Osnovna numerična orodja

Kemijsko inženirstvo 2
Numerično reševanje navadnih diferencialnih enačb (Vir: Vir: Plazl in Lakner: Uvod v modeliranje procesov)

Univerza v Ljubljani
Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo

Numerično reševanje navadnih diferencialnih enačb

Področje navadnih diferencialnih enačb ni samo eno najpomembnejših delov matematike, temveč je bistveno orodje pri modeliranju na praktično vseh naravoslovnih in tehničnih področjih (na primer reakcijska kinetika, sistemi mas in vzmeti, kapacitivnost, upornost, induktivnost, nihala, idr.) kot tudi v ekonomiji. Uporabnost navadnih diferencialnih enačb v uporabni matematiki je posledica dejstva, da se da veliko naravnih zakonov zapisati s pomočjo sprememb posameznih količin. Na primer, enačba

$$\frac{dT}{dt} = -0{,}27(T-60)^{5/4}$$

približno opisuje spremembo temperature, T, telesa, ki izgublja toploto zaradi konvekcije v okolju konstantne temperature. To je diferencialna enačba prvega reda, saj nastopa v njej prvi odvod neznane funkcije.

Če enačba vsebuje odvode najvišjega reda, *n*, pravimo, da je to diferencialna enačba *n*-tega reda. Na primer, naslednja enačba drugega reda opisuje oscilacijo mase, pritrjene na vzmet, kjer je upor sredstva proporcionalen kvadratu hitrosti

$$\frac{d^2x}{dt^2} + 4\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + 0{,}6x = 0$$

in je *x* odmik, *t* pa čas.

Splošna rešitev diferencialne enačbe je množica vseh odvedljivih funkcij, ki dano enačbo rešijo na nekem odseku. Če imamo poleg diferencialne enačbe dane še začetne pogoje, govorimo o *začetnem problemu*.

Pri analitičnemu reševanju diferencialne enačbe *n*-tega reda splošna rešitev običajno vsebuje *n* konstant, ki jih določimo s pomočjo *n* začetnih oziroma robnih pogojev. Analitične metode so omejene na določene razrede enačb. Numerične metode teh omejitev nimajo. Rešitev začetnega problema predstavlja tabela vrednosti iskane funkcije pri izbranih vrednostih neodvisne spremenljivke. Seveda pa moramo pri spremembi začetnih pogojev vse ponovno izračunati.
Tipični začetni problem prvega reda je oblike

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \qquad y(x_0) = y_0$$

Analitična metoda

Primer:

$$\frac{dy}{dx} = -2x - y; \qquad y(0) = -1$$

Diferencialna enačba je linearna, prvega reda, s pripadajočo homogeno enačbo

$$\frac{dy}{dx} + y = 0,$$

ki ima za splošno rešitev enoparametrično družino funkcij $y_h(x) = Ce^{-x}$.
Variacija konstante nam da partikularno rešitev $y_p(x) = 2 - 2x$. Zato je splošna rešitev dane nehomogene enačbe njuna vsota

$$y(x) = Ce^{-x} + 2 - 2x.$$

Z upoštevanjem začetnega pogoja dobimo rešitev danega začetnega problema

$$y(x) = -3e^{-x} + 2 - 2x.$$

Z *Mathematico* dobimo splošno rešitev diferencialne enačbe takole:

```
DSolve[y′[x] == -2 x - y[x], y[x], x] // Simplify
{{y[x] → 2 - 2 x + ⅇ^-x C[1]}}
```

Rešitev začetnega problema pa z:

```
DSolve[{y'[x] == -2 x - y[x], y[0] == -1}, y[x], x] // Simplify
{{y[x] → 2 - 3 ⅇ^-x - 2 x}}
```

Metoda z uporabo Taylor-jeve formule

Zgornji začetni problem lahko aproksimativno rešimo tudi s pomočjo Taylor-jeve formule reda *n* iskane funkcije okrog začetne točke $x_0 = 0$

$$y(x_0 + h) = \sum_{k=0}^{n} \frac{y^{(k)}(x_0)}{k!} h^k + R_n \ ,$$

kjer je R_n napaka aproksimacije. S pomočjo začetnega pogoja in odvajanjem diferencialne enačbe si lahko korak za korakom pripravimo odvode iskane funkcije v začetni točki

$$y'(x_0) = y'(0) = -2(0) - (-1) = 1 \,,$$

$$y''(x) = -2 - y', \qquad y''(0) = -2 - 1 = -3 \,,$$

$$y'''(x) = -y'', \qquad y'''(0) = 3 \,,$$

$$y^{(4)}(x) = -y''', \qquad y^{(4)}(0) = -3$$

Če vstavimo dobljeno v Taylor-jevo formulo dobimo

$$y(h) = -1 + 1h - 1{,}5h^2 + 0{,}5h^3 - 0{,}125h^4 + R_4 \ .$$

Pri izračunu zadnjih dveh vrednosti smo v dvomih o njihovi pravilnosti, če ne vzamemo Taylor-jevo formulo višjega reda.

Univerza v Ljubljani
Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo

Primerjava analitičnih rešitev in rešitev po Taylor-jevi formuli.

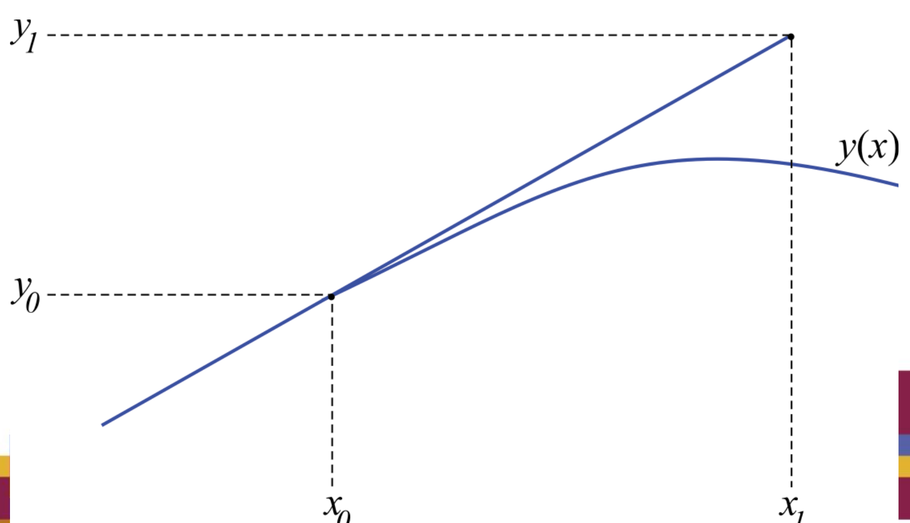
x	Y_{Taylor}	$y_{\text{analitično}}$
0,0	-1,00000	-1,00000
0,1	-0,91451	-0,91451
0,2	-0,85620	-0,85619
0,3	-0,82251	-0,82245
0,4	-0,81120	-0,81096
0,5	-0,82031	-0,81959

Euler-jeva metoda

Vemo, da je v Taylor-jevi formuli napaka majhna, če je korak, *h*, majhen. Če je *h* dejansko dovolj majhen, potem lahko za dobro natančnost vzamemo v Taylor-jevi formuli le malo členov. Pri tem gre Euler-jeva metoda najdalj, saj uporabi le Taylor-jevo enačbo prvega reda

$$y(x_0+h)=y(x_0)+y'(x_0)h+\frac{y''(\xi)}{2}h^2,\ \text{za nek}\ \xi\ \text{med}\ x_0\ \text{in}\ x_0+h.$$

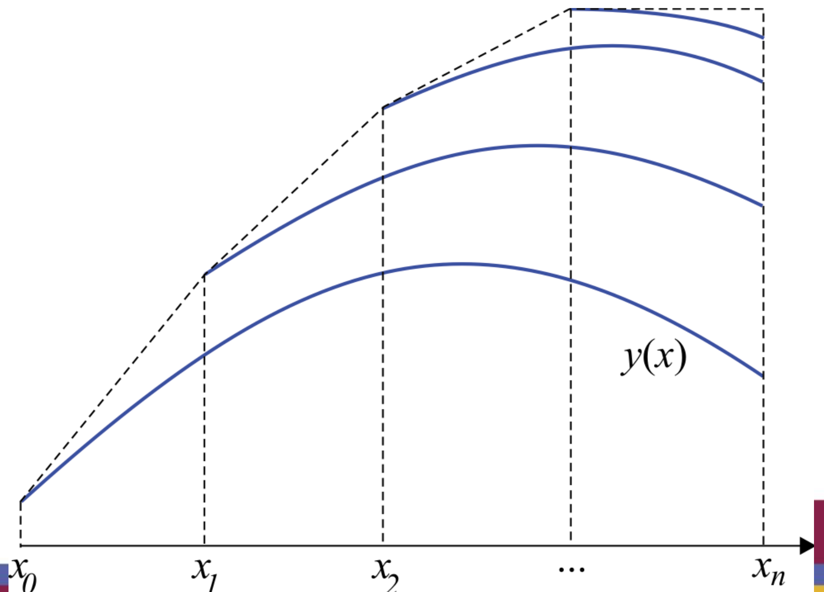
Pri uporabi te enačbe je vrednost $y(x_0)$ dana z začetno vrednostjo. Vrednost odvoda $y'(x_0)$ pa z $f(x_0,y_0)$, ki je dana z diferencialno enačbo $y'(x)= f(x,y)$.



To metodo moramo uporabljati po korakih. Ko hočemo določiti vrednost funkcije rešitve v točki $x_0 + 2h$, potrebujemo že izračunano vrednost v točki $x_0 + h$. Potem se pomaknemo v točko $x_0 + 3h$ in tako naprej. Seveda je lahko korak, h, tudi negativen, če nas zanima rešitev začetnega problema levo od začetne točke, x_0. Euler-jevo metodo lahko zapišemo v obliki zaporedja približkov

$$y_n = y_{n-1} + hf(x_{n-1}, y_{n-1}), \quad x_n = x_{n-1} + h \quad \text{za } n = 1, 2, 3, \ldots$$

y_n je približek za točno vrednost $y(x_n)$. Pri tem se moramo zavedati, da je delna napaka Taylor-jeve formule reda h^2 pri enem koraku, po mnogih korakih pa postane reda h.



Za primer si oglejmo predhodni začetni problem

$$\frac{dy}{dx} = -2x - y, \qquad y(0) = -1,$$

kjer je računanje enostavno. V tem primeru vzemimo $h = 0{,}1$.

Primerjava izračunanih vrednosti.

x_n	y_n	$f(x_n,y_n)$	$hf(x_n,y_n)$
0,0	-1,00000	1,00000	0,10000
0,1	-0,90000	0,70000	0,07000
0,2	-0,83000	0,43000	0,04300
0,3	-0,78700	0,18700	0,01870
0,4	-0,76830	-0,03170	

Analitična vrednost rešitve v točki 0,4 je –0,81096, napaka pa je $-0{,}04266$. Torej se je samo v štirih korakih nabrala zelo velika napaka, saj je rezultat natančen samo na eno decimalno mesto. Če hočemo doseči natančnost štirih decimalnih mest, moramo napako približno zmanjšati za množenec 400. V skladu s sorazmernostjo celokupne napake, moramo korak, *h*, za želeno natančnost zmanjšati za približno 430-krat na 0,00024. To pa pomeni uporabo povratne Euler-jeve formule kar 1667-krat.

Rungejeva sredinska metoda

Euler-jevo enačbo lahko izpeljemo tudi iz osnovne formule integralnega računa

$$y(x_n) = y(x_{n-1}) + h\left(\frac{1}{h}\int_{x_{n-1}}^{x_n} y'(t)dt\right).$$

Izraz v oklepaju je povprečna vrednost funkcije $y'(t)$ na intervalu $\left(x_{n-1}, x_n\right)$. Euler-jevo enačbo dobimo, če to povprečno vrednost približno predstavimo z vrednostjo integrirane funkcije v levem krajišču $y'(x_{n-1}) = f(x_{n-1}, y_{n-1})$.

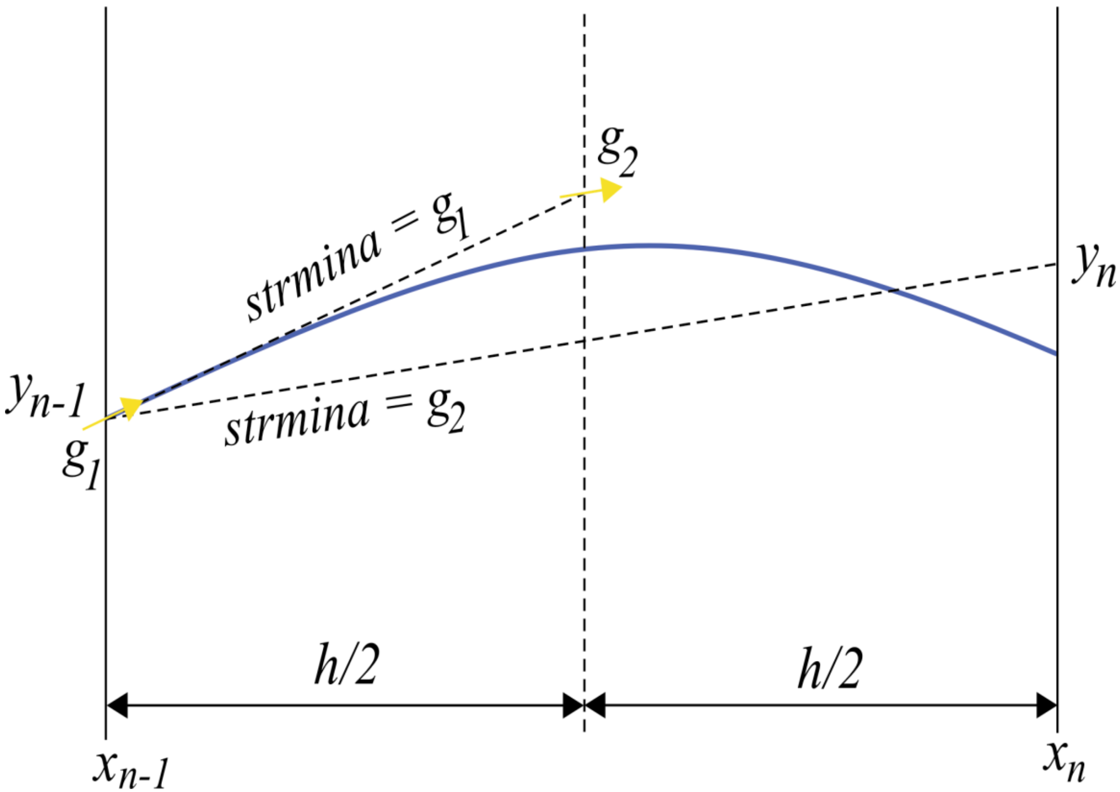
Boljši približek pa bi dobili, če bi uporabili funkcijsko vrednost v srednji točki odseka $y'(x_{n-1} + h/2)$. Toda za to vrednost bi potrebovali iz diferencialne enačbe $y'(x) = f(x, y(x))$ vrednost $y(x_{n-1} + h/2)$. Ideja Carla Rungea iz leta 1895 je bila v približku te vrednosti s pomočjo Euler-jeve formule s korakom *h*/2, ki pa ima sedaj manj neposreden učinek

$$g_1 = f(x_{n-1}, y_{n-1})$$

$$y_{n-1/2} = y_{n-1} + \frac{h}{2} g_1$$

$$g_2 = f(x_{n-1} + \frac{h}{2}, y_{n-1/2})$$

$$y_n = y_{n-1} + hg_2.$$

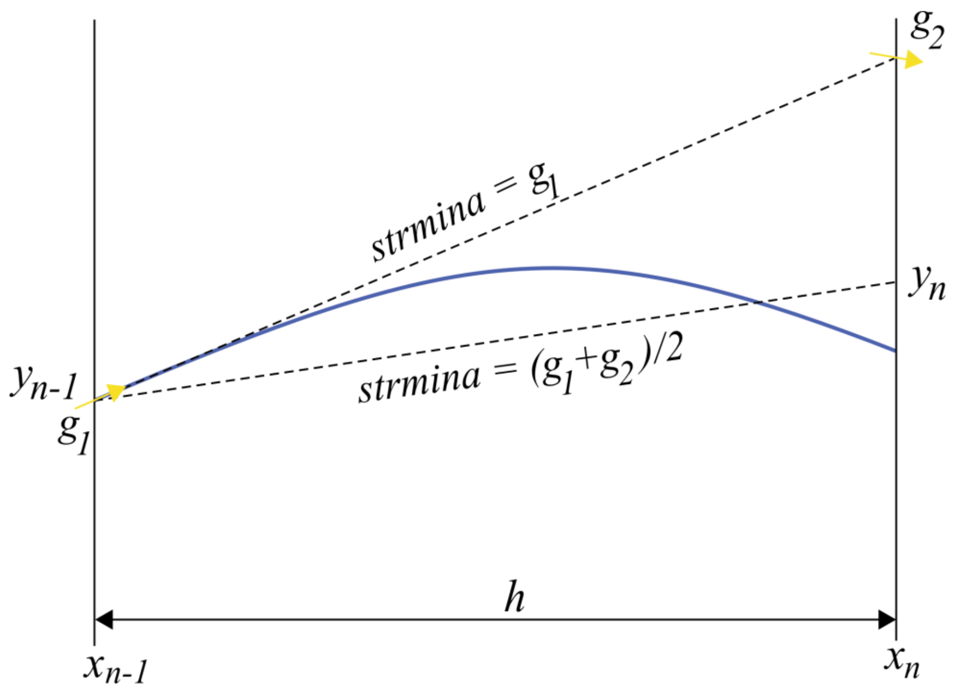


Metoda je bistveno natančnejša od Euler-jeve metode. Če pri zgornjem primeru korak, *h,* podvojimo na h = 0,2, dobimo pri izračunu rešitve začetnega problema v točki 0,4 napako le 0,0062. Korak smo podvojili zato, da se ohrani število izračunov funkcije $f(x,y)$, ki so najbolj ključen del postopka.

Runge-jeva trapezna metoda

Drug zelo dober približek povprečne vrednosti funkcije $y'(t)$ na intervalu (x_{n-1},x_n) je povprečna vrednost v krajiščih, $\left(y'(x_{n-1})+y'(x_n)\right)/2$. Zopet ne moremo iz diferencialne enačbe neposredno izračunati $y'(x_n)$. Za približek te vrednosti uporabimo Euler-jevo enačbo s korakom *h*.

$$g_1 = f(x_{n-1}, y_{n-1})$$
$$g_2 = f(x_{n-1}+h, y_n + hg_1)$$
$$y_n = y_{n-1} + \frac{h}{2} g_1 + \frac{h}{2} g_2$$



To enačbo je izpeljal Runge leta 1895. Natančnost le-te je primerljiva z natančnostjo Runge-ove sredinske formule. Pokazati se da, da je celokupna napaka zgornjih dveh formul po velikem številu korakov sorazmerna s h^2. To pomeni, da se napaka pri razpolovitvi koraka, h, približno deli s 4.

Runge–Kutta: običajna metoda četrtega reda

Ta metoda je najbolj znana in nosi ime po Runge-ju. To metodo je predlagal Kutta leta 1901. Za en korak moramo izračunati štiri funkcijske vrednosti $f(x,y)$.

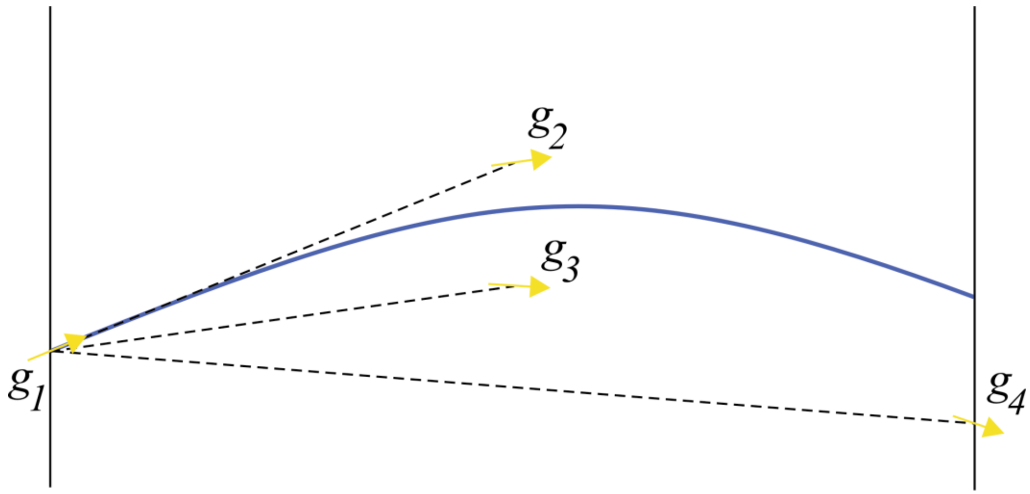
$$g_1 = f(x_{n-1}, y_{n-1})$$

$$g_2 = f(x_{n-1} + \frac{h}{2}, y_{n-1} + \frac{h}{2} g_1)$$

$$g_3 = f(x_{n-1} + \frac{h}{2}, y_{n-1} + \frac{h}{2} g_2)$$

$$g_4 = f(x_{n-1} + h, y_{n-1} + h g_3)$$

$$y_n = y_{n-1} + h(\frac{1}{6} g_1 + \frac{1}{3} g_2 + \frac{1}{3} g_3 + \frac{1}{6} g_4).$$



Ta metoda ima celokupno napako reda h^4. Pri razpolovitvi koraka se napaka približno deli s 16.
Če v našem primeru vzamemo h = 0,4, je napaka enaka 0,00024. Pri razpolovitvi koraka, h, pa le 0,000013. Zmanjšala se je torej približno za 19-krat.

Sistem navadnih diferencialnih enačb

Kot primer si oglejmo enostaven popis odnosa ropar–plen med lisicami in zajci. Naj bo $Z(t)$ količina zajcev ob času t in $L(t)$ količina lisic. Spremembo populacije lahko opisujeta diferencialni enačbi

$$Z'(t) = 2Z(t) - 0{,}01Z(t)L(t) \; in$$
$$L'(t) = -L(t) + 0{,}01Z(t)L(t).$$

V enačbah je opazen negativen učinek $L(t)$ na $Z'(t)$ in pozitiven učinek $Z(t)$ na $L'(t)$. Ti dve diferencialni enačbi se zaradi sklopljenosti ne moreta rešiti ločeno. Da dobimo določeno rešitev, potrebujemo začetna pogoja za obe odvisni spremenljivki, na primer $Z(0) = 300$ in $L(0) = 150$.

Zgornji enačbi sta poseben primer splošnega sistema dveh navadnih diferencialnih enačb

$$X'(t) = f(t, X(t), Y(t)) \; in$$
$$Y'(t) = g(t, X(t), Y(t)).$$

Zgornji sestav lahko pri danih začetnih pogojih računsko rešimo s pomočjo poljubne zgoraj opisane metode. Oglejmo si najpreprostejšo Eulerjevo metodo.

$$x_n = x_{n-1} + hf(t_{n-1}, x_{n-1}, y_{n-1}) \; in$$
$$y_n = y_{n-1} + hg(t_{n-1}, x_{n-1}, y_{n-1}).$$

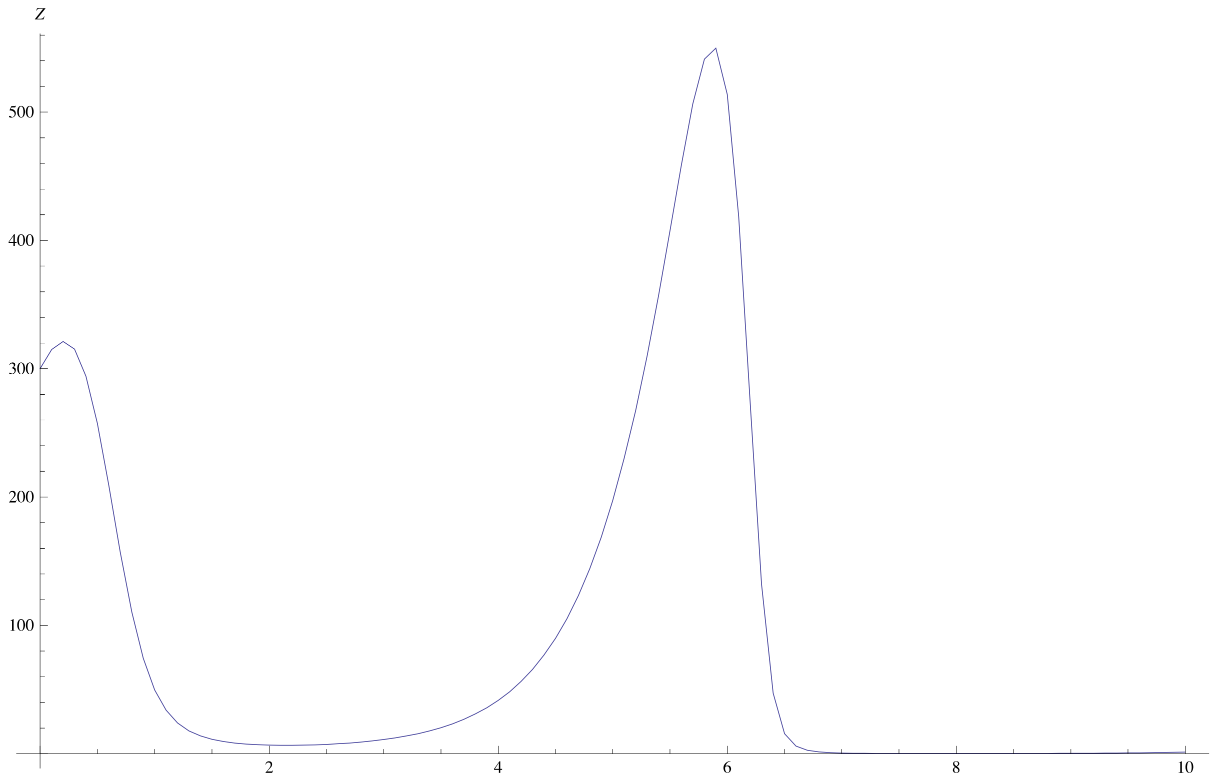
Tu sklopljenost enačb ne predstavlja nobene težave, saj lahko pri znanih vrednostih x_{n-1} in y_{n-1} brez težav izračunamo x_n in y_n.

S pomočjo programskega jezika lahko rešitev zgornjega sestava zajcev in lisic med časoma $t = 0$ in $t = 10$ zapišemo z uporabo Euler-jevega postopka.

```
Euler[n_] := Module[{h, sol, Z, L, Z1, L1},
  h = 10 / n;
  sol = Table[{Null, Null, Null}, {n + 1}];
  Z = 300; L = 150;
  sol[[1]] = {0, Z, L};
  Do[{Z1 = (2 - 0.01 L) Z; L1 = (0.01 Z - 1) L;
    Z = Z + h Z1; L = L + h L1; sol[[i + 1]] = {i h, Z, L}}, {i, 1, n}]; sol]
```

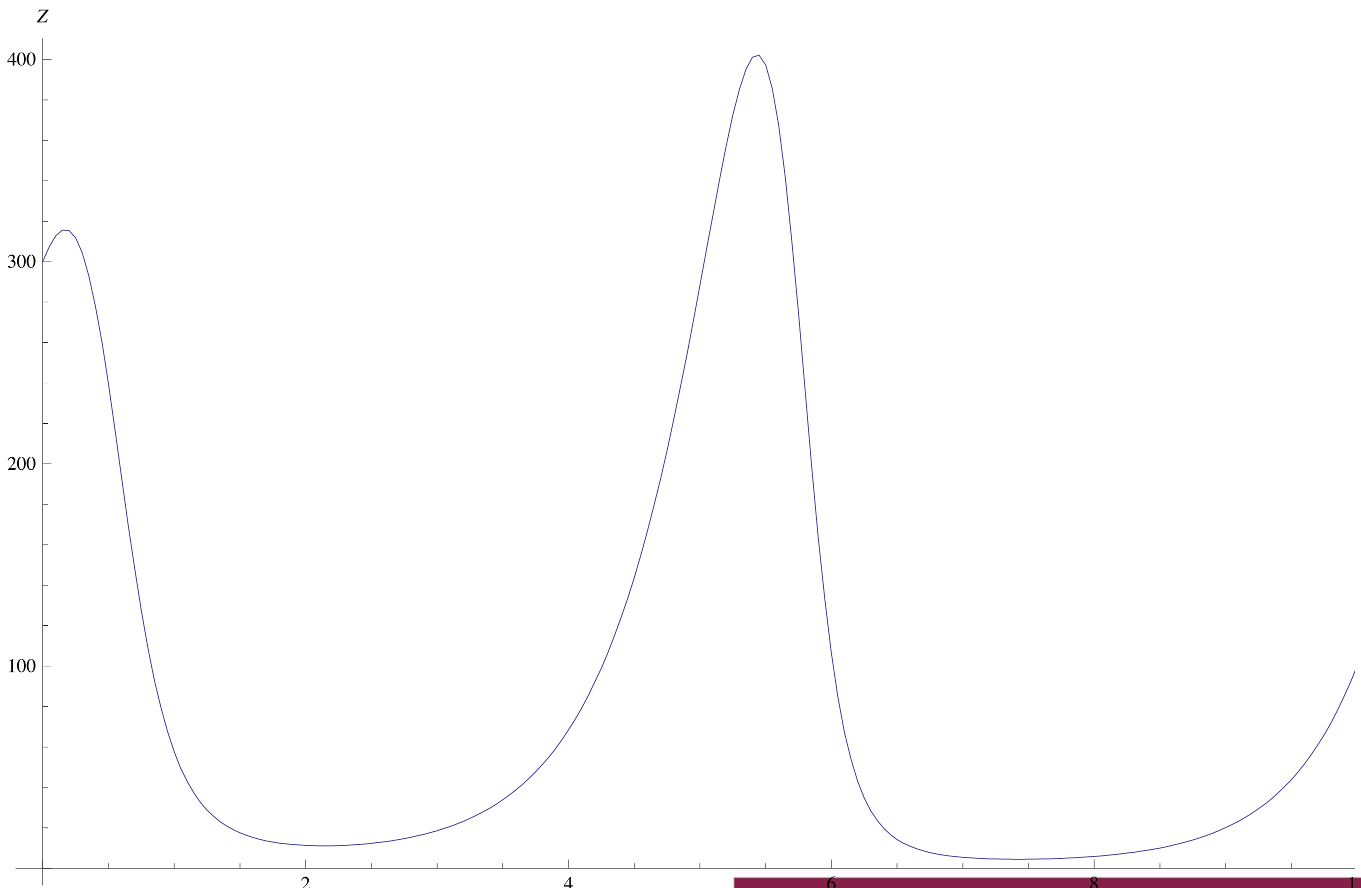
```
data = Euler[100];

ListLinePlot[data[[All, 1 ;; -2]], AxesLabel → {t, Z},
 AspectRatio → 1 / GoldenRatio, AxesOrigin → {0, 0}]
```



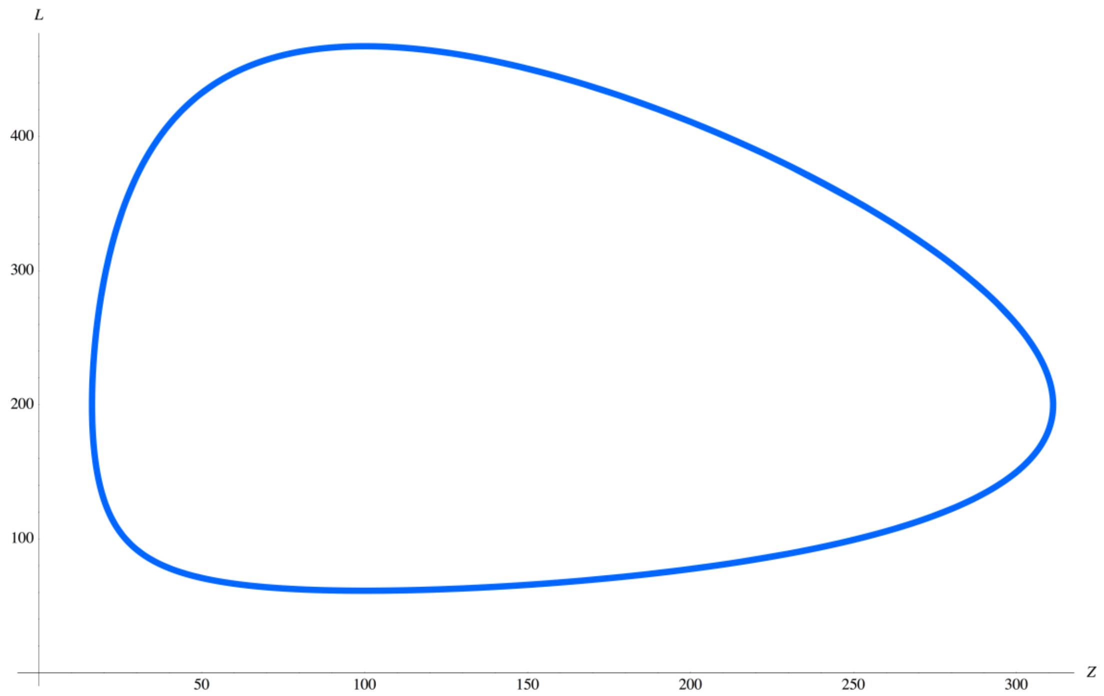
```
data = Euler[200];

ListLinePlot[data[[All, 1 ;; -2]], AxesLabel → {t, Z},
 AspectRatio → 1 / GoldenRatio, AxesOrigin → {0, 0}]
```



```
resitev = NDSolve[{Z'[t] == 2 Z[t] - 0.01 Z[t] L[t],
     L'[t] == -L[t] + 0.01 Z[t] L[t],
     Z[0] == 300, L[0] == 150}, {Z[t], L[t]}, {t, 0, 20}][[1]]
```

```
ParametricPlot[{Z[t], L[t]} /. resitev // Evaluate,
 {t, 0, 20}, PlotStyle → {Thickness[0.006], Hue[0.6]},
 AxesLabel → {Z, L}, AspectRatio → 1 / GoldenRatio, AxesOrigin → {0, 0}]
```



Če narišemo rešitev kot ravninsko krivuljo $(Z(t),L(t))$ dobimo zaradi ponavljanja rešitve zaključeno zanko, imenovano *populacijsko kroženje.*