Numerično reševanje navadnih diferencialnih enačb

V kemiji velikokrat dobimo za kakšno količino diferencialno enačbo, ki jo moramo rešiti, da dobimo odvisnost neke količine od časa (na primer spreminjanje koncentracije reaktantov in produktov pri reakcijah). Pri reševanju diferencialnih enačb nas tu ne zanima splošna rešitev, temveč točno določena z znanimi začetnimi vrednostmi. Rešitev diferencialnih enačb pa je tabelirana funkcija. Najpreprostejši primer je diferencialna enačba prvega reda, ki jo lahko zapišemo v naslednji obliki

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

Poznamo pa še začetno vrednost

$$y(x_0) = y_0$$

EULERJEVA METODA

Eulerjeva metoda je najpreprostejša metoda. Pri njej aproksimiramo krivuljo s tangento v začetni točki. Denimo, da bi radi izračunali vrednosti funkcije pri naslednjih vrednostih spremenljivke x

x: x_0 x_1 $\cdots$ x_n $\cdots$

Začetno vrednost funkcije poznamo

$$y(x_0) = y_0$$

vse ostale pa izračunamo kot

$$y_{n+1} = y_n + hy'_n$$

Tu smo y_n zapisali krajše kot

$$y_n = y(x_n)$$

in y'_n kot

$$y'_n = f(x_n, y_n)$$

h pa je razlika med dvema zaporednima x-oma in ni potrebno da je konstantna

$$h = x_{n+1} - x_n$$

Metoda ima napako reda h^2 pri enem koraku, se pa napake prenašajo iz koraka v korak, tako da le ta z oddaljevanjem od začetne točke močno naraste.

IZBOLJŠANA EULERJEVA METODA

Če funkcijo aproksimiramo z odvodom v začetni točki, naredimo veliko napako. To lahko izboljšamo, če funkcijo aproksimiramo z odvodom v srednji točki intervala in ne v začetni. Pri vrednosti x_n izračunamo novo vrednost pri x_{n+1} na naslednji način

$$x_{n+1/2} = x_n + \frac{h}{2}$$

$$y_{n+1/2} = y_n + \frac{h}{2}y'_n$$

$$y'_{n+1/2} = f(x_{n+1/2}, y_{n+1/2})$$

$$y_{n+1} = y_n + hy'_{n+1/2}$$

Metoda ima lokalno napako reda h^3. Krajše jo lahko zapišemo kot

$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$

$$k_2 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right)$$
$$y_{n+1} = y_n + k_2$$

RUNGE KUTTA REDA 4

Runge-Kutta metoda so metode, kjer si izberemo nek korak h in m števil k_1, k_2… tako, da dobimo čim večjo natančnost. Metoda drugega reda (RK2) je kar izboljšana Eulerjeva metoda. Najbolj znana je metoda četrtega reda, kjer je postopek računanja pri x_n naslednji

$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$
$$k_2 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right)$$
$$k_3 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}\right)$$
$$k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3)$$
$$y_{n+1} = y_n + \frac{k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4}{6}$$

Metoda ima lokalno napako reda h^5.

SISTEMI DIFERENCIALNIH ENAČB

Če imamo več spremenljivk in enačb, jih lahko zapišemo v vektorski obliki

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

in metodo napišemo v vektorski obliki, na primer RK4 kot

$$\vec{k}_1 = h\vec{f}(x_n, \overrightarrow{y_n})$$
$$\vec{k}_2 = h\vec{f}\left(x_n + \frac{h}{2}, \overrightarrow{y_n} + \frac{\vec{k}_1}{2}\right)$$
$$\vec{k}_3 = h\vec{f}\left(x_n + \frac{h}{2}, \overrightarrow{y_n} + \frac{\vec{k}_2}{2}\right)$$
$$\vec{k}_4 = h\vec{f}(x_n + h, \overrightarrow{y_n} + \vec{k}_3)$$
$$\vec{y}_{n+1} = \vec{y}_n + \frac{\vec{k}_1 + 2\vec{k}_2 + 2\vec{k}_3 + \vec{k}_4}{6}$$

Pri reševanju enačb višjega reda, pa enačbo prevedemo na sistem enačb prvega reda. Poglejmo si na primeru enačbe drugega reda

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

Uvedemo spremenljivke

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

in sedaj to zapišemo v vektorski obliki

$$\vec{y} = (y, z)$$
$$\vec{f} = \big(z, f(x, y, z)\big)$$

in sistem rešimo na primer z metodo RK4.