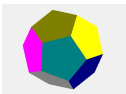
Elementære numeriske metoder

Dette er en artikel fra min hjemmeside: www.olewitthansen.dk



Ole Witt-Hansen 2008

7. Differentialligninger, der ikke kan løses analytisk

Det er faktisk de færreste differentialligninger (problemer) i fysikken, der har en analytisk løsning. Analytisk løsning betyder, at man kan finde matematiske funktioner, der beskriver systemets position og hastighed til ethvert tidspunkt.
Den matematiske disciplin, der beskæftiger sig med numeriske løsninger til problemer, kaldes for numerisk analyse. Det er teoretisk set et omfattende område, og i modsætning til, hvad man måske umiddelbart skulle tro, så er teorien udviklet lang tid før fremkomsten af computere.
Man kan ikke overvurdere betydningen af analytiske løsninger til fysiske problemer. Alternativet er numeriske løsninger, som groft set kan karakteriseres ved at man regner med små med endelige tilvækster Δx, Δt i stedet for med infinitesimale størrelser *dx, dt*, differenskvotienter $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ i stedet for differentialkvotienter $\frac{dx}{dt}$ og summer $\sum f(t_i)\cdot\Delta t_i$ i stedet for integraler $\int f(t)dt$.
Kort sagt, man har ikke længere hele differential- og integralregningen til rådighed.

For eksempel har beregning af kastevidden ved et skråt kast overordentlig stor betydning for traditionelt artilleri. Der findes imidlertid ikke analytiske løsninger, fordi mundingshastigheden er så stor, at gnidningskraften ikke længere er proportional med farten v, men med v^α, hvor $1 < \alpha < 2$.
Artillerister er derfor henvist til interpolation i meget omfattende tabeller, der afhænger af elevationen, kanonens kaliber, projektilets udformning mv.
Disse tabeller er ofte lavet på grundlag af hundrede af forsøg. I dette tilfælde er det let at forstå fordelen ved i stedet at have et analytisk funktionsudtryk.

7.1 Taylors formel

Vi vil i første omgang kun se på numerisk løsning af 1. ordens differentialligninger.
For at kunne vurdere nøjagtigheden af formlerne (og det er naturligvis vigtigt) er det nødvendigt at kende Taylors Formel. Denne formel kan formuleres på flere måder, hvor vi kun giver den version, der anvendes til approksimation af en funktion omkring et punkt x_0.
Har vi givet en reel funktion $y = f(x)$, x_0 er et fast punkt og hvis h betegner en lille til vækst til x_0, så gælder der under ret generelle forudsætninger:

(7.1) $$f(x_0+h) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}h + \frac{f''(x_0)}{2!}h^2 + \frac{f^{(3)}(x_0)}{3!}h^3 + \ldots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}h^n + \int_0^h \frac{f^{(n+1)}(x_0+t)}{n!}t^n dt$$

Det sidste led (restleddet) ses, at være proportionalt med h^{n+1}, vi skriver dette som $O(h^n)h$, hvor symbolet $O(h^n)$ læses som "af orden h^n ". Undlader man restleddet får man en approksimation til $f(x_0+h)$. Alt efter, hvor mange led man medtager får man en 0'te, 1., 2., ordens approksimation.

$$f(x_0+h) = f(x_0) + O(h^0)h$$
$$f(x_0+h) \approx f(x_0)$$

(7.2) $$f(x_0+h) = f(x_0) + f'(x_0)h + O(h)h$$
$$f(x_0+h) \approx f(x_0) + f'(x_0)h$$

(7.3) $$f(x_0+h) = f(x_0) + f'(x_0)h + \tfrac{1}{2}f''(x_0)h^2 + O(h^2)h$$

$$f(x_0+h) \approx f(x_0) + f'(x_0)h + \tfrac{1}{2} f''(x_0)h^2$$

(7.4)
$$f(x_0+h) = f(x_0) + f'(x_0)h + \tfrac{1}{2} f''(x_0)h^2 + \tfrac{1}{6} f^{(3)}(x_0)h^3 + O(h^3)h$$
$$f(x_0+h) \approx f(x_0) + f'(x_0)h + \tfrac{1}{2} f''(x_0)h^2 + \tfrac{1}{6} f^{(3)}(x_0)h^3$$

7.2 Numerisk løsning af 1. ordens differentialligninger

Skal vi nu løse en differentialligning af 1. orden $\frac{dy}{dx} = f'(x) = g(x,y)$, hvor vi kender en begyndelsesværdi (x_0, y_0), så kan det gøres ved at anvende (6.1), idet

$$f(x_0+h) \approx f(x_0) + f'(x_0)h = y_0 + g(x_0, y_0)h$$

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

$$(x_2, y_2) = (x_1+h, f(x_1+h)) = (x_1+h, f(x_1)+f'(x_1)h) = (x_1+h, y_1+g(x_1, y_1)\, h)$$

Metoden kaldes for numerisk integration, og når man anvender (6.1) kaldes det ofte for Euler integration.
Euler integration anvendes stort set aldrig i praksis, fordi fejlene akkumulerer, hvis fortegnet for $f''(x)$ er konstant.
For at opnå en bedre tilnærmelse til f'(x) end (6.1) kan man anvende følgende:

(7.5)
$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+\frac{h}{2}) - f(x_0-\frac{h}{2})}{h} \Leftrightarrow f(x_0+\tfrac{h}{2}) = f(x_0-\tfrac{h}{2}) + f'(x_0)h$$

Hvis man rækkeudvikler begge led i $f(x_0+\frac{h}{2}) - f(x_0-\frac{h}{2})$ ved hjælp af Taylors formel finder man:

$$f(x_0+\tfrac{h}{2}) - f(x_0-\tfrac{h}{2}) = f(x_0) + f'(x_0)\tfrac{h}{2} + \tfrac{1}{2} f''(x_0)\tfrac{h^2}{4} - (f(x_0) + f'(x_0)(-\tfrac{h}{2}) + \tfrac{1}{2} f''(x_0)\tfrac{h^2}{4}) + O(h^2)h$$

(7.6)
$$f(x_0+\tfrac{h}{2}) - f(x_0-\tfrac{h}{2}) = f'(x_0)h + O(h^2)h$$

Som man kan se, er denne formel korrekt til orden i h^3, i modsætning til 2.ordens formlen. Hvis $h = \frac{1}{10}$, så er korrektionsleddet (fejlen) af størrelsesorden $h^3 = \frac{1}{1000}$ i stedet for Euler integrationen, hvor korrektionsleddet (fejlen) er af størrelsesorden $h^2 = \frac{1}{100}$. Det sidste er bestemt ikke uvæsentligt for korrekte beregninger. Løsningen af 1. ordens differentialligninger foregår næsten på samme måde, som før. Man regner iterativt (skridtvis) frem i enheder af h, idet

(7.7)
$$f(x_0+\tfrac{h}{2}) = f(x_0-\tfrac{h}{2}) + f'(x_0)h = f(x_0-\tfrac{h}{2}) + g(x_0, y_0)h$$

Den eneste forskel er, at man bliver nødt til at kende funktionsværdien i to punkter med afstanden ½h, for at starte iterationen. Dette gøres imidlertid ved en eller flere Euler skridt.
Formlen (7.7) kan anvendes i en del tilfælde, men den har også nogle uheldige egenskaber, især hvis den anvendes til at løse 2. ordens differentialligninger.
Til løsning af praktiske problemer anvendes stort set altid Runge-Kutta's metode, der er betydelig mere kompliceret end (6.7), men hvor korrektionsleddet (fejlen) er af størrelsesorden h^4.
De løsninger, af 1. og 2. ordens differentialligninger, der er lavet med Mathemat-programmet, og Satellitbevægelse - programmet er alle lavet med Runge-Kutta's metode.

Som omtalt findes der ikke analytiske løsninger til selv relativt ukomplicerede problemer i fysikken.
To legeme problemet, f.eks. månens bevægelse omkring jorden eller en planets bevægelse omkring solen, kan faktisk løses analytisk, hvor løsningskurven er et keglesnit (ellipse, parabel eller hyperbel), mens 3. legeme problemet ikke har nogen eksakt analytisk løsning. Når man skal beregne energiniveauerne i et atom, er det altid brintatomet, man behandler, idet det (også i kvantemekanikken) er det eneste, der kan løses eksakt.
Faktisk var astronomerne nogle af dem, der mest energisk arbejdede på udviklingen af computere, fordi de ønskede at kunne beregne himmellegemernes baner mere korrekt.