Matematika pro chemické inženýry

Drahoslava Janovská

Numerické řešení obyčejných diferenciálních rovnic

Okrajová úloha, metoda střelby, diferenční náhrady.

EVROPSKÁ UNIE
Evropské strukturální a investiční fondy
Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání

MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY

Povinná látka. Bude v písemkách a bude se zkoušet při ústní zkoušce (žádné označení)

★ Příklady k procvičení - dobrovolné

★ Pro studenty, kteří chtějí vědět víc. Tato látka se nebude přednášet, nebude v písemkách, nebude se zkoušet.

Obsah

Okrajové úlohy

Příklad Řešme rovnici

$$y'' + y = 0, \quad y(0) = 1,\ y'(0) = A \quad \ldots \text{počáteční úloha}$$

Charakteristická rovnice: $\lambda^2 + 1 = 0 \quad \Longrightarrow$

$$y_H(x) = C_1 \cos x + C_2 \sin x\,, \quad y_H'(x) = -C_1 \sin x + C_2 \cos x$$

počáteční podmínka $\Longrightarrow 1 = C_1,\ A = C_2 \quad \Longrightarrow$

$$y_P(x) = \cos x + A \sin x\,, \quad x \in \mathbb{R}\,.$$

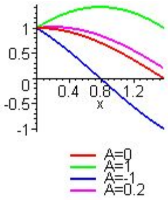
Zkoumejme hodnotu řešení v bodě $\frac{\pi}{2}$ pro různá A, $y_P(\frac{\pi}{2}) = A$

$A = 0 \quad \Rightarrow \quad y_P(x) = \cos x$

$A = 1 \quad \Rightarrow \quad y_P(x) = \cos x + \sin x$

$A = -1 \quad \Rightarrow \quad y_P(x) = \cos x - \sin x$

$A = 0,2 \quad \Rightarrow \quad y_P(x) = \cos x + 0,2 \sin x$



Různá $A \Longrightarrow$ různá hodnota řešení v bodě $\frac{\pi}{2}$

Naše okrajová úloha

$$y'' + y = 0, \quad y(0) = 1,\ y\left(\frac{\pi}{2}\right) = A$$

Kdybychom znali "správné" A, mohli bychom okrajovou úlohu řešit jako počáteční.

Poznámka Rovnice pro okrajovou úlohu musí být alespoň 2. řádu (2 podmínky, každá v jiném bodě) .

Základní techniky pro řešení okrajových úloh

1. Metoda střelby: Iterační technika, která využívá standardní metody pro počáteční úlohy, např. RK metody
2. Přímé metody– (diferenční metody řešení), které jsou založeny na technice nahrazení derivace diferencemi. Vzniklou soustavu lineárních algebraických rovnic řešíme standardními technikami.

Metoda střelby

Idea (kde se vzal název?)
Místo okrajové úlohy řešíme posloupnost počátečních úloh, jejichž řešení konvergují k řešení okrajové úlohy. Tedy využijeme metody i software pro řešení počátečních úloh.

Uvažujme úlohu 2. řádu (dvoubodová okrajová úloha):

$$y'' = f(t, y, y'), \quad y(a) = A, \ y(b) = B, \quad a < b, \quad t \in \langle a, b \rangle \,. \tag{1}$$

Předpokládejme, že úloha má právě jedno řešení. Proveďme odhad $y'(a)$ a označme $y(t, s)$ řešení počáteční úlohy

$$y'' = f(t, y, y'), \quad y(a) = A, \ y'(a) = s \,. \tag{2}$$

Tuto počáteční úlohu převedeme na soustavu dvou diferenciálních rovnic 1. řádu.

Poznámka Přímé řešení okrajové úlohy (1) může vést na soustavu dvou obecně nelineárních rovnic pro A a B a jejich řešení může být problém.

Označme

$$u(t,s) = y(t,s)\,, \quad v(t,s) = \frac{\partial}{\partial t} y(t,s)\,. \tag{3}$$

Z rovnice (2) dostaneme počáteční úlohu

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} u(t,s) &= v(t,s)\,, \quad u(a,s) = A \\ \frac{\partial}{\partial t} v(t,s) &= f(t; u(t,s); v(t,s))\,, \quad v(a,s) = s\,. \end{aligned} \tag{4}$$

Řešení $u(t,s)$ počáteční úlohy (4) bude totožné s řešením $y(t)$ okrajové úlohy (1), jestliže najdeme takovou hodnotu s, aby

$$\varphi(s) \equiv \underbrace{u(b,s) - B = 0}_{} \quad \Longrightarrow \quad y(b) = B\,.$$

řešení této rovnice hledáme numericky:
Newtonova metoda, metoda bisekce,...

★ Metoda bisekce

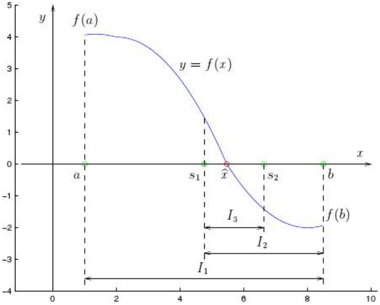
$$? \; s \in \mathbb{R} \; : \quad \varphi(s) \;\equiv\; u(b;s) - B = 0 \tag{5}$$

Necht $s_1 < s_2$ tak, že $\varphi(s_1) < 0$, $\varphi(s_2) > 0$. Je-li funkce φ spojitá na $\langle s_1, s_2 \rangle$, pak uvnitř (s_1, s_2) existuje alespoň jeden bod s tak, že $\varphi(s) = 0$, t.j. (s_1, s_2) obsahuje kořen rovnice (5).

Půlení intervalu (bisekce):

$$\hat{x} := \frac{s_1 + s_2}{2} \qquad \ldots \text{ střed intervalu } (s_1, s_2).$$

Vypočteme $u(b;\hat{x})$ a zjistíme, zda $\varphi(\hat{x}) = u(b,\hat{x}) - B$ je kladné nebo záporné. Je-li $\varphi(\hat{x}) > 0$, pak interval $(s_1, \hat{x})$ obsahuje kořen φ, je-li $\varphi(\hat{x}) < 0$, pak kořen φ leží v $(\hat{x}, s_2)$.



Položme $s_3 := \hat{x}$ a proces opakujeme na polovičním intervalu. Zkonstruujeme posloupnost $\{s_n\}$, která konverguje k s: $\lim\limits_{n\to\infty} s_n = s$. Proces ukončíme, je-li délka intervalu, který obsahuje s, dostatečně malá.

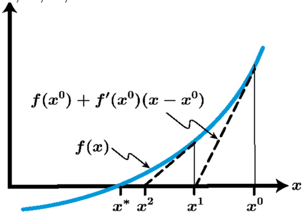
Newtonova–Raphsonova metoda

Opět řešíme rovnici (5)

$$? \; s \in \mathbb{R} \; : \quad \varphi(s) \; \equiv \; u(b;s) - B = 0 \, .$$

Necht s_0 je libovolná počáteční aproximace v dostatečně malém okolí kořene (lze najít např. bisekcí),

$$s_{n+1} := s_n - \frac{\varphi(s_n)}{\varphi'(s_n)} \, , \qquad n = 0, 1, 1, \ldots$$



Pak $\{s_n\} \longrightarrow s$ kvadraticky, pokud

1. $\varphi'(s) \neq 0 \; \forall s \in I \; \ldots \; I$ je separační interval
2. $\varphi''(s) \in \mathbb{R}$ na I
3. počáteční aproximace s_0 leží dostatečně blízko kořene

Jak získáme derivaci $\varphi'(s_n)$? Neumíme přece ani φ natož derivaci φ'.

Vratme se zpátky k naší rovnici (2), tedy uvažujme počáteční úlohu

$$y''(t,s) = f(t, y(t,s), y'(t,s))\,, \quad y(a,s) = A, \quad y'(a,s) = s\,.$$

$y'(a,s) = s$ ... odhad počáteční podmínky – směrnice budeme měnit tak, abychom se "trefili"do B.
Zkoumejme, jak se změní řešení y, změníme-li počáteční směrnici s:

$$\frac{\partial y''(t,s)}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial s} f(t, y(t,s), y'(t,s)) = \frac{\partial f}{\partial y}\cdot\frac{\partial y}{\partial s} + \frac{\partial f}{\partial y'}\cdot\frac{\partial y'}{\partial s}\,.$$

Z poč. podm. je $\dfrac{\partial y}{\partial s}(a,s) = 0\,,\ \dfrac{\partial y'}{\partial s}(a,s) = 1$ a $v(t) = \dfrac{\partial y}{\partial s}(t,s)$ máme z rovnice (3).

Počáteční úloha pro funkci v:

$$v''(t) = \frac{\partial f}{\partial y}(t, y(t), y'(t)) \cdot v(t) + \frac{\partial f}{\partial y'}(t, y(t), y'(t)) \cdot v'(t)\,, \; v(a) = 0, \; v'(a) = 1\,. \tag{6}$$

a z rovnice (3) je $u(b, s) = y(b, s)$. Tedy dostaneme

$$\varphi(s) = y(b, s) - B \implies \varphi'(s) = \frac{\partial y}{\partial s}(b, s) = v(b)\,.$$

Tedy potřebnou derivaci v Newtonově metodě $\varphi'(s_n)$ získáme tak, že řešíme rovnici (6) až k $t = b$.

Poznámka Rovnice (6) je citlivá na perturbaci počátečního odhadu s_0. Špatný odhad s_0 vede k Newtonovým iteracím, které nekonvergují k s.
Remedy vícenásobná metoda střelby:
Interval $\langle a, b\rangle$ rozdělíme na podintervaly $a = t_0 < t_1 < \cdots < t_k = b$ a, zhruba řečeno, opakujeme metodu střelby na každém z těchto podintervalů.

★ Řešeni adiabatického trubkového reaktoru s podélným promícháváním

Axiální sdílení hmoty a tepla v trubkovém reaktoru lze na základě difúzního modelu popsat soustavou dvou nelineárních diferenciálních rovnic 2. řádu. Po úpravě a zbezrozměrnění dostaneme

$$\frac{1}{Pe}\frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}x^2} - \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} - p y^m \Theta^{-m} \exp\left(K - \frac{R}{\Theta}\right) = 0\,, \tag{7}$$

kde $\Theta = 1 - H(1-y)$, s okrajovými podmínkami

$$y(0) = 1 + \frac{y'(0)}{Pe}\,, \tag{8}$$

$$y'(1) = 0\,. \tag{9}$$

Zde Pe, p, m, K, R, a H jsou parametry matematického modelu, x axiální souřadnice, y bezrozměrná koncentrace a Θ teplota.

★

Převedeme úlohu na počáteční v bodě $x = 1$. Zvolíme

$$y(1) = \eta_1 \, . \tag{10}$$

Pak lze integrovat rovnici (7) – rozepsanou do dvou rovnic prvního řádu – od $x = 1$ s počátečními podmínkami (9) a (10) do $x = 0$, kde získáme $y(0)$ a $y'(0)$. Označíme

$$\varphi(\eta_1) = y(0) - \frac{y'(0)}{Pe} - 1 \, . \tag{11}$$

Integrace počáteční úlohy byla prováděna Runge–Kuttovou metodou.

Konečné diference

Mějme úlohu

$$y''(t) = f(t, y(t), y'(t))\,, \quad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta\,.$$

Rovnoměrné dělení s krokem h:

Interval $\langle a, b\rangle$ rozdělíme na $m+1$ podintervalů $\langle t_k, t_{k+1}\rangle$, $k = 0, 1, \dots, m$, kde

$$t_k = a + kh,\ k = 0, 1, \dots, m+1; \quad h = \frac{b-a}{m+1}$$

Základní idea: Numerická derivace

Danou úlohu diskretizujeme pro dané dělení $\langle a, b\rangle$. Jak budeme aproximovat derivaci? Taylorův rozvoj:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(\eta)\,, \quad \eta \text{ mezi } x \text{ a } x+h \quad \Longrightarrow$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \underbrace{\frac{h^2}{2h} f''(\eta)}_{\text{diskretizační chyba je řádu } h^1}\,.$$

t.j. 1. derivaci aproximujeme s chybou $\mathcal{O}(h)$

$$\Longrightarrow \quad f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}, \quad h \text{ malé}$$

Abychom získali lepší odhad, vypočteme dva Taylorovy rozvoje:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(\eta_1)\,, \tag{12}$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(\eta_2)\,. \tag{13}$$

Rovnice (12) a (13) odečteme $\Longrightarrow$

$$f(x+h) - f(x-h) = 2hf'(x) + \frac{h^3}{6}\left(f'''(\eta_1) + f'''(\eta_2)\right) \quad \Longrightarrow$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2)\,, \tag{14}$$

Nyní rovnice (12) a (13) sečteme a dostaneme

$$f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + h^2 f''(x) + \frac{h^3}{6}\left(f'''(\eta_1) - f'''(\eta_2)\right) \quad \Longrightarrow$$

$$f''(x) = \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2} + \mathcal{O}(h)\,. \tag{15}$$

Lineární konečné diference

Necht f je lineární funkcí y a y' , t.j.

$$f(t, y(t), y'(t)) = u(t) + v(t)y(t) + w(t)y'(t)\,,$$

$$y_0 = \alpha\,, \quad y'(t) = \frac{y(t+h) - y(t-h)}{2h} + \frac{h^3}{6} y'''(\eta)\,.$$

$$y''(t) = \frac{y(t+h) - 2y(t) + y(t-h)}{h^2} + \frac{h^2}{12} y^{(4)}(\tau)\,, \quad y_{n+1} = \beta\,.$$

Označme

$$y_k := y(t_k)\,,\ u_k := u(t_k)\,,\ v_k := v(t_k)\,,\ w_k := w(t_k)\,.$$

Vše dosadíme do rovnice

$$y''(t) = f(t, y(t), y'(t))\,, \quad y(a) = \alpha\,,\ y(b) = \beta\,.$$

Dostaneme soustavu m lineárních algebraických rovnic pro m neznámých :

$$y_0 = \alpha$$

$$\frac{y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}}{h^2} = u_k + v_k y_k + w_k \frac{y_{k+1} - y_{k-1}}{2h}\,, \quad k = 1, \dots, m$$

$$y_{m+1} = \beta\,.$$

Upravíme:

$$y_0 = \alpha\,,$$

$$y_{k-1}(-1 - \frac{1}{2}hw_k) + y_k(2 + h^2 v_k) + (-1 + \frac{1}{2}hw_k)y_{k+1} = -h^2 u_k\,, \quad k = 1\dots, m\,,$$

$$y_{m+1} = \beta\,.$$

Matice této soustavy je třídiagonální, diagonálně dominantní, a tedy ji lze výhodně řešit v Matlabu (tridiag.m) .

Maticově: $\mathbf{A}\,\vec{\mathbf{y}} = \vec{\mathbf{b}}$, kde

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2+h^2v_1 & -1+\frac{1}{2}hw_1 & 0 & \dots & 0 \\ -1-\frac{1}{2}hw_2 & 2+h^2v_2 & -1+\frac{1}{2}hw_2 & \dots & 0 \\ \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & -1-\frac{1}{2}hw_{m-1} & 2+h^2v_{m+1} & -1+\frac{1}{2}hw_{m-1} \\ & & 0 & -1-\frac{1}{2}hw_m & 2h^2v_m \end{pmatrix}$$

$$\vec{\mathbf{y}} = (y_1, y_2, \dots, y_{m-1}, y_m)^{\mathrm{T}}$$

$$\vec{\mathbf{b}} = \begin{pmatrix} -h^2u_1 + (1+\frac{1}{2}hw_1)\alpha \\ -h^2u_2 \\ \vdots \\ -h^2u_m - \beta(-1+\frac{1}{2}hw_m) \end{pmatrix}, \quad \begin{matrix} (1+\frac{1}{2}hw_1)\alpha \quad \text{z levé strany z okr. podm.} \\ \\ \\ -\beta(-1+\frac{1}{2}hw_m) \;\; \text{z levé strany z okr. podm.} \end{matrix}$$

Soustavu vyřešíme a dostaneme hodnotu řešení y_k v bodech t_k, $k = 1, \dots, m$ (diskrétní řešení).

Odhad chyby

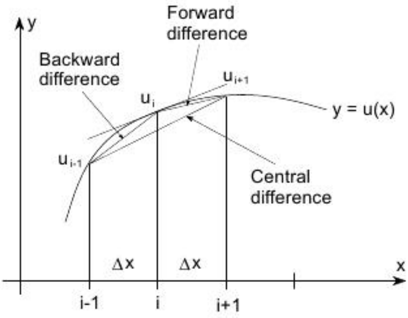
Maximální chyba lineární metody konečných diferencí:

$$\max_{k=1,\ldots,m} |y(t_k) - y_k| \leq Ch^2 \quad \text{pro} \quad h \longrightarrow 0\,,$$

kde $y(t_k)$ je přesné řešení v bodě t_k a y_k je odpovídající aproximace získaná metodou konečných diferencí.

Poznámka Není-li f lineární, lze aplikovat metodu nelineárních diferencí – nebudeme se tím zabývat.

Diferenční formule odvozené pomocí Taylorova polynomu:



Grafické znázornění aproximace derivace pomocí diferenčních vzorců – diference vpřed, centrální diference, diference zpět

1. diference 1. řádu vpřed:

$$u'_j = \frac{u_{j+1} - u_j}{h} + \mathcal{O}(h^1)$$

2. zpětná diference 1. řádu:

$$u'_j = \frac{u_j - u_{j-1}}{h} + \mathcal{O}(h^1)$$

3. centrální diferenční formule 2. řádu:

$$u'_j = \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$

Diferenční metody řešení okrajové úlohy

Dvoubodová okrajová úloha pro jednu diferenciální rovnici 2. řádu:

$$y'' = f(t, y(t), y'(t))$$

s lineárními okrajovými podmínkami

$$\begin{array}{ccccc} \alpha_0 y(a) & + & \beta_0 y'(a) & = & \gamma_0 \,, \\ \alpha_1 y(b) & + & \beta_1 y'(b) & = & \gamma_1 \,. \end{array}$$

Zvolíme ekvidistantní dělení intervalu $\langle a, b \rangle$:

$$t_0 = a < t_1 < \ \ldots \ < t_N = b \,, \quad h = \frac{b-a}{N} \,, \ t_k = a + kh \,, \ k = 0, \ldots, N \,.$$

Řešení aproximujeme v uzlových bodech hodnotami diskrétně zadané funkce $y(x_i) \sim y_i$. Derivace v rovnici nahradíme pomocí centrálních diferenčních formulí s chybou $\mathcal{O}(h^2)$:

$$\frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2} = f\left(t_i, y_i, \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}\right) \,, \quad i = 1, \ldots, N-1 \,.$$

Náhrada okrajových podmínek – např. diferencemi vpřed (chyba $\mathcal{O}(h)$):

$$\begin{aligned} \alpha_0 y_0 &+ \beta_0 \frac{y_1 - y_0}{h} = \gamma_0 \\ \alpha_1 y_N &+ \beta_1 \frac{y_N - y_{N-1}}{h} = \gamma_1 \end{aligned}$$

Dostali jsme soustavu $N+1$ nelineárních rovnic pro $N+1$ neznámých $y_0, y_1, \ldots, y_N$. Vzniklou soustavu nelineárních rovnic řešíme nejčastěji Newtonovou metodou.

Rovnici jsme aproximovali s chybou $\mathcal{O}(h^2)$, ale chybu kazí diferenční formule pro okrajové podmínky s chybou $\mathcal{O}(h)$.Pak celková chyba je jen řádu $\mathcal{O}(h)$. Zkusme v okrajových podmínkách také náhradu s chybou $\mathcal{O}(h^2)$.

$$\begin{aligned} \alpha_0 y_0 &+ \beta_0 \frac{-3y_0 + 4y_1 - y_2}{2h} = \gamma_0 \\ \alpha_1 y_N &+ \beta_1 \frac{3y_N - 4y_{N-1} + y_{N-2}}{2h} = \gamma_1 \end{aligned}$$

Dostaneme výslednou chybu $O(h^2)$.

Poznámka Lze také použít tzv. metodu fiktivního uzlového bodu. Např. okrajovou podmínku v bodě $t = a$ aproximujeme

$$\alpha_0 y_0 + \beta_0 \frac{y_1 - y_{-1}}{2h} = \gamma_0$$

a aproximaci diferenciální rovnice uvažujeme i pro $i = 0$.

Poznámka Zapíšeme-li rovnice pro řešení maticově, dostaneme v 1. případě (chyba $\mathcal{O}(h)$ pro okr. podm.) třídiagonální matici soustavy. V ostatních případech je třeba matici nejdříve upravit, abychom dostali také třídiagonální matici.

Příklad Necht $N = 3$, $a = 0$, $b = 1$, rovnici aproximujte s chybou $\mathcal{O}(h^2)$, okr. pod. s chybou $\mathcal{O}(h)$. Tedy $h = \frac{1}{3}$, $i = 1, 2$.

$$\begin{array}{llcl}
i = 1 & \dfrac{y_0 - 2y_1 + y_2}{h^2} & = & f\left(t_1, y_1, \dfrac{y_2 - y_0}{2h}\right) \\
i = 2 & \dfrac{y_1 - 2y_2 + y_3}{h^2} & = & f\left(t_2, y_2, \dfrac{y_3 - y_1}{2h}\right) \\
\text{okr.podm.} & \alpha_0 y_0 + \beta_0 \dfrac{y_1 - y_0}{h} & = & \gamma_0 \\
 & \alpha_1 y_3 + \beta_1 \dfrac{y_3 - y_2}{h} & = & \gamma_1 .
\end{array}$$

Maticově

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} h^2(\alpha_0 - \frac{\beta_0}{h}) & h\beta_0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & -h\beta_1 & h^2(\alpha_1 + \frac{\beta_1}{h}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma_0 \\ f(t_1, y_1, \frac{y_2 - y_1}{2h}) \\ f(t_2, y_2, \frac{y_3 - y_1}{2h}) \\ \gamma_1 \end{pmatrix}.$$

1. ř. …okr.p. v a, 2. ř. $i = 1$, 3. ř. $i = 2$, 4. ř. …okr.p. v b.

Matice je třídiagonální.

Literatura k dalšímu studiu

- Burden R. L., Faires J. D.: Numerical Analysis (ninth edition). Brooks/Cole Cengage Learning, 2011, ISBN-13: 978-0-538-73351-9
- Davis M. E.: Numerical Methods & Modeling for Chemical Engineers. John Wiley & Sons, 1984.
- Kubíček M., Dubcová M., Janovská D.: Numerické metody a algoritmy, VŠCHT Praha, 2005 (second edition), in Czech.
- Moin P., Fundamentals of Engineering Numerical Analysis. Cambridge University Press, 2010.
- Rasmuson A., Andersson B., Olsson L., Andersson R.: Mathematical Modeling in Chemical Engineering. Cambridge University Press, 2014.