NUMERICKÁ MATEMATIKA

Nalezení obecných výsledků „zkusmým“ řešením s konkrétními čísly. Velký počet opakujících se matematických operací – velký pomocník: počítač.

ITERACE A ALGORITMY

algoritmus – návod postupu, jak daný matematický problém řešit

iterační algoritmus – algoritmus libovolně se opakující v určitých krocích, kdy do dalšího kroku vstupuje výsledek z kroku předcházejícího[1].

iterace – krok v iteračním algoritmu

Příklad: Iterační výpočet odmocniny $\sqrt{N}$ $\quad x^2 = N; \quad N > 0 \quad x = \frac{N}{x}$

Algoritmus výpočtu tak nabude obecného tvaru: $x_{(k+1)} = \frac{N}{x_k}$ kde **k** je číslo kroku

Např. odmocnina z 16, **N** = 16.

Počítáme **x**. Nejprve do pravé strany rovnice dosadíme za **x** odhad (libovolné číslo), **xo**, např. **xo** = 2, a počítáme novou hodnotu **x** na levé straně, $\mathbf{x_1}$. Výsledek dosadíme znovu za **x** do pravé strany a celý proces opakujeme, až se výsledek nemění.

Výpočet $\sqrt{16}$; odhad $x_0 = 2$ $\quad x_{(k+1)} = \frac{N}{x_k}$

x_0	2
x_1	8
x_2	2
x_3	8
x_4	2

Jak je vidět, algoritmus nekonverguje. Musíme algoritmus upravit!

Zkusme k rovnici (algoritmu) přičíst **x**: $x + x = x + \frac{N}{x}$ $\Rightarrow$ $2x = x + \frac{N}{x}$ $\Rightarrow$

$\Rightarrow$ $x = \frac{1}{2}\left(x + \frac{N}{x}\right)$ $\Rightarrow$ $x_{(k+1)} = \frac{1}{2}\left(x_k + \frac{N}{x_k}\right)$

iterace	**x**
0	2
1	5
2	4,1
3	4,00122
4	4,00000

Teď algoritmus konverguje!

Jaký tvar má mít konvergující iterační algoritmus?

Většinou tvar $x_{(k+1)} = x_k + \omega(x_k) f(x_k)$

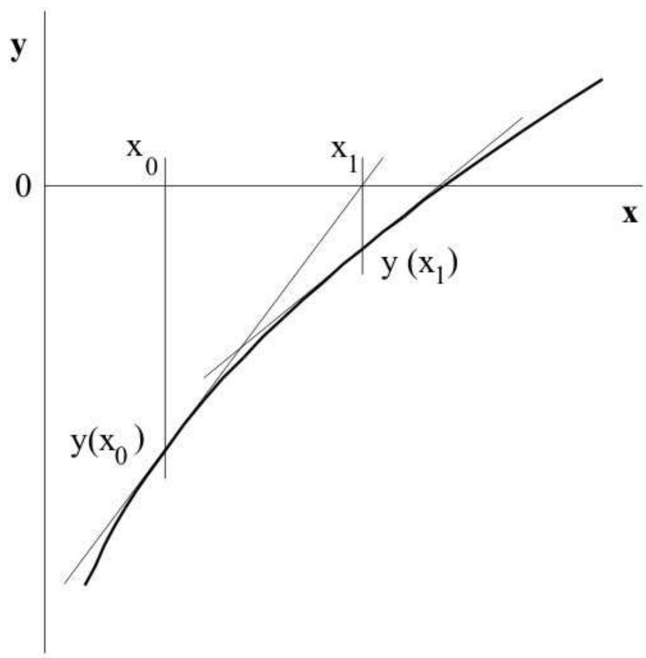
Hledání kořenů nelineární rovnice

Celá řada metod: metoda sečen, metoda regula falsi, metoda půlení intervalu

Nejoblíbenější ***Newtonova metoda***

NEWTONOVA METODA

Mějme funkci **y = f(x)**, odpovídá rovnici **f(x) = 0** (s kořenem **x -** odpovídá průsečíku **f(x)** s osou **x)** :



Učiníme libovolný **odhad kořenu x**, v tomto bodě vedeme směrnici, jejíž průsečík s **osou x** je zlepšeným odhadem **kořenu x**. Dosadíme zlepšený odhad a celou operaci opakujeme (1. iterace).

Tečna grafu funkce v bodě **x0**, **y(x0)** má rovnici

y – y(x0) = y´(x0) (x - x0)

Její průsečík s osou **x** (y = 0)

– y(x0) = y´(x0) (x - x0)

po úpravě

$$x = x_0 - \frac{y(x_0)}{y'(x_0)}$$

Pokud dosadíme hodnotu tohoto **x** do rovnice tečny a najdeme nový průsečík s osou **y**, blížíme se průsečíku funkce **y** s osu **x** (kořenem rovnice f(x)).

OBECNÝ ITERAČNÍ ALGORITMUS NEWTONOVY METODY:

$$\boxed{x_{(k+1)} = x_k - \frac{y(x_k)}{y'(x_k)}}$$

Příklad. Najděte kořeny rovnice **$x^3 - 4x^2 + 5x - 2 = 0$**

derivace f(x): 3x2 - 8x + 5

$$x_{(k+1)} = x_k - \frac{x_k^3 - 4x_k^2 + 5x_k - 2}{3x_k^2 - 8x_k + 5}$$

iterace	x_1	$x_2 = x_3$		iterace	x_1	$x_2 = x_3$
odhad:	5	0		13	2	0,999776
1	3,8	0,4		14	2	0,999888
2	3,0125	0,652632		15	2	0,999944
3	2,507817	0,806483		16	2	0,999972
4	2,204385	0,895986		17	2	0,999986
5	2,051791	0,945653		18	2	0,999993
6	2,004643	0,972144		19	2	0,999997
7	2,000043	0,985886		20	2	0,999998
8	2	0,992894		21	2	0,999999
9	2	0,996435		22	2	1
10	2	0,998214		23	2	1
11	2	0,999106		24	2	1
12	2	0,999553		25	2	1

Hledané kořeny:

$x_1 = 2$, $x_{2,3} = 1$

Příklad: Řešení karbonátového systému Newtonovou metodou

$$\frac{2\,K_s}{K_1K_2K_H}[H^+]^4 + p_{CO_2}[H^+]^3 - \left(1.10^{-14}\,p_{CO_2} + K_1K_H\,p_{CO_2}{}^2\right)[H^+] - K_1K_2K_H\,p_{CO_2}^2 = 0$$

$$2\,[Ca^{2+}]^2 + \left([H^+] - \frac{1.10^{-14}}{[H^+]}\right)[Ca^{2+}] - K_s\left(\frac{[H^+]}{K_2} + 1\right) = 0$$

$$\left(\frac{[H^+]}{K_2} + 1\right)[CO_3^{2-}]^2 + \left(\frac{1.10^{-14}}{[H^+]} - [H^+]\right)[CO_3^{2-}] - 2\,K_s = 0$$

$$\left(\frac{K_2}{[H^+]} + 1\right)[HCO_3^-]^2 - \left([H^+] - \frac{1.10^{-14}}{[H^+]}\right)[HCO_3^-] - \frac{2\,K_s[H^+]}{K_2} = 0$$

p_{CO2} = 1,00E-04

	[H+]	pH	[Ca2+]	[CO32-]	[HCO3-]	[H2CO3*]
odhad:	1,00E-07	7,00	1,00E-03	1,00E-05	2,00E-03	6,08E-06
výpočet:	7,50E-08	7,12	5,88E-04	1,04E-05	1,17E-03	
1. iterace	5,63E-08	7,25	4,44E-04	1,04E-05	8,76E-04	
2. iterace	4,22E-08	7,37	4,21E-04	1,04E-05	8,27E-04	
3. iterace	3,16E-08	7,50	4,20E-04	1,04E-05	8,26E-04	
	↓	↓	↓	↓	↓	
...	2,32E-09	8,63	4,20E-04	1,04E-05	8,26E-04	
n-tá iterace	2,32E-09	8,63	4,20E-04	1,04E-05	8,26E-04	
výsledek:	2,32E-09	8,63	4,20E-04	1,04E-05	8,26E-04	
	[H+]	**pH**	**[Ca2+]**	**[CO32-]**	**[HCO3-]**	

Postupně počítáme pro různé parciální tlaky CO2

Dáváme do tabulky

Z tabelované závislosti např. grafy

p_{CO2} =	3E-04	4E-04	5E-04	6E-04	7E-04	8E-04	9E-04
pH =	8,32	8,24	8,17	8,12	8,07	8,03	8,00
$[Ca^{2+}]$ =	6,02E-04	6,62E-04	7,13E-04	7,57E-04	7,97E-04	8,33E-04	8,66E-04
$[CO_3^{2-}]$ =	7,27E-06	6,61E-06	6,14E-06	5,78E-06	5,49E-06	5,25E-06	5,05E-06
$[HCO_3^-]$ =	1,19E-03	1,32E-03	1,42E-03	1,51E-03	1,59E-03	1,66E-03	1,73E-03
$[H_2CO_3*]$ =	1,82E-05	2,43E-05	3,04E-05	3,65E-05	4,26E-05	4,87E-05	5,47E-05
CT =	1,22E-03	1,35E-03	1,46E-03	1,55E-03	1,64E-03	1,71E-03	1,79E-03

Eulerova iterační metoda řešení diferenciálních rovnic

diferenciální rovnice: $\frac{dy}{dx} = f(x)$

Diskretizace

diferenciály nahradíme diferencemi $\frac{\Delta y}{\Delta x} = f(x)$ $\frac{y_{(k+1)} - y_k}{x_{k+1} - x_k} = f(x_k)$

$\frac{y_{(k+1)} - y_k}{h} = f(x)$ **h** je integrační krok

Iterační algotimus: $y_{k+1} = y_k + h\, f(x_k)$

Řešení kinetických rovnic

Eulerova metoda

$$2A \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} B$$

$k_1 = 300$
$k_2 = 0{,}15$

$$+\frac{dA}{dt} = 2k_2B - 2k_1A^2 \qquad A_{n+1} = A_n + 0{,}1(2k_2B_n - 2k_1A_n^2)$$

$$+\frac{dB}{dt} = k_1A^2 - k_2B \qquad B_{n+1} = B_n + 0{,}1(k_1A_n^2 - k_2B_n)$$

t	A	B	S
0	1,00E-03	0	1,00E-03
0,1	9,40E-04	3,00E-05	1,00E-03
0,2	8,88E-04	5,61E-05	1,00E-03
0,3	8,42E-04	7,89E-05	1,00E-03
0,4	8,02E-04	9,90E-05	1,00E-03
...	...	...	...
...	...	...	...
9,7	3,91E-04	3,04E-04	1,00E-03
9,8	3,91E-04	3,04E-04	1,00E-03
9,9	3,91E-04	3,04E-04	1,00E-03
10	3,91E-04	3,04E-04	1,00E-03

Runge - Kutta metoda 4. řádu

$$2A \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} B$$

$k_1 = 300$
$k_2 = 0{,}15$

$$+\frac{dA}{dt} = 2k_2B - 2k_1A^2$$

$$+\frac{dB}{dt} = k_1A^2 - k_2B$$

$$A^{n+1} = A^n + \frac{1}{6}*(p_1^{n+1} + 2p_2^{n+1} + 2p_3^{n+1} + p_4^{n+1})$$

$$B^{n+1} = B^n + \frac{1}{6}*(q_1^{n+1} + 2q_2^{n+1} + 2q_3^{n+1} + q_4^{n+1})$$

$$p_1^{n+1} = h\,f(t^n, \quad A^n, \quad B^n)$$
$$p_2^{n+1} = h\,f\left(t^n + \frac{h}{2}, A^n + \frac{p_1}{2}, B^n + \frac{q_1}{2}\right)$$
$$p_3^{n+1} = h\,f\left(t^n + \frac{h}{2}, \quad A^n + \frac{p_2}{2}, \quad B^n + \frac{q_2}{2}\right)$$
$$p_4^{n+1} = h\,f\left(t^n + \frac{h}{2}, \quad A^n + \frac{p_3}{2}, \quad B^n + \frac{q_3}{2}\right)$$

$$q_1^{n+1} = h\,f(t^n, \quad A^n, \quad B^n)$$
$$q_2^{n+1} = h\,f\left(t^n + \frac{h}{2}, A^n + \frac{p_1}{2}, B^n + \frac{q_1}{2}\right)$$
$$q_3^{n+1} = h\,f\left(t^n + \frac{h}{2}, \quad A^n + \frac{p_2}{2}, \quad B^n + \frac{q_2}{2}\right)$$
$$q_4^{n+1} = h\,f\left(t^n + \frac{h}{2}, \quad A^n + \frac{p_3}{2}, \quad B^n + \frac{q_3}{2}\right)$$

t	A	p1	p2	p3	p4	B	q1	q2	q3	q4	Σ
0	1,00E-3					0,00E+0					1,00E-3
0,1	9,44E-4	-6,00E-5	-5,60E-5	-5,63E-5	-5,26E-5	2,81E-5	3,00E-5	2,80E-5	2,81E-5	2,63E-5	1,00E-3
0,2	8,94E-4	-5,26E-5	-4,93E-5	-4,95E-5	-4,64E-5	5,28E-5	2,63E-5	2,46E-5	2,47E-5	2,32E-5	1,00E-3
0,3	8,51E-4	-4,64E-5	-4,36E-5	-4,38E-5	-4,12E-5	7,47E-5	2,32E-5	2,18E-5	2,19E-5	2,06E-5	1,00E-3
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
9,8	3,91E-4	-5,89E-8	-5,71E-8	-5,71E-8	-5,53E-0	3,04E-4	2,94E-8	2,85E-8	2,86E-8	2,77E-8	1,00E-3
9,9	3,91E-4	-5,53E-8	-5,36E-8	-5,37E-8	-5,20E-0	3,04E-4	2,77E-8	2,68E-8	2,68E-8	2,60E-8	1,00E-3
10	3,91E-4	-5,20E-8	-5,04E-8	-5,05E-8	-4,89E-0	3,04E-4	2,60E-8	2,52E-8	2,52E-8	2,44E-8	1,00E-3

Grafy

Porovnání Eulerovy a Runge-Kutta metody