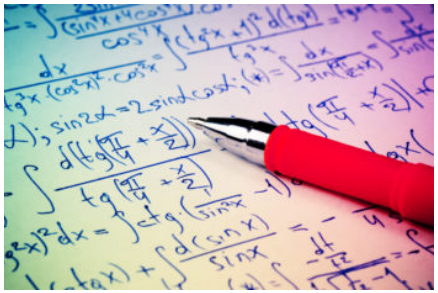
Numeričko rješavanje običnih diferencijalnih jednadžbi u Matlabu



Željka Ujević Andrijić
Sveučilište u Zagrebu
Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije

zujevic@fkit.unizg.hr

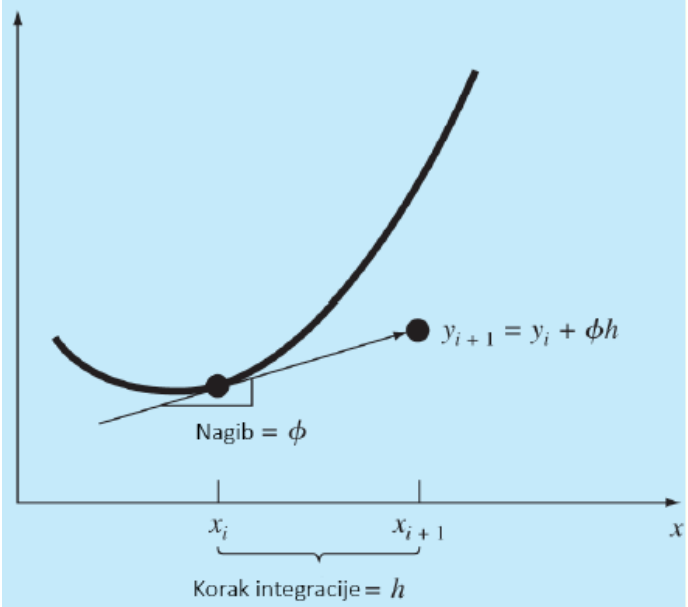
Rješavanje običnih diferencijalnih jednadžbi (ODJ)

Opća ODJ prvog reda: $dy/dx = f(x,y)$

- Diskretiziramo područje (interval) nezavisne varijable u kojem tražimo rješenje.
- Tražimo način kako procijeniti sljedeću točku na intervalu diskretizacije.

Nova vrijednost = stara vrijednost + nagib **· korak**

Rekurzivni zapis: $y_{i+1} = y_i + \phi h$



Koeficijent smjera (nagib) tangente jednak je derivaciji funkcije krivulje u točki x_i

- Vrijednosti od kojih krećemo zadane su **početne** vrijednosti.
- **Kako odrediti nagib (prvu derivaciju) ϕ ?**

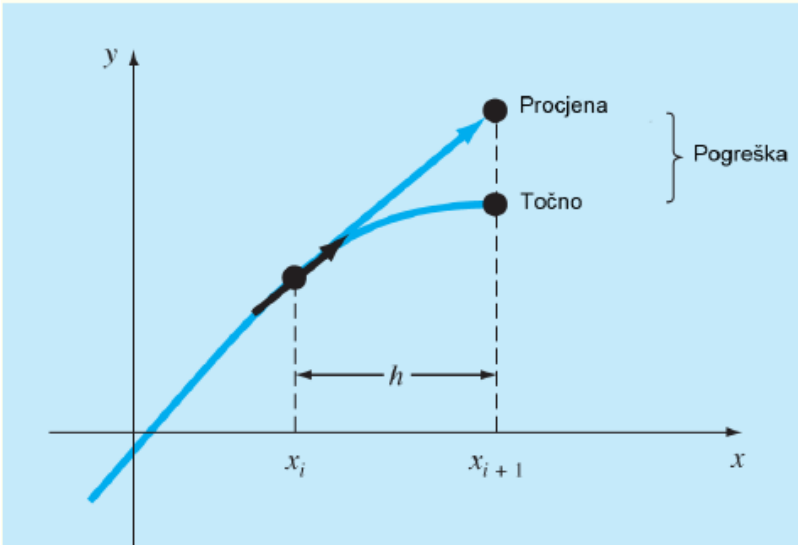
Eulerova metoda

Najjednostavnije:

$$\phi = f(x_i, y_i)$$

Funkcija se aproksimira na intervalu (x_i, x_{i+1}) s nagibom na početku intervala.

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i, y_i)$$



Runge Kutta metode

OPĆI OBLIK: $y_{i+1}=y_i+\phi f(x_i,y_i,h)\cdot h$

Funkcija prirasta

$$\phi = a_1k_1 + a_2k_2 + \ldots + a_nk_n$$

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$
$$k_2 = f(x_i + p_1h, y_i + q_{11}k_1h)$$
$$k_3 = f(x_i + p_2h, y_i + q_{12}k_1h + q_{22}k_2h)$$
$$\cdot$$
$$\cdot$$
$$\cdot$$
$$k_n = f(x_i + p_{n-1}h, y_i + q_{n-1,1}k_1h + q_{n-1,2}k_2h + \ldots q_{n-1,n-1}k_{n-1}h)$$

k - koeficijenti nagiba
n – red metode
a_i, p_i, q_i - konstante

Konstante se određuju izjednačavanjem s Taylorovim redom.

Runge Kutta metode

Red	Naziv	Oblik	k
n=1	Eulerova metoda	$y_{i+1} = y_i + k_1 h$	$k_1 = f(x_i, y_i)$
n=2	Heune a_2=1/2	$y_{i+1} = y_i + \left(\frac{1}{2}k_1 + \frac{1}{2}k_2\right)h$	$k_1 = f(x_i, y_i)$ $k_2 = f(x_i + h, y_i + k_1 h)$
	Heune (poligonalna) a_1=1	$y_{i+1} = y_i + k_2 h$	$k_1 = f(x_i, y_i)$ $k_2 = f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_1 h)$
	Ralston a_2=2/3	$y_{i+1} = y_i + \left(\frac{1}{3}k_1 + \frac{2}{3}k_2\right)h$	$k_1 = f(x_i, y_i)$ $k_2 = f(x_i + \frac{3}{4}h, y_i + \frac{3}{4}k_1 h)$
n=3	Runge Kutta 3. reda	$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3)h$	$k_1 = f(x_i, y_i)$ $k_2 = f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_1 h)$ $k_3 = f(x_i + h, y_i - k_1 h + 2k_2 h)$
n=4	Runge Kutta 4. reda	$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)\,h$	$k_1 = f(x_i, y_i)$ $k_2 = f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_1 h\right)$ $k_3 = f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_2 h\right)$ $k_4 = f(x_i + h, y_i + k_3 h)$

Adaptivne metode rješavanja ODJ

- Za razliku od prethodnih metoda u kojima je korak integracije *h* konstantan kod adaptivnih metoda ***h* se može mijenjati u svakom koraku**, pa jednokoračnu metodu možemo pisati u obliku:

$$y_{i+1} = y_i + h_i \phi(x_i, y_i, h_i)$$

- Određuje se duljina koraka h_i tako da bude postignuta unaprijed zadana točnost → potrebno je procijeniti lokalnu pogrešku uslijed diskretizacije.
- Pogreška se procjenjuje iz razlike predikcija dobivenih iz dviju metoda:

1. Iz razlike dviju RK metoda istog reda, ali uz različite korake integracije: **Adaptivna RK metoda**
2. Iz razlike između dvije RK metode različitog reda (npr. 5. i 4. reda) **Runge-Kutta Fehlberg metoda)**

- *U programskim alatima postoje **ugrađene funkcije** za rješavanje ODJ!*

Adaptivne metode rješavanja ODJ

- **ode23** primjenjuje RK 2. i 3. za rješavanje reda ODJ **i podešavanje koraka integracije**
- **ode45** primjenjuje RK 4. i 5. za rješavanje reda ODJ **i podešavanje koraka integracije**. Preporuča se da se rješavanje počinje s ovom funkcijom!
- **ode113** je funkcija s višekoračnim solverom.

Sintaksa **ode** naredbe:

```
[t, y] = ode45(odefun, tspan, y0)
```

y: niz rješenja, gdje je svaki stupac jedna varijabla, a svaki red odgovara vremenu u ***t*** vektoru

odefun: funkcija

tspan: vremenski raspon na kojemu se traži rješenje

y0: vektor početnih vrijednosti

Koraci rješavanja ODJ u Matlabu

1. **Kreiranje funkcije** u Matlabu
   u koju se upisuje diferencijalna jednadžba.

2. **Unošenje konstantnih vrijednosti**
   iz ODJ u funkciju ili m-skriptu.

3. **Specificiranje inicijalnih vrijednosti** zavisnih varijabli i **područja** nezavisnih varijabli unutar kojeg se traži rješenje.

4. **Primjena *solvera*** (funkcija ode, Euler ili Runge Kutta metoda) za rješavanje obične diferencijalne jednadžbe.

Primjer rješavanja običnih diferencijalnih jednadžbi

Primjer:

Izradite program za numeričko rješavanje diferencijalne jednadžbe I. reda s konstantnim koeficijentima **Eulerovom** metodom, metodom **Runge-Kutta IV** i naredbom **ode45**.

$$y' + y = sin(x) + 0.5$$

uz početni uvjet: $y_{(0)} = 0{,}5$

Program u Matlabu:

```
clear all ; clc ;  close all

x1=0;      % pocetna tocka
y1_0=0.5; % pocetni uvjet
xmax=5;    % zavrsna tocka
bkr=10;    % broj koraka
h=(xmax-x1)/bkr; % korak integracije

y1_rk=y1_0; % pocetna vrijednost za RK-IV
y1_e=y1_0;  % pocetna vrijednost za Euler

xmax=x1+h*bkr;
br=0;
```

Primjer rješavanja ODJ

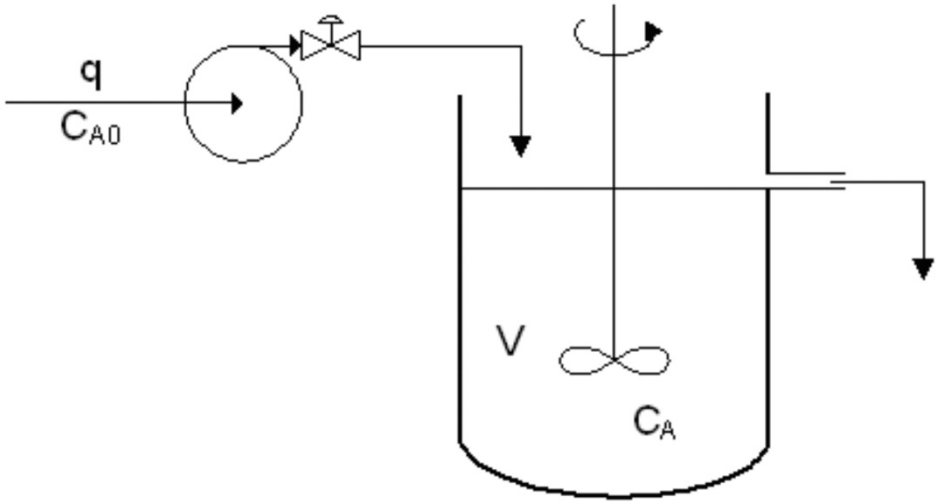
```
for x=x1:h:xmax
    br=br+1;
    xc(br)=x;
    yrk(br)=y1_rk;    % RK-IV
    y1e(br)=y1_e;     % Euler

    y1_e = y1_e + h*dy(x,y1_e); % Euler

    k1 = h*dy(x,y1_rk);  % RK-IV algoritam
    k2 = h*dy(x+h/2,y1_rk+k1/2);
    k3 = h*dy(x+h/2,y1_rk+k2/2);
    k4 = h*dy(x+h,y1_rk+k3);
    y1_rk = y1_rk + (k1+2*k2+2*k3+k4)/6;

   fprintf('\nx=%.5f\ty_RK4=%.5f\ty_E=%.5f\t%.3f%%', x,y1_rk,y1_e)
end
fprintf('\n');

[xx, yy] = ode45('dy',[x1 xmax],y1_0);  % naredba ode45

plot(xc,yrk,'-x',xc,y1e,'-o',xx,yy,'-r')
xlabel('x'); ylabel('y');
legend('R-K-IV','Euler','ode45');
grid on
```

```
function yiz = dy(x, y)
% Definicija funkcije dy
 yiz = sin(x) - y + 0.5;
end
```

Primjer: Protočno kotlasti reaktor

Zadatak:

Odredite prijelazni odziv koncentracije u protočno kotlastom reaktoru, c_A



Zadani podaci:

q = 0,085 m^3/min - protok kroz reaktor

V = 2,1 m^3 - volumen reaktora

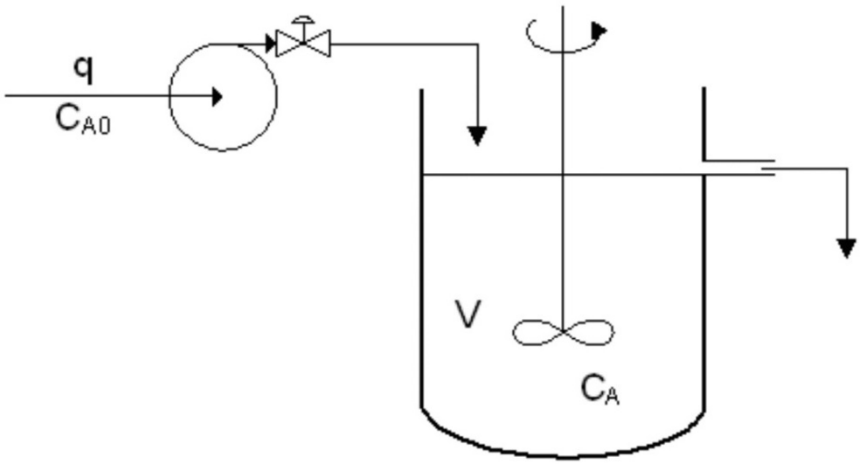
c_{A0} = 1,85 mol/m^3 - koncentracija tvari A u ulaznoj struji

$c_{A,poč}$ = 0 mol/m^3 - početna koncentracija tvari A u reaktoru

Primjer: Protočno kotlasti reaktor (PKR)

Bilanca množine tvari: $\frac{dn_\mathrm{A}}{dt} = \dot{n}_\mathrm{d} - \dot{n}_\mathrm{o}$

$q_\mathrm{dov} = q_\mathrm{odv} \Rightarrow V = \mathrm{konst}$



$$V \cdot \frac{dc_\mathrm{A}}{dt} = q \cdot c_\mathrm{A0} - q \cdot c_\mathrm{A}$$

$$\frac{V}{q} \cdot \frac{dc_\mathrm{A}}{dt} = c_\mathrm{A0} - c_\mathrm{A}$$

$$\frac{dc_\mathrm{A}}{dt} = (c_\mathrm{A0} - c_\mathrm{A})\frac{q}{V}$$

Treba riješiti ovu diferencijalnu jednadžbu.

Primjer: PKR – Primjena Euler-ove metode

$$\frac{dc_A}{dt} = (c_{A0} - c_A)\frac{q}{V}$$

```
%   Zadani podaci iz procesa
V = 2.1;            % volumen reaktora  1 [m3]
q = 0.2;             % protok [m3/min]
ca0 = 1.85;          % koncentracija na ulazu [mol/m3]

%   PODACI ZA SIMULACIJU
delt = 0.5;          % korak integracije
tstart = 0;
tend = 120;          % trajanje procesa

%   POCETNI UVJETI I VEKTORI ZA SPREMANJE
ca1 = 0;            % [mol/m3]
n = round(tend/delt);       % 70/0.1 = 700 vrijeme (broj vrem. koraka)

%  SIMULACIJA
for cnt = 1:n

%  NUMERICKA SIMULACIJA, Euler
   ca1dot =(ca0 - ca1))*q/V ;        % dca1 = ...
   ca1 = ca1 + delt * ca1dot;

%  Pohrana rezultata za graficki prikaz (u obliku matrica)
    CA1(1,cnt) = ca1;
    CA0(1,cnt)= ca0;
    t(1,cnt) = cnt*delt;
end

% odziv Ca1
plot (t(1,:),CA1(1,:))
xlabel ('vrijeme [min]')
ylabel ('Ca1 [mol/m3]')
title ('Primjer PKR')
```

Primjer: PKR – preko naredbe ode45

Editor - C:\Users\zeljk\Desktop\MATSIM_20_21\ODJ\PKR.m

PKR.m

```
1   function f = PKR(t,ca1)
2 -   V1 = 2.1;            % volumen reaktora  [m3]
3 -   q = 0.2;
4 -   ca0 = 1.85;
5 -   f=(q*(ca0 - ca1))/V1;
6 -   end
7
8
```

Kreiranje funkcije u Matlabu u koju se upisuje diferencijalna jednadžba.

Unošenje konstantnih vrijednosti iz ODJ u funkciju.

Workspace

Name	Value
ca1	*241x1 double*
ca1in	0
t	*241x1 double*
trange	*1x241 double*

Command Window

New to MATLAB? See resources for Getting Started.

```
>> trange=[0:0.5:120];
>> ca1in=0;
>> [t, ca1] = ode45(@PKR,trange,ca1in);
>> plot(t,ca1)
>>
```

Specificiranje područja nezavisne varijable.

Specificiranje inicijalnih vrijednosti zavisnih varijabli.

Primjena *solvera* za rješavanje ODJ.

PKR Ln 8 Col 1