Numerisk løsning af differentialligninger

Thomas Vils Pedersen

1 Numeriske metoder

Ved numerisk analyse forstås tilnærmet, talmæssig løsning af problemer, som ikke, eller kun med urimeligt stort besvær, kan løses teoretisk/eksakt. Der er tale om numeriske metoder, allerede når man tilnærmer et reelt tal med et andet, typisk en decimalbrøk, idet man f.eks. skriver

$$0.57931 \simeq 0.58$$
, $\frac{1}{3} \simeq 0.33$, $\pi \simeq 3.14159$,

og når man bruger de velkendte regler for regning med sådanne decimaltal, herunder for afkortning til et bestemt antal decimaler eller et bestemt antal 'betydende cifre.' Andre numeriske metoder, der kendes fra tidligere er:

- 1) Tilnærmet løsning af en ligning f(x) = 0. En effektiv metode er Newtons metode, også kaldet Newton-Raphson iteration. Ud fra en gætteværdi x_0 beregnes en forbedret gætteværdi $x_1 = x_0 f(x_0)/f'(x_0)$, og beregningen kan gentages (itereres), til den ønskede nøjagtighed er nået.
- 2) Brug af Taylors formel til tilnærmet beregning af en funktions værdier i nærheden af et givet punkt, idet funktionen erstattes af et Taylor-polynomium af passende grad. Den begåede fejl vurderes vha restleds-udtryk.
- 3) Numerisk integration, hvor specielt Simpsons formel gør det muligt på enkel vis at udregne gode tilnærmelser til et forelagt bestemt integral.

De to grundlæggende synsvinkler i numerisk analyse er dels at udvikle effektive, dvs "hurtigt konvergerende" og ikke for omfangsrige, metoder til at løse et foreliggende problem, dels for en given metode at undersøge, hvor stor en fejl man begår ved at bruge metoden i stedet for at løse problemet - eller tænke sig det løst - eksakt.

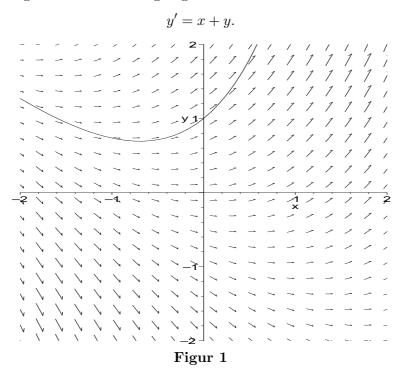
2 Numerisk løsning af 1. ordens differentialligninger

Den underdisciplin af numerisk analyse, der handler om numerisk (tilnærmet) løsning af differentialligninger, er allerede gammel og særdeles omfattende. En del af de grundlæggende metoder inden for området bygger på følgende princip. Lad den forelagte differentialligning være

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

Problemet kan anskues grafisk ved at indtegne et stort antal såkaldte linieelementer, dvs. små liniestykker gennem forskellige punkter (x_0, y_0) , hver gang med hældningskoefficient $f(x_0, y_0)$.

Eksempel (Eksempel 1, s. 54 i "Differentialligninger" af Poul Einer Hansen.) På Figur 1 er linieelementer indtegnet for differentialligningen



Ved løsning af denne lineære 1. ordens differentialligning fås den fuldstændige løsning

$$y = ce^x - x - 1 \qquad (c \in \mathbb{R}).$$

Løsningen gennem punktet (0,1) svarer til c=2, og er derfor givet ved $y=2e^x-x-1$. Grafen for denne partikulære løsning ses ligeledes på Figur 1.

Vi vender nu tilbage til den generelle differentialligning

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

og tilføjer en begyndelsesbetingelse

$$y(x_0) = y_0.$$

Vi ved altså at løsningskurven i ethvert af sine punkter (x, y) har tangenthældningen f(x, y), samt at den specifikke løsningskurve, vi søger, går gennem punktet (x_0, y_0) . Vi vil benytte dette til at finde tilnærmede værdier for y(x), når x er i nærheden af x_0 .

Eulers metode Vi bevæger os et lille step af længde h til højre for x_0 , og approksimerer $y(x_0 + h)$ vha. tangentligningen i (x_0, y_0) :

$$y(x_0 + h) \simeq y(x_0) + y'(x_0)h = y(x_0) + f(x_0, y_0)h.$$

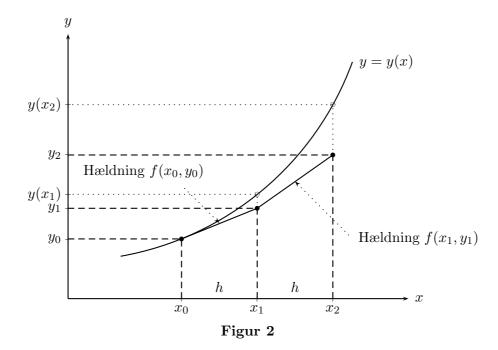
Med

$$x_1 = x_0 + h$$
 og $y_1 = y_0 + f(x_0, y_0)h$,

har vi altså $y(x_1) \simeq y_1$ (se Figur 2). Tilsvarende sætter vi

$$x_2 = x_1 + h$$
 og $y_2 = y_1 + f(x_1, y_1)h$,

så y_2 er en tilnærmelse til $y(x_2)$.



Generelt finder vi den næste tilnærmede værdi ved at sætte

$$x_{n+1} = x_n + h$$
 $(= x_0 + (n+1)h)$ og $y_{n+1} = y_n + f(x_n, y_n)h$.

På samme måde kan man tilnærme y(x) når $x < x_0$. Vi sætter

$$x_{-1} = x_0 - h$$
 og $y_{-1} = y_0 - f(x_0, y_0)h;$

derefter

$$x_{-2} = x_{-1} - h$$
 og $y_{-2} = y_{-1} - f(x_{-1}, y_{-1})h$,

osv.

 ${\bf Eksempel}$ (Eksempel 2, s. 55 i "Differentialligninger" af Poul Einer Hansen.) Vi betragter differentialligningen

$$y' = x + y,$$

med begyndelsesbetingelsen

$$y(0.5) = 0.3,$$

og benytter h = 0.1. Vi har da (angivet med 2 decimaler)

$$x_1 = 0.5 + 0.1 = 0.6,$$
 $y_1 = y_0 + (x_0 + y_0)h = 0.3 + (0.5 + 0.3) \cdot 0.1 = 0.38,$ $x_2 = 0.6 + 0.1 = 0.7,$ $y_2 = y_1 + (x_1 + y_1)h = 0.38 + (0.6 + 0.38) \cdot 0.1 = 0.48,$ $x_3 = 0.7 + 0.1 = 0.8,$ $y_3 = y_2 + (x_2 + y_2)h = 0.48 + (0.7 + 0.48) \cdot 0.1 = 0.60,$

osv. Tilsvarende fås

$$\begin{aligned} x_{-1} &= 0.5 - 0.1 = 0.4, & y_{-1} &= y_0 - (x_0 + y_0)h = 0.3 - (0.5 + 0.3) \cdot 0.1 = 0.22, \\ x_{-2} &= 0.4 - 0.1 = 0.3, & y_{-2} &= y_{-1} - (x_{-1} + y_{-1})h = 0.22 - (0.4 + 0.22) \cdot 0.1 = 0.16, \\ x_{-2} &= 0.3 - 0.1 = 0.2, & y_{-3} &= y_{-2} - (x_{-2} + y_{-2})h = 0.16 - (0.3 + 0.16) \cdot 0.1 = 0.11, \end{aligned}$$

osv. For at vurdere den præcision, der opnås ved Eulers metode, vil vi finde den eksakte løsning til differentialligningen, og benytte denne til at beregne $y(x_n)$. Som nævnt ovenfor er den fuldstændige løsning til differentialligningen y'=x+y givet ved $y=ce^x-x-1$ ($c \in \mathbb{R}$). For løsningen gennem (0.5,0.3) gælder $0.3=ce^{0.5}-0.5-1$, dvs. $c=1.8/e^{0.5}=1.09$ og dermed

$$y = 1.09 \cdot e^x - x - 1.$$

De tilnærmede og eksakte værdier fremgår af Tabel 1 (hvor vi har tilføjet værdierne svarende til n = 4 og n = 5):

n	x_n	y_n	$y(x_n)$
-3	0.2	0.11	0.13
-2	0.3	0.16	0.17
-1	0.4	0.22	0.23
0	0.5	0.3	0.3
1	0.6	0.38	0.39
2	0.7	0.48	0.50
3	0.8	0.60	0.63
4	0.9	0.74	0.79
5	1.0	0.90	0.97

Tabel 1

Det ses, at fejlen bliver større jo længere væk fra udgangspunktet (0.3, 0.5) man kommer, og at fejlen efterhånden bliver relativt stor. Generelt kan man vise, at den begåede fejl i fast afstand fra udgangspunktet er omtrent proportional med h. Man siger derfor, at Eulers metode er af 1. orden.

Eulers forbedrede metode Når løsningsfunktionen som på Figur 2 er konveks (opad krum), vil tangenthældningen i punktet $(x_0, y(x_0))$ undervurdere den faktiske hældning af linien mellem $(x_0, y(x_0))$ og $(x_1, y(x_1))$, så den beregnede tilnærmede funktionsværdi y_1 bliver for lille.

Der skal dog ikke så meget til for at forbedre metoden betragteligt. Den sande hældning af linien mellem $(x_0, y(x_0))$ og $(x_1, y(x_1))$ ligger betydeligt nærmere ved middeltallet mellem tangenthældningerne $f(x_0, y(x_0))$ og $f(x_1, y(x_1))$ i hhv. $(x_0, y(x_0))$ og $(x_1, y(x_1))$. (Dette kan i øvrigt vises at gælde eksakt for enhver parabel i ethvert interval.) Dette giver

$$\frac{y(x_1) - y(x_0)}{x_1 - x_0} \simeq \frac{f(x_0, y(x_0)) + f(x_1, y(x_1))}{2},$$

og da $x_1 - x_0 = h$ fås

$$y(x_1) \simeq y(x_0) + \frac{f(x_0, y(x_0)) + f(x_1, y(x_1))}{2} h.$$

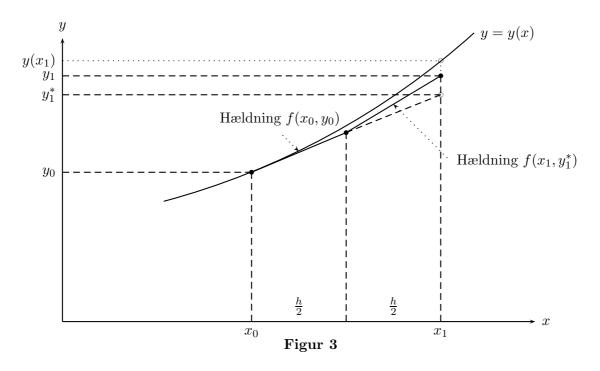
Nu kender man ganske vist ikke $y(x_1)$; det er jo netop den, vi ønsker at finde (eller rettere tilnærme). Af denne grund vil vi først approksimere $y(x_1)$ vha. Eulers metode og derefter benytte denne værdi til at approksimere $f(x_1, y(x_1))$. Vi sætter altså

$$y_1^* = y_0 + f(x_0, y_0)h,$$

og derefter

$$y_1 = y_0 + \frac{f(x_0, y_0) + f(x_1, y_1^*)}{2} h.$$

Den grafiske fortolkning af dette er, at vi i intervallet $[x_0, x_0 + h/2]$ approksimerer y(x) med en ret linie med hældning $f(x_0, y_0)$, og i intervallet $[x_0 + h/2, x_1]$ approksimerer y(x) med en ret linie med hældning $f(x_1, y_1^*)$ (se Figur 3).



Generelt sætter vi

$$y_{n+1}^* = y_n + f(x_n, y_n)h,$$

og derefter

$$y_{n+1} = y_n + \frac{f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^*)}{2} h.$$

Metoden kan naturligvis også anvendes til at finde de tilnærmede værdier y_{-1} , y_{-2} osv.

Eksempel Benyttes Eulers forbedrede metode på eksemplet ovenfor fås (med 3 decimaler)

$$x_1 = 0.5 + 0.1 = 0.6,$$
 $y_1^* = y_0 + (x_0 + y_0)h = 0.3 + (0.5 + 0.3) \cdot 0.1 = 0.380,$

og dermed

$$y_1 = y_0 + \frac{(x_0 + y_0) + (x_1 + y_1^*)}{2} h = 0.3 + \frac{(0.5 + 0.3) + (0.6 + 0.38)}{2} \cdot 0.1 = 0.389.$$

I næste skridt fås

$$x_2 = 0.6 + 0.1 = 0.7,$$
 $y_2^* = y_1 + (x_1 + y_1)h = 0.389 + (0.6 + 0.389) \cdot 0.1 = 0.488,$

og dermed

$$y_2 = y_1 + \frac{(x_1 + y_1) + (x_2 + y_2^*)}{2}h = 0.389 + \frac{(0.6 + 0.389) + (0.7 + 0.488)}{2} \cdot 0.1 = 0.498.$$

Fortsættes på denne måde fås værdierne i Tabel 2:

n	x_n	y_n^*	y_n	$y(x_n)$
-3	0.2	0.127	0.134	0.133
-2	0.3	0.166	0.174	0.174
-1	0.4	0.220	0.229	0.229
0	0.5	_	0.3	0.3
1	0.6	0.380	0.389	0.389
2	0.7	0.488	0.498	0.499
3	0.8	0.618	0.629	0.630
4	0.9	0.771	0.784	0.785
5	1.0	0.952	0.965	0.968

Tabel 2

Det ses, at metoden giver væsentligt bedre resultater end Eulers "simple" metode. Generelt kan man vise, at Eulers forbedrede metode er af 2. orden, dvs. at den begåede fejl i fast afstand fra udgangspunktet er omtrent proportional med h^2 .

Der findes forskellige videreudviklinger af Eulers forbedrede metode, som vi ikke vil komme nærmere ind på her, men blot nævne den måske mest berømte af dem, nemlig Runge-Kuttas metode, der tilnærmer hældningen af linien mellem $(x_0, y(x_0))$ og $(x_1, y(x_1))$ med et vægtet gennemsnit af fire forskellige f-værdier valgt på så raffineret vis, at metoden bliver af 4. orden. Ved tilnærmet løsning ifølge Runge-Kuttas metode eller andre tilsvarende kan man opnå meget stor nøjagtighed, selv med en ikke særlig lille h.

Det skal til slut nævnes, at mange metoder benytter sig af variable steplængder, hvor $x_{n+1} - x_n$ kan variere med n. Ideen er at benytte små steplængder de steder, hvor løsningsfunktionen varierer kraftigt. Endvidere kan de samme principper som i Eulers (forbedrede) metode overføres til numerisk løsning af systemer af samhørende differentialligninger. Det er ofte sådanne principper, der er indbygget i færdige programpakker (såsom Maple) til behandling af disse spørgsmål.

3 Numerisk løsning af diffusionsligningen

Vi betragter metalstangen fra Eksempel 1 i noterne om partielle differentialligninger, og har da diffusionsligningen

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \frac{\partial^2 T}{\partial x^2},$$

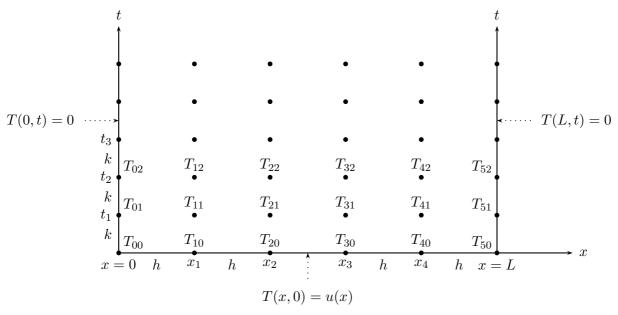
randbetingelserne

$$T(0,t) = 0 \qquad \text{og} \qquad T(L,t) = 0,$$

samt begyndelsesbetingelsen

$$T(x,0) = u(x) \qquad (0 \le x \le L).$$

Vi vi finde tilnærmede værdier T_{nm} til $T(x_n, t_m)$ for punkter (x_n, t_m) i et gitter (se Figur 4).



Figur 4

Steplængden er h på x-aksen og k på t-aksen, så

$$x_n = nh$$
 og $t_m = mk$.

På x-aksen er der ialt N step, hvor Nh=L, mens der på t-aksen i princippet er et ubegrænset antal step.

Nederste række $(m = 0, \text{ dvs. } t = t_0 = 0)$ findes vha. begyndelsesbetingelsen

$$T_{n0} = T(nh, 0) = u(nh),$$

dvs.

$$T_{00} = u(0) = 0$$
, $T_{10} = u(h)$, $T_{20} = u(2h)$

osv. Endvidere vil første og sidste søjle være 0, dvs.

$$T_{0m} = 0$$
 og $T_{Nm} = 0$

for alle m pga. randbetingelserne.

For at kunne benytte selve diffusionsligningen vil vi finde tilnærmede udtryk for $\frac{\partial T}{\partial t}$ og $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ i et gitterpunkt (x_n, t_m) . Da

$$T(x_n, t_{m+1}) - T(x_n, t_m) \simeq \frac{\partial T}{\partial t}(x_n, t_m) \cdot k,$$

har vi

$$\frac{\partial T}{\partial t}(x_n, t_m) \simeq \frac{T_{n,m+1} - T_{nm}}{k}.$$
 (*)

For at tilnærme $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ har vi brug for følgende

Hjælperesultat For en funktion g(x) gælder tilnærmelsen

$$g''(x) \simeq \frac{g(x+h) - 2g(x) + g(x-h)}{h^2}$$

når h er lille.

Bevis Vi tilnærmer g med dets 2. Taylorpolynomium i udviklingspunktet x:

$$g(x+h) \simeq g(x) + g'(x)h + \frac{1}{2}g''(x)h^2.$$

Vi udskifter $h \mod -h$

$$g(x - h) \simeq g(x) - g'(x)h + \frac{1}{2}g''(x)h^2$$

og lægger de to ligninger sammen:

$$g(x+h) + g(x-h) \simeq 2g(x) + g''(x)h^2$$
,

hvoraf resultatet følger.

Vi anvender hjælperesultatet på T(x,t) som funktion af x (med $t=t_m$ fastholdt) og får

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x_n, t_m) \simeq \frac{T(x_{n+1}, t_m) - 2T(x_n, t_m) + T(x_{n-1}, t_m)}{h^2}
\simeq \frac{T_{n+1, m} - 2T_{nm} + T_{n-1, m}}{h^2}.$$
(**)

Nu indsætter vi de tilnærmede udtryk (*) og (**) for $\frac{\partial T}{\partial t}$ og $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ i diffusionsligningen og får

$$\frac{T_{n,m+1} - T_{nm}}{k} = D \cdot \frac{T_{n+1,m} - 2T_{nm} + T_{n-1,m}}{h^2}.$$

Af de indgående størrelser er $T_{n,m+1}$ den eneste, der ligger i (m+1)'te række, så vi isolerer denne:

$$T_{n,m+1} = T_{nm} + \frac{Dk}{h^2} (T_{n+1,m} - 2T_{nm} + T_{n-1,m}).$$

Med

$$r = \frac{Dk}{h^2}$$

fås

$$T_{n,m+1} = (1-2r)T_{nm} + r(T_{n+1,m} + T_{n-1,m}).$$

Denne formel kan nu anvendes succesivt til finde T_{nm} ; f.eks. er

$$T_{11} = (1 - 2r)T_{10} + r(T_{20} + T_{00}).$$

Når hele rækken med m=1 er beregnet, kan man gå videre og beregne rækken med m=2, osv.

Man kan vise, at det er nødvendigt at $r \leq \frac{1}{2}$, dvs.

$$\frac{Dk}{h^2} \leq \frac{1}{2}$$

for på denne måde at få gode tilnærmelser til løsningsfunktionen T(x,t).