Paskaita 5

Paprastų dif. lygčių ir sistemų skaitiniai sprendimo metodai

Problema

- **Koši uždavinys: $y'=f(x,y)$, $y(x_0)=y_0$**
- **Minėtą problemą galima panašiai užrašyti ir tuo atveju, kai y – vektorius;**
- **Pavyzdys (pratimas):**
  - $y'=2y$, $y(0)=1$;

Lasvasis kritimas

$$mx'' = -mg, \; x(0) = h, \; v(0) = 0$$

Pastaba

- **Jėgą (iš antrojo N. dėsnio $F = ma = mr''$) paprastai randa iš potencinės energijos reikšmių: panašiai kaip pakeltas per aukštį *h* virš žemės daiktas turi potencinę energiją *mgh* ir Žemė jį veikia su jėga *mg.* Tik mūsų nagrinėjamu atveju jėgos turi elektromagnetinę prigimtį.**

Lasvasis kritimas

$$mx'' = -mg,\ x(0) = h,\ v(0) = 0$$

...tęsinys

$$v' = -g$$

$$x' = v$$

...tęsinys

$$v' = -g$$

$$x' = v$$

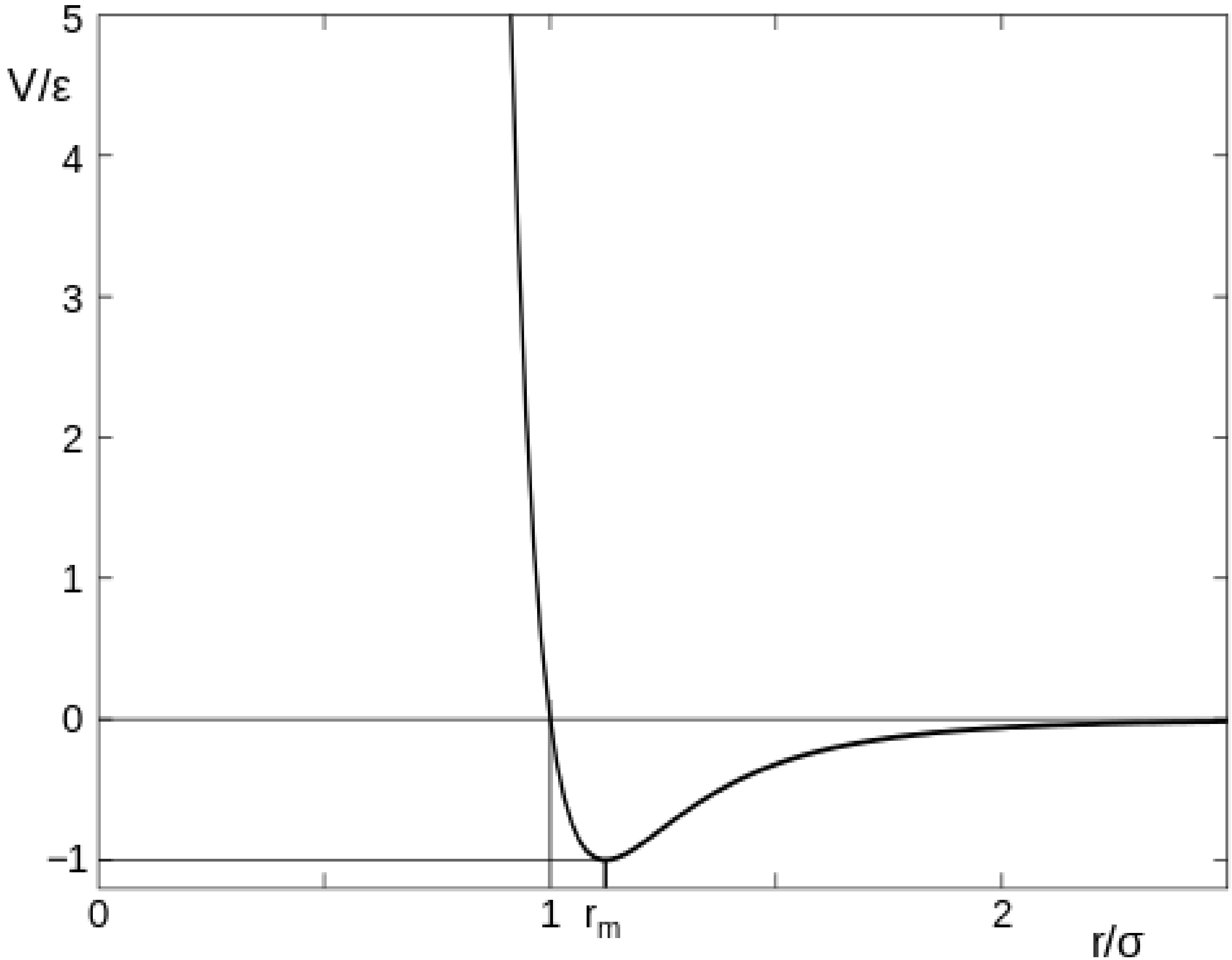
...tęsinys

$$v' = -g$$

$$x' = v$$

Dar vienas pavyzdys. Dviejų molekulių sąveika judant tiese.

Tarkime molekulė *i* turi masę *mi*, koordinatę *xi* ir greitį *vi*. Sąveiką tarp molekulių nustato LJ potencialas.



Dviejų molekulių sąveika judant tiese.

Tarkime molekulė *i* turi masę *mi*, koordinatę *xi* ir greitį *vi*. Sąveiką tarp molekulių nustato LJ potencialas.

$$V_{LJ} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{6} \right] = \varepsilon \left[\left(\frac{r_m}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_m}{r} \right)^{6} \right],$$

Pratimas

Užrąšykite lygčių sistemą dviem molekulėms tiesėje.

Kaip spręsti skaitiškai? Įvadas

- **Užrašykime (artutiniškai) išvestinė :**
  - $y'(x) \sim (y(x+\Delta x) - y(x)) / \Delta x$
- **Paskaičiuokit su skaičiuokle $y'(x)$ kai**
  - $y(x) = x^2 + x$
  - $y(x) = \sin(x)$
  - $y(x) = \exp(x)$

taškuose x=0, 0.1, 0.2, 0.3, ..., 1.0, kai Δx=0.001, palyginkite su tiksliosiomis išvestinių reikšmėmis

... minėtą schemą panaudokime d.l.

- **Vietoje y'=f(x,y) bandome rašyti:**
  - ($y(x+\Delta x)-y(x)$) / $\Delta x = f(x,y)$
  - $y(x+\Delta x) = y(x) + \Delta x * f(x,y)$
- **Tai leidžia sukurti vadinamąjį Eulerio metodą:**
  - Pradedam: $y(x_0)=y_0$ – iš pradinės sąlygos;
  - ... tada tegul $x_1 = x_0 + h$ (h – pasirenkamas pagal norimą tikslumą), o $y_1= y(x_1) \sim y_0 + f(x_0,y_0)*h$;
  - Toliau - analogiškai ...

Pavyzdys (skaičiuoklėje)

h	0,1	
x0	0	
y0	1	
Lygtis	y'=-2y	y=exp(-2x)

x	y	y tikslus
0,0	1,00000	1,00000
0,1	0,80000	0,81873
0,2	0,64000	0,67032
0,3	0,51200	0,54881
0,4	0,40960	0,44933
0,5	0,32768	0,36788
0,6	0,26214	0,30119
0,7	0,20972	0,24660
0,8	0,16777	0,20190
0,9	0,13422	0,16530
1,0	0,10737	0,13534

y reikšmės, paskaičiuotos pagal Eulerio metodą

Tikslus sprendinys

Apibendrinimas sistemai

- **Nesunkiai galima apibendrinti Eulerio metodą sistemai:**
  - Pratimas.Užrašykite Eulerio metodą sistemai
    - $y' = u(x,y,z)$;
    - $z' = v(x,y,z)$;
- **Jeigu turime lygtį $y'' = f(x,y,y')$, tai ją galime paversti į sistemą. Kaip?**

Runge – Kutos metodai

- **Jų yra daug :), nes tai metodų šeima**
- **Mes panagrinėsime RK2 ir RK4 – klasikinius metodus**
- **Tarkime, kad mes žinome reikšmes y_N ir x_N. (Pradžioje, aišku, N=0 – ir mes juos žinome iš pradinių sąlygų).**
- **Tada y_{N+1} skaičiavimui turime apskaičiuoti – priklausomai nuo metodo – vadinamuosius Runge koeficientus k_1,k_2 arba k_1,k_2,k_3,k_4**

Koeficientų skaičiavimas (RK2)

- $k_1 = h * f(x_N, y_N);$
- $k_2 = h * f(x_N + h,\ y_N + k_1)$

Koeficientų skaičiavimas (RK4)

- $k_1 = h * f(x_N, y_N);$
- $k_2 = h * f(x_N + 0.5 * h,\ y_N + 0.5 * k_1)$
- $k_3 = h * f(x_N + 0.5 * h,\ y_N + 0.5 * k_2)$
- $k_4 = h * f(x_N + h,\ y_N + k_3)$

y_{N+1} skaičiavimas

- **$x_{N+1} = x_N + h$;**
  - $y_{N+1} = y_N + 1/2*(k_1+k_2)$ (RK2)
  - $y_{N+1} = y_N + 1/6*(k_1+2*k_2+2*k_3+k_4)$ (RK4)
- **Klausimas: jeigu f(x,y) nepriklauso nuo y, t.y., f(x,y)=g(x), tai ką primena tada RK2 ar RK4?**

Cheminės kinetikos elementai

- **Nuoroda: >>>>>**


Pabaiga