Počítačová fyzika VI

Diferenciálne rovnice

Peter Papp, Ján Ďurian

(Peter Markoš)

Katedra experimentálnej fyziky F2-81

Obsah

Diferenciálna rovnica prvého stupňa

$$\frac{\partial y}{\partial x} = f(x, y)$$

Definujem $y_n = y(x)$, $y_{n+1} = y(x + h)$.
Jednoduchá aproximácia prvej derivácie dá

$$y_{n+1} = y_n + hf(x, y)$$

ktorý je presný do rádu h^2.

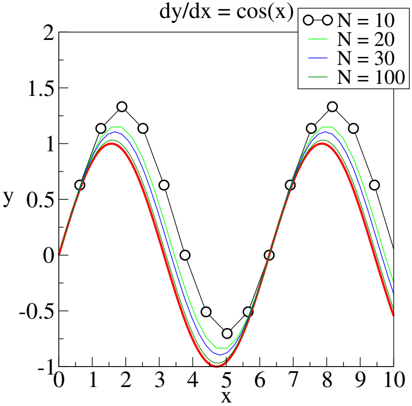
Príklad: riešme numericky diferenciálnu rovnicu

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \cos x$$

s počiatočnou podmienkou $y(0) = 0$.
Riešenie poznáme: $y(x) = \sin(x)$.

Elementárny algoritmus

voľme krok $h = 2\pi/N$



Elementárny algoritmus 2

Riešme numericky harmonický oscilátor

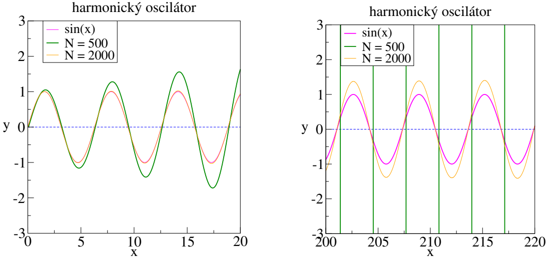
$$y'' = -y$$

čo zodpovedá dvom diferenciálnym rovniciam

$$y'_1 = y_2$$

$$y'_2 = -y_1$$

s počiatočnými podmienkami $y_1 = 0$, $y_2 = 1$.



- potrebujem veľmi malý krok
- numerické chyby sa akumuluju, preto preto riešenie vždy skolabuje

Východisko

Hľadajme preto presnejšiu iteračnú schému

$$y_{n+1} = y_n + h\Phi(x_n, y_n, h)$$

s neznámou funkciou Φ.

Diferenciálna rovnica prvého stupňa

Presnejší výpočet:

Taylorov rozvoj: $y_{n+1} = y(x_n + h) = y_n + hy'_n + \frac{1}{2}h^2 y''_n$.

Teraz využijeme, že poznáme $y'_n = f(x_n, y_n)$, takže vieme vyjadriť

$$y''_n = \frac{\partial}{\partial x} f(x_n, y_n) = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x}$$

Dosadíme $\partial y / \partial x = f(x, y)$ a dostaneme

$$y_{n+1} = y_n + hf + \frac{1}{2}h^2 \left[\frac{\partial f}{\partial x} + f(x, y)\frac{\partial f}{\partial y}\right]\Bigg|_{x=x_n, y=y_n}$$

presné do rádu h^3.

Obmedzenia:

- musíme poznať analytický tvar $f(x, y)$ aby sme mohli derivovať.
- v každom kroku počítam dve rôzne funkcie
- vylepšenie predpokladá výpočty stále vyšších komplikovaných derivácií

Algoritmy Runge-Kutta

Diferenciálnu rovnicu $\partial y / \partial x = f(x, y)$ nahradím iteračnou schémou

$$y_{n+1} = y_n + \Phi(x_n, y_n, h)$$

Hľadajme funkciu $\Phi(x, y)$ v tvare súčtu s členov

$$\Phi(x, y, h) = \sum_{i=1}^{s} w_i k_i$$

neznáme koeficienty k_i počítam postupne: pre výpočet nasledujúceho koeficientu využijem predchádzajúce:

$$k_i = hf\left(x + \alpha_i h, \quad y + \sum_{j}^{i-1} \beta_{ij} k_j\right)$$

Koeficienty w_i, α_i a β_{ij} volím tak, aby presnosť metódy bola $\sim h^p$. Metóda nie je jednoznačná, dá sa ale ukázať, že $p = s$ pre $s \leq 4$, ale napr. pre $s = 6$ je $p = 5$. Takže zvyšovanie s sa neoplatí.

Výhoda: volám vždy len funkciu f, aj keď s inými hodnotami premenných.

Runge-Kutta algoritmy

Metóda nie je jednoznačná, prax overila dva jednoduché algoritmy:

3. rád (RK-3)

$$\begin{aligned}
k_1 &= hf(x_n, y_n) \\
k_2 &= hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1\right) \\
k_3 &= hf\left(x_n + h, y_n - k_1 + 2k_2\right) \\
y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6}\left(k_1 + 4k_2 + k_3\right)
\end{aligned}$$

Metóda je presná až do rádu h^3.

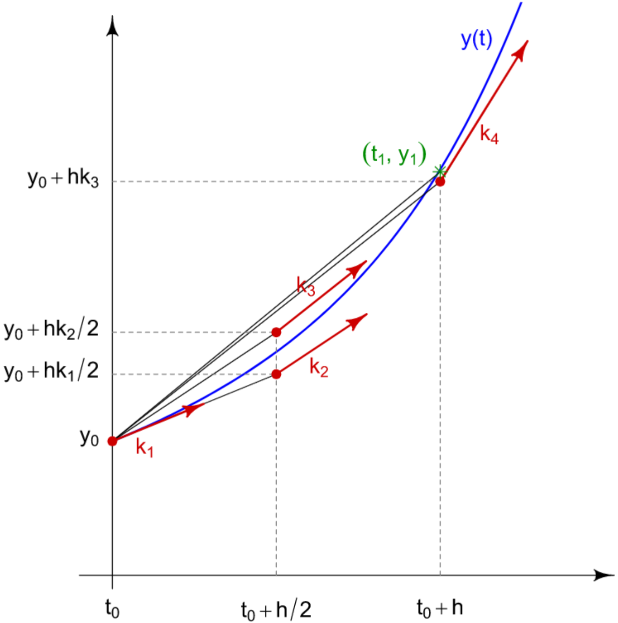
Runge-Kutta algoritmy

4. rád (RK-4)

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

Metóda je presná až do rádu h^4.

Runge-Kutta algoritmy



Sústava diferenciálnych rovníc

Vo všeobecnosti nás bude zaujímať systém N rovníc.

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

pre N neznámych funkcií y_1, y_2, $\ldots y_N$.

Napríklad rovnicu druhého rádu

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = F(x, y, y') \qquad \left(y' = \frac{\partial y}{\partial x}\right)$$

Prepíšeme na systém rovníc prvého rádu

$$\frac{\partial y_1}{\partial x} = y_2$$

$$\frac{\partial y_2}{\partial x} = F(x, y_1, y_2)$$

$y_1 = y$, $y_2 = y'$, $f_1 = y_2$, $f_2 = F$.

Sústava N diferenciálnych rovníc RK-4

Mám nezávisle premennú x a N premenných $\vec{y} = (y_1, y_2, \ldots y_N)$.
V každom kroku RK algoritmu potrebujeme N parametrov.
1. krok: výpočet N parametrov $\vec{k_1}$

$$\vec{k}_1 = h\vec{f}(x_n, \vec{y}_n) \qquad (\vec{y}_n \text{ sú funkčné hodnoty pre } \ x = x_n)$$

Až keď mám všetky hodnoty $\vec{k}_1$, môžeme pristúpiť k výpočtu $\vec{k}_2$:

$$\vec{k}_2 = h\vec{f}\left(x_n + \frac{1}{2}h, \vec{y}_n + \frac{1}{2}\vec{k}_1\right)$$

Po nájdení všetkých hodnôt $\vec{k}_2$ prikročíme k výpočtu $\vec{k}_3$:

$$\vec{k}_3 = h\vec{f}\left(x_n + \frac{1}{2}h, \vec{y}_n + \frac{1}{2}\vec{k}_2\right)$$

Po nájdení všetkých hodnôt $\vec{k}_3$ prikročíme k výpočtu $\vec{k}_4$:

$$\vec{k}_4 = h\vec{f}(x_n + h, \vec{y}_n + \vec{k}_3)$$

Na záver nájdeme nové hodnoty funkcií $\vec{y}$:

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

Pokročilé programovanie

Počítať budeme s krokom h, ale v praxi nepotrebujeme uložiť výsledky po každom kroku $x_0 + hi$. Stačí ukladať výsledky pre

$$x_0 + n\Delta \qquad \Delta \gg h$$

Preto urobíme subrotinu RK s parametrami x, $\vec{y}$, h, Δ:

Vstup: $\vec{y}(x)$

Výstup: $\vec{y}(x + \Delta)$

samotná subroutina obsahuje $n = [\Delta/h]$ cyklov Runge Kutta s krokom h, a posledný cyklus s krokom $h' = \Delta - nh < h$.

Počiatočné podmienky

Ide o rovnice 1. rádu, preto nám stačí zadať hodnotu všetkých funkcií v počiatočnom bode x_0.

$$\vec{y}(x = x_0) = \vec{y}_{\text{poč.}}$$

Najjednoduchší príklad: Harmonický oscilátor

Príklad: Rovnicu pre harmonický oscilátor

$$x''(t) + \omega_0^2 x(t) = 0$$

prepíšem do tvaru

$$\begin{aligned} x'(t) &= p(t) \\ p'(t) &= -\omega_0^2\, x(t) \end{aligned}$$

pre polohu a hybnosť. položme $y_1 = x$, $y_2 = p$:

$$\begin{aligned} y_1'(t) &= y_2(t) \\ y_2'(t) &= -\omega_0^2\, y_1(t) \end{aligned}$$

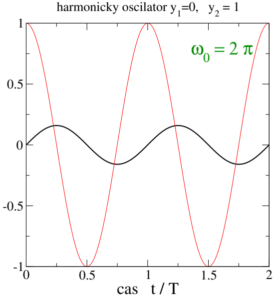
Vynásobme prvú rovnicu $\omega_0^2 y_1$ a druhú y_2 a sčítajme:

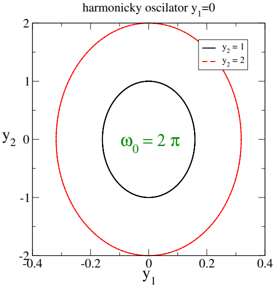
$$\omega_0^2 y_1 y_1' + y_2 y_2' = \frac{\partial}{\partial t}(y_2^2 + \omega_0^2 y_1^2) = 0$$

dostali sme

- zákon zachovania energie $E = (y_2^2 + \omega_0^2 y_1^2)/2 =$ konštanta.
- stabilné dráhy vo fázovom priestore

Najjednoduchší príklad: Harmonický oscilátor





Úloha:

- napíšte program pre riešenie DR metódou RK-4
- riešte harmonický oscilátor
- pridajte do rovnice aj treciu silu γy_2 a zopakujte výpočet

Úloha 6.

- napíšte program pre riešenie DR metódou RK-4
- ukážte, že algoritmus RK-4 rieši presne diferenciálnu rovnicu

$$\frac{\partial y}{\partial x} = 4x^3$$

- napíšte program RK pre dve a viac diferenciálnych rovníc
- riešte numericky harmonický oscilátor
- pridajte do rovnice aj treciu silu γy_2 a zopakujte výpočet