iznosi $r + 1$.

Za r-koračne eksplicitne metode i r-koračne implicitne metode izvedene iz formula za deriviranje, red metode odgovara broju koraka.

Konzistentnost $\Rightarrow$ konvergencija?

Korištenjem iste ideje kao kod Runge–Kutta metoda, koeficijente u r-koračnoj metodi

$$\sum_{j=0}^{r} \alpha_j y_{i+1-j} = h \sum_{j=0}^{r} \beta_j f(x_{i+1-j}, y_{i+1-j})$$

možemo određivati tako da red metode bude što je moguće veći, tj. da poništimo što više prvih članova u Taylorovom razvoju.

- Fiksiranjem $\alpha_0 = 1$ imamo $2r$ slobodnih koeficijenata za eksplicitnu metodu.
- Koeficijenti C_j u Taylorovom razvoju zavisit će o koeficijentima α_j i β_j.

Konzistentnost ⇒ konvergencija? (nastavak)

- Nije teško pokazati da je ta zavisnost linearna, te s $2r$ slobodnih koeficijenata možemo poništiti prvih $2r$ članova razvoja: $C_0 = C_1 = \cdots = C_{2r-1}$.
- Također, može se pokazati da će vrijediti $C_{2r} \neq 0$, pa na taj način možemo konstruirati metodu reda $2r - 1$.
- Slično vrijedi i za r-koračne implicitne metode.
- Ovdje imamo jedan koeficijent više (β_0), te možemo poništiti jedan član više u Taylorovom razvoju i dobiti metodu reda $2r$.

Prirodno se nameće pitanje zašto bismo koristili navedene metode, ako postoje metode dvostrukog reda s istim brojem koraka?!

Konzistentnost $\Rightarrow$ konvergencija? (nastavak)

- Za razliku od jednokoračnih metoda gdje je kozistentnost metode bio dovoljan uvjet za konvergenciju,
- kod višekoračnih metoda, da bi aproksimacija konvergirala k točnom rješenju, uz konzistentnost treba biti zadovoljen još jedan dodatni uvjet, a to je stabilnost.

Primjer. Konstruirajmo dvokoračnu eksplicitnu metodu:

$$y_{i+1} + a_1 y_i + a_2 y_{i-1} = h[b_1 f(x_i, y_i) + b_2 f(x_{i-1}, y_{i-1})]$$

tako da red konzistencije bude što je moguće veći.
Razvojem lokalne pogreške diskretizacije u $x = x_i$

$$\begin{aligned} \tau(x; h) = \frac{1}{h} & [y(x+h) + a_1 y(x) + a_2 y(x-h)] \\ & - [b_1 y'(x) + b_2 y'(x-h)] \end{aligned}$$

Konzistentnost $\Rightarrow$ konvergencija? (nastavak)

u Taylorov red, dobivamo

$$\begin{aligned}\tau(x;h) = \frac{1}{h}\, & y(x)(1 + a_1 + a_2) + y'(x)(1 - a_2 - b_1 - b_2) \\ & + hy''(x)\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}a_2 + b_2\right) + h^2 y'''(x)\left(\frac{1}{6} - \frac{1}{6}a_2 - \frac{1}{2}b_2\right) \\ & + \mathcal{O}(h^3).\end{aligned}$$

Koeficijente a_1, a_2, b_1 i b_2 odredimo tako da poništimo što je moguće više početnih članova u Taylorovom razvoju. To nas vodi na sljedeći sustav jednadžbi.

Konzistentnost $\Rightarrow$ konvergencija? (nastavak)

$$
\begin{aligned}
1 + a_1 + \quad a_2 \qquad\qquad\qquad &= 0 \\
1 \qquad - \quad a_2 - b_1 - \quad b_2 &= 0 \\
\frac{1}{2} \qquad + \frac{1}{2} a_2 \qquad + \quad b_2 &= 0 \\
\frac{1}{6} \qquad - \frac{1}{6} a_2 \qquad - \frac{1}{2} b_2 &= 0
\end{aligned}
$$

Rješenje ovog sustava je $a_1 = 4$, $a_2 = -5$, $b_1 = 4$, $b_2 = 2$, te je metoda definirana rekurzijom

$$y_{i+1} + 4y_i - 5y_{i-1} = h(4f_i + 2f_{i-1}).$$

Ova metoda je reda 3 (jer je $\tau(x; h) = \mathcal{O}(h^3)$, a može se provjeriti da je član uz h^3 različit od nule).

Konzistentnost $\Rightarrow$ konvergencija? Ne!

Promatrat ćemo numeričko rješavanje diferencijalne jednadžbe

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

s egzaktnim rješenjem $y = e^{-x}$. Uz korak $h = 10^{-2}$ i egzaktne početne vrijednosti $y_0 = 1$ i $y_1 = e^{-h}$ dobivamo tablicu:

i	$y_i - y(x_i)$	i	$y_i - y(x_i)$
2	$-0.164 \cdot 10^{-8}$	96	$-0.101 \cdot 10^{58}$
3	$+0.501 \cdot 10^{-8}$	97	$+0.512 \cdot 10^{58}$
4	$-0.300 \cdot 10^{-7}$	98	$-0.257 \cdot 10^{59}$
5	$+0.144 \cdot 10^{-6}$	99	$+0.129 \cdot 10^{60}$
$\vdots$	$\vdots$	100	$-0.652 \cdot 10^{60}$

Iz tablice je jasno da metoda divergira.

Stabilnost višekoračne metode

Višekoračna metoda

$$\sum_{j=0}^{r} \alpha_j y_{i+1-j} = h \sum_{j=0}^{r} \beta_j f(x_{i+1-j}, y_{i+1-j})$$

definira dva polinoma

$$\rho(z) = \sum_{j=0}^{r} \alpha_j z^{r-j} \qquad \text{i} \qquad \sigma(z) = \sum_{j=0}^{r} \beta_j z^{r-j}.$$

Ujedno, ova dva polinoma određuju jednu višekoračnu metodu, pa se često umjesto višekoračne metode koristi naziv (ρ, σ)-shema.

Stabilnost višekoračne metode (nastavak)

Definicija. Za višekoračnu metodu kažemo da je stabilna ako nultočke z_j polinoma $\rho(z)$ zadovoljavaju

1. Sve nultočke su po apsolutnoj vrijednosti manje od 1 ($|z_j| \leq 1$).
2. Ako je $|z_j| = 1$ tada je z_j jednostruka nultočka ($\rho'(z_j) \neq 0$).

Zajedno uvjete 1 i 2 zovemo uvjet stabilnosti. ∎

Za metodu iz prošlog primjera je

$$\rho(z) = z^2 + 4z - 5.$$

Nultočke su mu $z_1 = 1$ i $z_2 = -5$. Budući da je $|z_2| > 1$, ρ ne zadovoljava uvjet stabilnosti, tj. metoda nije stabilna. Sljedeći teorem objašnjava razlog divergencije ove metode.

Stabilnost višekoračne metode (nastavak)

Teorem. Linearna višekoračna metoda je konvergentna ako i samo ako je konzistentna i stabilna. ■

Može se pokazati da stabilna r-koračna metoda ima red

$$p \leq \begin{cases} r+1, & \text{ako je } r \text{ neparan,} \\ r+2, & \text{ako je } r \text{ paran.} \end{cases}$$

Konvergencija višekoračnih metoda

Kao i kod jednokoračnih metoda, kada govorimo o konvergenciji metode mislimo na ponašanje globalne pogreške diskretizacije:

$$e(x; h) = y_n - y(x),$$

gdje je $x \in \langle a, b \rangle$, $h = h_n = (x - a)/n$.

Jasno je da globalna pogreška diskretizacije ovisi o lokalnoj pogrešci diskretizacije. Međutim, to nije jedini izvor pogreške.

- Da bismo startali r-koračnu metodu, prvo je potrebno izračunati r početnih vrijednosti $y_0, \ldots, y_{r-1}$.
- Dok y_0 možemo odrediti iz početnog uvjeta diferencijalne jednadžbe, ostale vrijednosti moramo odrediti nekom drugom, najčešće jednokoračnom, metodom.

Konvergencija višekoračnih metoda (nastavak)

- U svakom slučaju, pri njihovom određivanju javit će se određena pogreška ε_i.

$$y(x_i) = y_i + \varepsilon_i, \quad i = 0, \ldots, r-1.$$

- Ova pogreška ne ovisi o promatranoj višekoračnoj metodi, već o načinu na koji određujemo početne vrijednosti.
- Očito je, da ako želimo da globalna pogreška diskretizacije teži nuli kada $n \to \infty$, pogreške početnih vrijednosti trebaju zadovoljavati

$$\lim_{n\to\infty} \varepsilon_i = 0, \quad i = 0, \ldots, r-1.$$

Sada možemo izreći definiciju konvergencije višekoračne metode.

Konvergencija višekoračnih metoda (nastavak)

Definicija. Višekoračnu metodu zovemo konvergentnom ako je

$$\lim_{n\to\infty} e(x; h_n) = 0, \quad h_n = \frac{x-a}{n}, \quad n = 1, 2, \ldots$$

za sve $x \in [a, b]$, sve $f \in F_1(a, b)$ i sve y_i, $i = 0, \ldots, r-1$ za koje je

$$\lim_{n\to\infty} (y(x_i) - y_i) = 0, \quad i = 0, \ldots, r-1.$$

Pokažimo sada vezu između stabilnosti i konzistentnosti te konvergencije linearne višekoračne metode.

Konvergencija višekoračnih metoda (nastavak)

Teorem. Stabilne i konzistentne linearne višekoračne metode su konvergentne.

Dokaz. Neka je y egzaktno rješenje jednadžbe

$$y' = f(x, y), \quad y(x_0) = y_0, \quad f \in F_1(a, b).$$

Fiksirajmo $x \in [a, b]$ i za $n \in \mathbb{N}$ definirajmo $h = h_n = (x - x_0)/n$. S y_i označit ćemo aproksimaciju dobivenu linearnom višekoračnom metodom

$$\begin{aligned} y_i + \alpha_1 y_{i-1} + \cdots + \alpha_r y_{i-r} =& h(\beta_0 f_i + \beta_1 f_{i-1} + \cdots + \beta_r f_{i-r}), \\ & i = r, r+1, \ldots, \end{aligned}$$

uz

$$y_i = y(x_i) + \varepsilon_i, \quad i = 0, \ldots, r-1,$$

gdje je $\lim\limits_{n\to\infty} \varepsilon_i = 0$.

Konvergencija višekoračnih metoda (nastavak)

Uvjet $\lim\limits_{n\to\infty} \varepsilon_i = 0$ znači da postoji funkcija $\varepsilon(h)$ takva da je $|\varepsilon_i| \leq \varepsilon(h)$ za $i = 0, \ldots, r-1$ i $\lim\limits_{h\to 0} \varepsilon(h) = 0$. Zbog konzistentnosti metode, lokalna pogreška diskretizacije kada računamo točku x_i

$$\tau(x_i; h) = \tau_i = \frac{1}{h}\left[y(x_i) + \sum_{j=1}^{r} \alpha_j y(x_{i-j})\right] - \sum_{j=0}^{r} \beta_j f(x_{i-j}, y(x_{i-j}))$$

zadovoljava

$$\lim_{h\to 0} \tau_i = 0,$$

tj. τ_i možemo omeđiti nekom funkcijom $t(h)$, $|\tau_i| \leq t(h)$, koja zadovoljava $\lim\limits_{h\to 0} t(h) = 0$.

Konvergencija višekoračnih metoda (nastavak)

Oduzimanjem jednakosti za lokalnu pogrešku diskretizacije pomnožene s h od rekurzije metode dobivamo rekurziju za pogreške $e_i = y_i - y(x_i)$:

$$e_i + \alpha_1 e_{i-1} + \cdots + \alpha_r e_{i-r} = c_i, \quad i = r, r+1, \ldots$$

uz

$$e_i = \varepsilon_i, \quad i = 0, \ldots, r-1$$

i

$$c_i = h \sum_{j=0}^{r} \beta_j [f(x_{i-j}, y_{i-j}) - f(x_{i-j}, y(x_{i-j}))] - h\tau_i.$$

Budući da je $f \in F_1(a,b)$, postoji konstanta $m > 0$ takva da je

$$\left| \frac{\partial f}{\partial y}(x,y) \right| \leq m \quad \forall x \in [a,b] \quad \text{i} \quad \forall y \in \mathbb{R},$$

Konvergencija višekoračnih metoda (nastavak)

te vrijedi

$$|f(x_k, y_k) - f(x_k, y(x_k))| = \left| \frac{\partial f}{\partial y}(x_k, \eta)(y_k - y(x_k)) \right| \leq m|e_k|.$$

Iskoristivši ovu nejednakost, dobivamo da c_i zadovoljava

$$|c_i| \leq hM \sum_{j=0}^{r} |e_{i-j}| + |h|t(h),$$

gdje je

$$M = m \max_{j=0,\ldots,r} |\beta_j|.$$

Konvergencija višekoračnih metoda (nastavak)

Pomoću vektora

$$\mathbf{e}_i = \begin{bmatrix} e_{i-r+1} \\ e_{i-r+2} \\ \vdots \\ e_i \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^r,$$

i matrice

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & \ldots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ldots & 0 & 1 \\ -\alpha_r & \ldots & \ldots & -\alpha_1 \end{bmatrix}$$

Konvergencija višekoračnih metoda (nastavak)

rekurziju za pogreške možemo zapisati u ekvivalentnom vektorskom zapisu

$$\mathbf{e}_i = \mathbf{A}\mathbf{e}_{i-1} + c_i \mathbf{b}, \quad \mathbf{e}_0 = \begin{bmatrix} \varepsilon_0 \\ \vdots \\ \varepsilon_{r-1} \end{bmatrix}.$$

- Uočimo da polinom ρ, definiran višekoračnom metodom, je ujedno i svojstveni polinom matrice $\mathbf{A}$ (matrica pratilac polinoma ρ).
- Stabilnost metode povlači da su sve nultočke od ρ, tj. svojstvene vrijednosti od $\mathbf{A}$, po apsolutnoj vrijednosti manje od 1, a ako su jednake 1 tada su jednostruke.

Konvergencija višekoračnih metoda (nastavak)

- To znači da postoji vektorska norma $\| \ \|$ na $\mathbb{C}^r$ takva da za induciranu matričnu normu vrijedi $\|\mathbf{A}\| \leq 1$.
- Budući da su sve norme na $\mathbb{C}^r$ ekvivalentne, postoji konstanta $k > 0$ takva da je

$$\frac{1}{k}\|\mathbf{e}_i\| \leq \sum_{j=0}^{r-1} |e_{i-j}| = \|\mathbf{e}_i\|_1 \leq k\|\mathbf{e}_i\|.$$

Podsjetnik. Za sve A i sve $\varepsilon > 0$ postoji operatorska norma $\| \ \|_*$ takva da je

$$\|A\|_* \leq \rho(A) + \varepsilon.$$

Norma $\| \ \|_*$ ovisi i o A, i o ε.

Konvergencija višekoračnih metoda (nastavak)

Ako svaka svojstvena vrijednost λ od A takva da je $|\lambda| = \rho(A)$ ima geometrijsku kratnost 1, tada postoji takva norma za koju je

$$\|A\|_* = \rho(A).$$

(Ovaj dio tvrdnje se dokazuje pomoću dokaza prvog dijela za $\varepsilon = \rho(A) - \mu$, gdje μ jednaka apsolutnoj vrijednosti druge po veličini svojstvene vrijednosti od A.) ■

Uočivši da je

$$|e_{i-r}| \leq \sum_{i=1}^{r} |e_{i-j}| \leq k\|\mathbf{e}_{i-1}\|$$

iz nejednakosti za $|c_i|$ slijedi

Konvergencija višekoračnih metoda (nastavak)

$$|c_i| \leq |h| M k (\|\mathbf{e}_i\| + \|\mathbf{e}_{i-1}\|) + |h| t(h).$$

Iskoristivši vektorski zapis rekurzije za pogrešku i činjenice da je

$$\|\mathbf{b}\| \leq k \|\mathbf{b}\|_1 = k,$$

slijedi da je

$$\|\mathbf{e}_i\| \leq |h| M k^2 \|\mathbf{e}_i\| + (1 + |h| M k^2) \|\mathbf{e}_{i-1}\| + k |h| t(h), \quad j = 0, 1, \ldots$$

odnosno

$$(1 - |h| M k^2) \|\mathbf{e}_i\| \leq (1 + |h| M k^2) \|\mathbf{e}_{i-1}\| + k |h| t(h), \quad j = 0, 1, \ldots$$

i

$$\|\mathbf{e}_0\| \leq k \|\mathbf{e}_0\|_1 \leq k r \varepsilon(h).$$

Konvergencija višekoračnih metoda (nastavak)

Za

$$|h| \leq \frac{1}{2Mk^2}$$

je

$$1 - |h|Mk^2 \geq \frac{1}{2}$$

i

$$\frac{1 + |h|Mk^2}{1 - |h|Mk^2} \leq 1 + 4|h|Mk^2.$$

Sada prethodna nejednakost za $\|\mathbf{e}_i\|$ prelazi u

$$\|\mathbf{e}_i\| \leq (1 + 4|h|Mk^2)\|\mathbf{e}_{i-1}\| + 2k|h|t(h), \quad j = 0, 1, \ldots$$

Konvergencija višekoračnih metoda (nastavak)

Iz leme koja prethodi teoremu o konvergenciji jednokoračne metode slijedi

$$\|\mathbf{e}_n\| \leq e^{4n|h|Mk^2} kr\varepsilon(h) + t(h)\frac{e^{4n|h|Mk^2} - 1}{2Mk},$$

tj. za $x \neq x_0$, $h = h_n = (x - x_0)/n$, $|h_n| \leq 1/(2Mk^2)$ vrijedi

$$\|\mathbf{e}_n\| \leq e^{4Mk^2|x-x_0|} kr\varepsilon(h_n) + t(h_n)\frac{e^{4Mk^2|x-x_0|} - 1}{2Mk}.$$

Dakle, postoje konstante C_1 i C_2, nezavisne o h, takve da je

$$|e(x;h)| = |e_n| = |y_n - y(x_n)| \leq C_1\varepsilon(h_n) + C_2 t(h_n)$$

za dovoljno veliki n. Konvergencija metode sada slijedi iz činjenice da je

$$\lim_{n\to\infty} \varepsilon(h_n) = \lim_{n\to\infty} \tau(h_n) = 0.$$

Konvergencija višekoračnih metoda (nastavak)

Iz zadnje ocjene u dokazu prethodnog torema dobivamo sljedeći korolar.

Korolar. Neka je linearna višekoračna metoda stabilna i konzistentna reda p, te $f \in F_p(a,b)$. Tada globalna pogreška diskretizacije zadovoljava

$$e(x; h_n) = \mathcal{O}(h_n^p)$$

za sve $h_n = (x - x_0)/n$ čim pogreške ε_i zadovoljavaju

$$|\varepsilon_i| \leq \varepsilon(h_n), \qquad i = 0, \ldots, r-1$$

uz $\varepsilon(h_n) = \mathcal{O}(h_n^p)$ za $n \to \infty$. ■

Konvergencija višekoračnih metoda (nastavak)

Ovaj korolar ujedno kazuje koju metodu moramo izabrati za određivanje početnih vrijednosti $y_0, \ldots, y_{r-1}$.

- Da bismo postigli da se pogreška ponaša kao $\mathcal{O}(h^p)$, tako se mora ponašati i pogreška početnih vrijednosti.
- Ukoliko za njihovo određivanje koristimo jednokoračnu metodu reda $\tilde{p}$, iz teorema o konvergenciji jednokoračnih metoda slijedi da pogreška početnih vrijednosti zadovoljava

$$|e(x_i; h)| \leq |h|^{\tilde{p}} N \, \frac{e^{M|x_i - x_0|} - 1}{M} = |h|^{\tilde{p}} N \frac{e^{Mi|h|} - 1}{M}.$$

Primjenom teorema srednje vrijednosti dobivamo da postoji $\theta \in \langle 0, h \rangle$ takav da je

$$e^{Mi|h|} - 1 = Mi|h| e^{Mi\theta} \leq Mi|h| e^{Mi|h|},$$

Konvergencija višekoračnih metoda (nastavak)

pa je

$$|e(x_i; h)| \leq |h|^{\tilde{p}} N i |h| e^{Mi|h|}.$$

Kako je za početne vrijednosti r-koračne metode $0 \leq i \leq r-1$, vrijedi

$$|e(x_i; h)| \leq |h|^{\tilde{p}+1} N(r-1) e^{M(r-1)|h|},$$

te možemo izabrati metodu reda $\tilde{p} = p - 1$ da bi se pogreška višekoračne metode ponašala kao $\mathcal{O}(h^p)$.

Rješavanje implicitne metode

Dosad je ostalo otvoreno pitanje kako izračunati y_{i+1} u implicitnoj metodi (korektor)

$$y_{i+1} + \sum_{j=1}^{k} \alpha_j^* y_{i+1-j} = \beta_0^* h f(x_{i+1}, y_{i+1}) + h \sum_{j=1}^{k} \beta_j^* f_{i+1-j}.$$

Ako označimo

$$c = -\sum_{j=1}^{k} \alpha^* y_{i+1-j} + h \sum_{j=1}^{k} \beta_j^* f_{i+1-j}, \quad \varphi(y) = \beta_0^* h f(x_{i+1}, y) + c,$$

y_{i+1} je rješenje nelinearne jednadžbe $y = \varphi(y)$.

Rješavanje implicitne metode (nastavak)

Budući da možemo izabrati dovoljno malen korak integracije h takav da je nejednakost

$$|\varphi'(y)| = h|\beta_0^*| \left| \frac{\partial f(x_{i+1}, y)}{\partial y} \right| < 1$$

zadovoljena, slijedi da jednostavne iteracije

$$y^{[m+1]} = \varphi(y^{[m]}), \quad m = 0, 1, 2, \ldots$$

konvergiraju prema rješenju jednadžbe. Za odabir početne aproksimacije $y^{[0]}$ koristi se neka od eksplicitnih metoda (prediktor)

$$y_{i+1} + \sum_{j=1}^{\bar{k}} \alpha_j y_{i+1-j} = h \sum_{j=1}^{\bar{k}} \beta_j f_{i+1-j}.$$

Prediktor–korektor par

Sada možemo zapisati cijeli algoritam:

$$\begin{aligned} y_{i+1}^{[0]} &= -\sum_{j=1}^{\bar{k}} \alpha_j y_{i+1-j} + h \sum_{j=1}^{\bar{k}} \beta_j f_{i+1-j}, \\ y_{i+1}^{[m+1]} &= \beta_0^* h f(x_{i+1}, y_{i+1}^{[m]}) - \sum_{j=1}^{k} \alpha_j^* y_{i+1-j} + h \sum_{j=1}^{k} \beta_j^* f_{i+1-j}, \\ y_{i+1} &= y_{i+1}^{[M]}. \qquad\qquad m = 0, \ldots, M-1 \end{aligned}$$

Broj iteracija (M) može biti unaprijed zadan ili se iteracije provode dok se jednadžba ne riješi do na neku unaprijed zadanu točnost. U primjeni, broj iteracije nije velik, uvijek se radi o nekoliko iteracija.

Odabir prediktora i korektora

Znamo da jednostavne iteracije konvergiraju linearno prema rješenju jednadžbe. Konvergenciju možemo ubrzati primjenom Newtonove metode.

Još nam je ostalo za promotriti kako odabrati korektor–prediktor par.

- Točnost metode definirana je s točnošću korektora, tj. implicitne metode.
- Ako je red prediktora, eksplicitne metode kojom određujemo početnu aproksimaciju $y_{i+1}^{[0]}$, za jedan veći od reda korektora početna će aproksimacija biti pretočna.

Odabir prediktora i korektora (nastavak)

- S druge strane, ako je red prediktora manji od reda korektora, početna aproksimacija je preslaba, te bi trebalo previše iteracija korektora da se nelinearna jednadžba riješi na zadovoljavajuću točnost.
- Stoga je uobičajeno da se za prediktor–korektor par uzimaju eksplicitna i implicitna metoda istoga reda.
  - Često korišten par je k-koračna Adams–Bashforthova metoda kao prediktor i $(k-1)$-koračna Adams–Moultonova metoda kao korektor.
  - Uz ovakav odabir prediktor-korektor para govorimo o Adams–Bashforth–Moultonovim metodama.
  - Isto tako, eksplicitna i implicitna k-koračna metoda izvedena iz formula za numeričko deriviranje koristi se kao prediktor-korektor par.

Apsolutna stabilnost višekoračnih metoda

Želimo pronaći interval apsolutne stabilnosti za višekoračnu metodu oblika

$$y_{i+1} + \sum_{j=1}^{r} \alpha_j y_{i+1-j} = \beta_0 f(x_{i+1}, y_{i+1}) + h \sum_{j=1}^{r} \beta_j f(x_{i+1-j}, y_{i+1-j}).$$

i to ponovo radimo primjenom metode na problem

$$y' = \lambda y, \quad y(0) = y_0, \qquad \lambda < 0.$$

Umetanjem $f(x_i, y_i) = \lambda y_i$ dobivamo da aproksimacije y_i generirane višekoračnom metodom zadovoljavaju linearnu homogenu diferencijsku jednadžbu

$$(1 - \beta_0 h\lambda) y_{i+1} + \sum_{j=1}^{r} (\alpha_j - \beta_j h\lambda) y_{i+1-j} = 0.$$

Apsolutna stabilnost višekoračnih metoda (n.)

Dakle, tražimo vrijednosti produkta $h\lambda$ takve da rješenje prethodne diferencijske jednadžbe teže ka nuli kada $i \to \infty$.

Karakteristični polinom metode je u tom slučaju dan sa

$$\pi(z; h\lambda) = (1 - \beta_0 h\lambda) z^r + \sum_{j=1}^{r} (\alpha_j - \beta_j h\lambda) z^{r-j}.$$

Korijeni z_j ovog polinoma mogu biti kompleksni, ili mogu imati kratnost veću od 1. Iz teorije diferencijskih jednadžbi znamo da je rješenje homogene diferencijske jednadžbe dano sa

$$y_i = \sum_{j=1}^{r} (c_{j,0} z_j^i + c_{j,1} i z_j^i + \cdots + c_{j,m_j} i^{m_j - 1} z_j^i),$$

pri čemu je m_j kratnost korijena z_j, a $c_{j,k}$ su konstante.

Apsolutna stabilnost višekoračnih metoda (n.)

Prema tome, uvjet da rješenje diferencijske jednadžbe teži ka nuli se svodi na

$$|z_j| < 1, \qquad i = 1, \ldots, r.$$

Npr. intervali apsolutne stabilnosti Adamsovih metoda dani su u sljedećoj tablici

Br. koraka	Bashforth	Moulton	prediktor–korektor
2	$\langle -1, 0 \rangle$	$\langle -\infty, 0 \rangle$	$\langle -2, 0 \rangle$
3	$\langle -0.55, 0 \rangle$	$\langle -6.0, 0 \rangle$	$\langle -1.8, 0 \rangle$
4	$\langle -0.3, 0 \rangle$	$\langle -3.0, 0 \rangle$	$\langle -1.3, 0 \rangle$
5	$\langle -0.2, 0 \rangle$	$\langle -1.8, 0 \rangle$	$\langle -0.95, 0 \rangle$

Apsolutna stabilnost višekoračnih metoda (n.)

- Primijetimo da osim dvokoračne Adams–Moultonove metode, niti jedna od implicitnih Adams–Moultonovih metoda nije apsolutno stabilna (na cijelom intervalu $\langle -\infty, 0\rangle$).
- Također, za razliku od Runge–Kutta metoda, intervali apsolutne stabilnosti za prediktor–korektor metode se sužavaju kako se red metode povećava.
- Međutim, ako nemamo problema sa apsolutnom stabilnosti tada je prediktor–korektor par praktičiji za upotrebu jer ima manji broj izvrednjavanja funkcije f, neovisno o redu metode.