# 화공전산응용
# 수치미분, 적분, 상미분방정식

이번 수업에는 바쁘게 미분, 적분, 미분방정식을 살펴보기로 한다. 화학공학에서 가장 필요한 것은 미분방정식과 선형대수학이다. 거의 모든 화학반응식은 미분방정식으로 표현되며 이를 이해하는 일이 중요하다. 미분방정식을 응용한 화학공학 문제 풀이를 조금 연습해보기 위해서 여기서는 미분, 적분, 미분방정식을 가볍게 건드리고 지나가도록 한다.  다음 단계에서 제대로 미분방정식 풀이를 공부하도록 기약하며 …

## 1. 수치미분

미분(differentiation)

$$\frac{dy}{dx} = \lim_{dx \to 0} \frac{f(x+dx) - f(x)}{dx},$$

$dx = h$ 가 무한소가 되면 전방, 중앙, 후방 미분값은 모두 같다(그 지점에서 연속, 미분가능하면)

차분(differences)

전방차분, $\frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}$

후방차분, $\frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x) - f(x-\Delta x)}{\Delta x}$

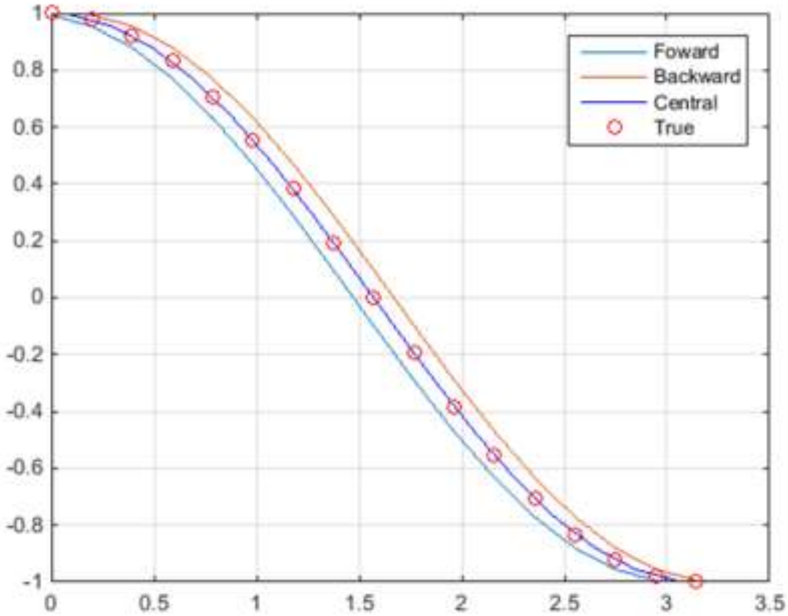
중앙차분, $\frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x+\Delta x) - f(x-\Delta x)}{2\Delta x}$

오차는 중앙차분이 가장 작고($E(h^4)$) 전방, 후방차분은 매우 크다($E(h^2)$). 이는 테일러 급수에서 쉽게 추정될 수 있다.

여기서 우리는 간단히 diff() 함수를 써서 y=sin(x) 의 차분(수치미분)을 구해 본다.

```
% numerical differentiation
clc;clear;close all
x=0:pi/16:pi;
y=@(x)sin(x);
dyf=diff(y(x))./diff(x);
plot(x(1:end-1), dyf), grid on, title('Foward diffence')
figure
plot(x(2:end), dyf), grid on, title('Backward diffence')
figure
xm=(x(1:end-1)+x(2:end))/2;
plot(xm, dyf), grid on, title('Central diffence')
figure
plot(x(1:end-1),dyf,x(2:end),dyf,xm,dyf,'b',x,cos(x),'or'), grid on ...
```

```
,legend('Foward','Backward','Central','True')
```




풀이와 결과를 간단히 보면

1) 중앙차분이 정확하다(참 값과 비교해 보자)

2) 중앙차분 값을 구하려면 ,x 값의 가운데 값을 구해 이를 차분값의 기준 x 값으로 해야 한다.

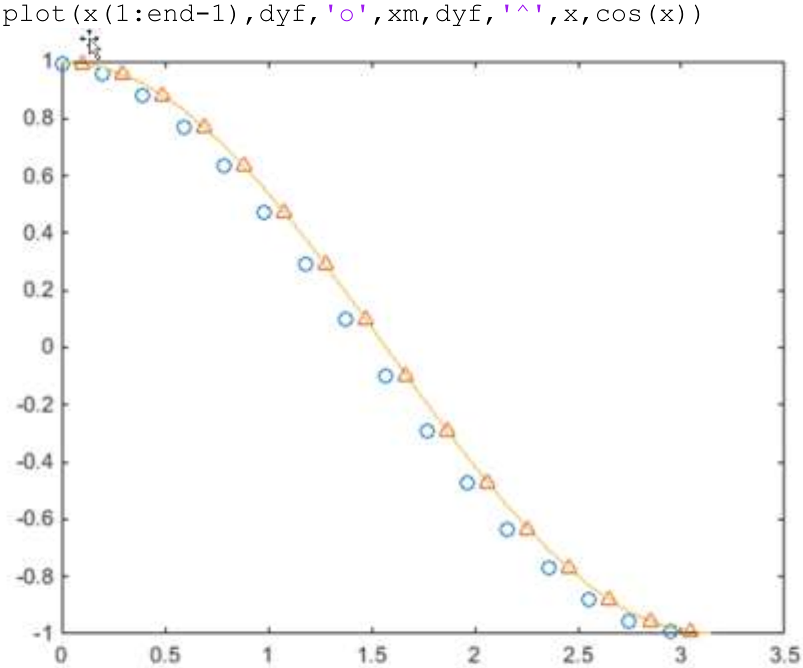
3) x 중앙값은 (x(1:end-1)+x(2:end))/2 또는 x(1:end-1)+diff(x)/2 로 하면 됩니다.

간격 h 가 일정하다면 x(1:end-1)+h/2 해도 됩니다.

4) dy 값은 모두 같으나 이 차분값(dy/dx) 또는 기울기, 변화율의 기준 x 값을 변경시켜 전방, 후방, 중앙차분 값을 구했다.

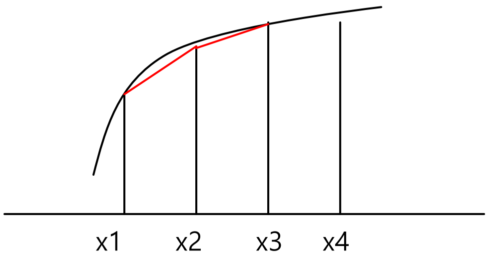
다음과 같이 다시 그리면 더 잘 알 수 있다.

```
plot(x(1:end-1),dyf,'o',xm,dyf,'^',x,cos(x))
```



## 2. 수치적분

수치 정적분은 함수의 구간 내의 면적(마이너스 부호의 면적도 있지만)을 구하는 것과 같다. 면적 근사치(정적분 근사치)을 구하는 가장 기본적이고 쉬운 개념은 사다리꼴 공식이다. 이는 미소구간을 하한값과 상한값을 잇는 직선을 그어 사다리꼴로 보아 미소면적을 구하고 이를 모두 합하여 전체 면적(정적분값)을 구하는 방법이다.




### (1) 사다리꼴(trapezoid) 방식

사다리꼴 방법은 직접 프로그래밍하여 연습하는 것이 기초여 기본이나 우린 trapz() 함수를 이용하여 기본적인 개념을 살펴본다. tarpz(z, y)는 x 벡터와 y 벡터 값을 넣어 각각의 미소 면적을 반환하는 함수이다. 따라서 전체 면적(정적분 값)은 이를 모두 다 합해야 한다.

trapz() 함수를 쓰면 부등간격이나 함수가 아닌 숫자 자료에서도 정적분 값을 구할 수 있다(반면 quad() 함수는 함수식이 있어야 한다)

(풀이)

```
%% Finitive Integration
clc;clear
x=0:pi/16:pi; x2=0:pi/32:pi;
y=@(x)sin(x);
Itrap=sum(trapz(x,y(x)))
Itrap2=sum(trapz(x2,y(x2)))
Isimp=quad(y,0,pi)
Itrue=-cos(pi)+cos(0)
```

(결과)

Itrap =

1.9936

Itrap2 =

1.9984

Isimp =

2.0000

Itrue =

    2

(설명)

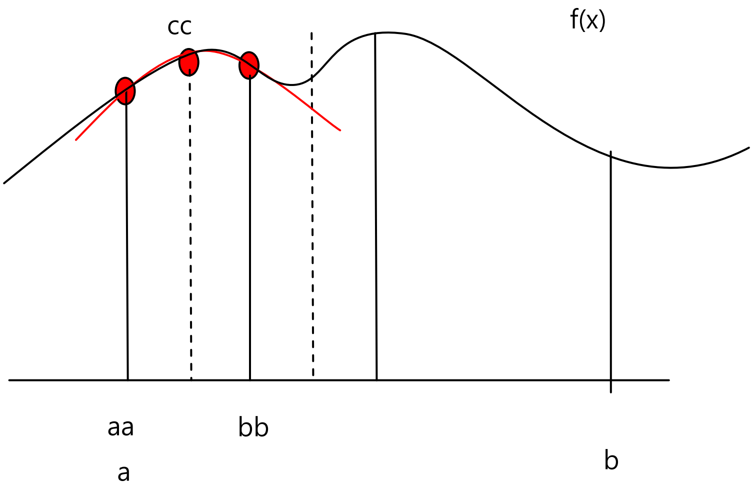
사다리꼴 방식에서 간격을 반으로 줄이면 오차는 0.5^2 으로 줄어든다.

quad() 함수는 Simpson 1/3 방법으로 면적(정적분값)을 구하는 함수로 구적법(2차함수로 가정하여 정적분 값을 구하는)을 사용하며 간격을 적응식(adaptative)으로 변화가 큰 구간을 간격을 좁게 한다.

결과는 심프슨 방법은 거의 참 값과 같으나 사다리꼴 방식은 오차가 크다.

## (2) Simpson 방법

미소구간 면적은 3점을 지나는 2차함수의 면적을 구하면 사다리꼴 보다 훨씬 더 참값에 가깝다.




쉽게 매틀랩으로 심프슨 1/3 방법을 이용한 함수를 만들 수 있지만 우리는 참고 quad() 함수로 대신한다.

```
q = quad(fun,a,b)
q = quad(fun,a,b,tol)
q = quad(fun,a,b,tol,trace)
[q,fcnt] = quad(...)
```

a에서 b 구간까지 정적분한다(면적을 구한다). 기본설정 허용오차는 $10^{-6}$ 이며 이를 다르게 설정할 수 있다(tol 설정). fcnt 는 함수 반복 횟수.

(참고, 간단한 함수 만들기)

사다리꼴 공식

```
function It=trap(f,a,b,n)
h=(b-a)/n;
x=a:h:b;
aa=a:h:b-h; bb=a+h:h:b;
It=sum(f(aa)+f(bb))*h/2;
end
```

Simpson 공식

```
function Is=simp(f,a,b,n)
h=(b-a)/n;
aa=a:h:b-h; bb=a+h:h:b; cc=a+h/2:h:b-h/2;
Is=sum(f(aa)+4*f(cc)+f(bb))*h/6;
end
```

## 5. 상미분방정식

미분방정식은 도함수(미분식)이 들어간 방정식으로 2계 상미분방정식은

$f\left(\frac{dy}{dt}, t, y\right) = 0,$ 으로 나타나며 이를

$\frac{dy}{dt} = g(t, y),$ 형태로 바꾸어 수치해법으로 푼다 $\big($원 함수를 구한다$\big)$.

2계 상미분방정식은 연립방정식으로 풀어야 하나 우린 지나치기로 한다.

$f\left(\frac{d^2y}{dt^2}, \frac{dy}{dt}, t, y\right) = 0,$ 다음과 같이 2 개 식으로 만들어 푼다.

$(1)\ \frac{dz}{dt} = g(z, t, y)$

$(2)\ \frac{dy}{dt} = z$

상미분방정식 풀이 방법으로 가장 기초, 기본이 되는 오일러법과 많이 사용되는 Runge-Kutta 4차 방법을 연습해보고 지나가기로 하자. 오일러 법은 함수를 만들어 써보고 Runge-Kutta 법은 발전된 함수 ode23()으로 연습해 본다.

## (1) Euler(오일러) 법

$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + O(h^2)$

가장 단순하여 미방의 수치해석적 풀이의 설명으로 꼭 필요하며 또한 다른 미방 풀이에도 첫 시작은 오일러 법에서 출발한다. 미방 수치방법론 설명에는 기울기(도함수 값) 방법과 면적(적분) 방법이 있는데 기울기 법으로는 전의 기울기(변화 속도, 방향)로 다음(미래) 값을 추정하는 것이고 도함수 평면에서 면적으로는 계단식 방법이다(가장 무식한 방법).

(함수)

```
function [t,y]=eulode(dydt, tspan, y0, h)
ti=tspan(1); tf=tspan(2);
t=[ti:h:tf]'; n=length(t); y=y0*ones(n,1);
for k=1:n-1
   y(k+1)=y(k)+h*dydt(t(k),y(k));
end
if t(end)~=tf
   t=[t; tf]; y(n+1)=y(n)+(tf-t(n))*dydt(t(n),y(n));
end
end
```

(풀이)

```
clc;clear
dydt=@(t,y)4*exp(0.8*t)-0.5*y;
[t y]=eulode(dydt,[0,9],2,2)
fprintf('%d %7.2f \n',[t,y]')
```

(결과)

0 2.00

2 8.00

4 39.62

6 196.26

8 972.08

9 2893.42

## (2) Runge-Kutta 4차

이 방법은 으로 면적을 구하는 Simpson 1/3 방법과 비슷하다. 단 가운데 값이 2 개로 나뉘어져 (1 + 2 + 2 + 1)/6으로 미분값(기울기, 변화율)을 구한다. 원함수 평면에서는 기울기 평균으로 이야기 할 수 있고 도함수 평면에서는 근사 면적을 구하는 것으로 설명된다.

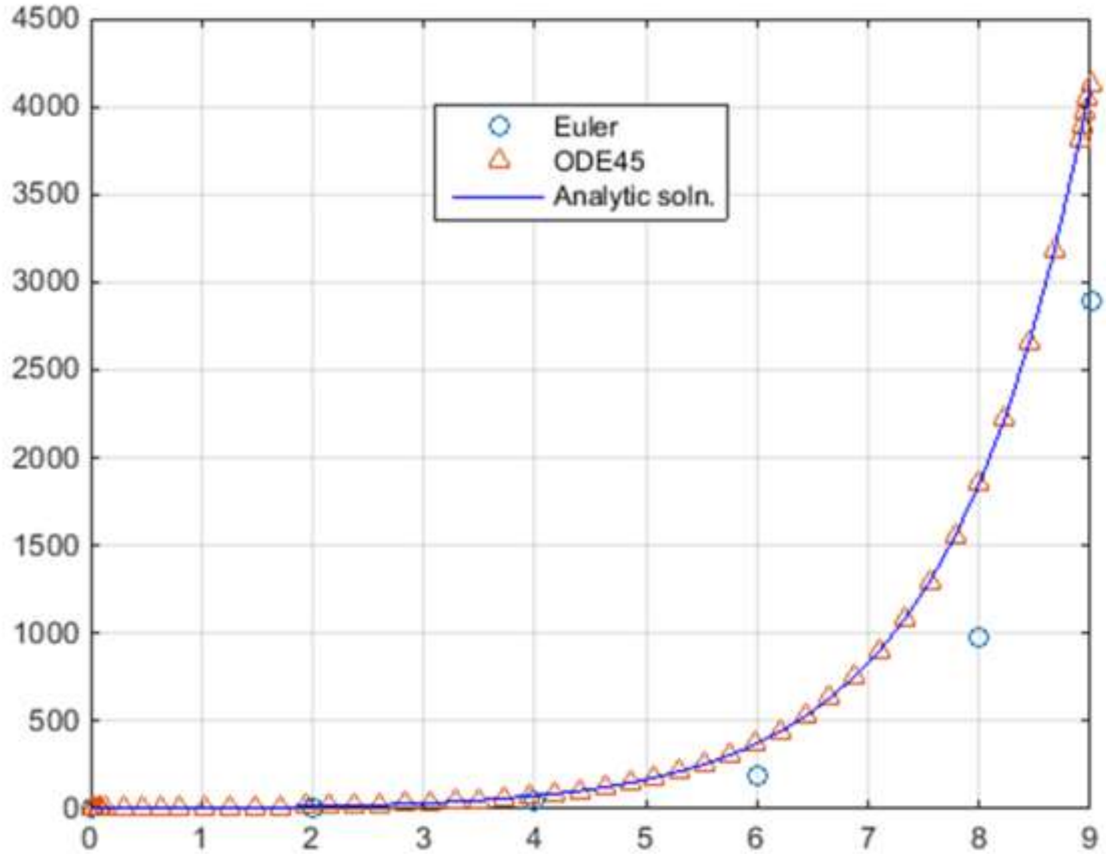
우리는 ode45() 함수를 사용하여 미분방정식을 풀어 보도록 한다. ode45()는 Runge-Kutta 4차, 5차 방법을 이용하며 구간 크기는 적응식(adaptative)로 허용오차 한계에 맞게 변화율을 고려하여

정해진다.
출력 결과값이 너무 많으므로 출력을 하지 말고 그래프로 보여주는데 참 값을 같이 넣도록 한다.

(풀이)

```
clc;clear;close all
dydt=@(t,y)4*exp(0.8*t)-0.5*y;
[t y]=eulode(dydt,[0,9],2,2);
fprintf('%d %7.2f \n',[t,y]')
[t2 y2]=ode45(dydt,[0,9],2);
yr=@(t)40/13*exp(0.8*t)-14/13*exp(-0.5*t);
plot(t,y,'o',t2,y2,'^',t2,yr(t2),'b'), grid on
```

(결과)




(1) Euler 법은 오차가 크다. 간격을 줄이면 h^2에 비례하여 줄어든다.
(2) ODE45() 로 풀어본 해는 그림으로는 해석학적 해와 거의 같다. x=9에서 오차를 계산하면

```
Error=abs(yr(t2(end))-y2(end))./yr(t2(end))
```

Error =
    6.0468e-06

(참고, 해석학적 풀이)

Analytical solution

Linear ODE

$$\frac{dy}{dt} + 0.5y = 4e^{0.8t}$$

$$\mu = \exp\left(\int 0.5\ t\right) = \exp(0.5t)$$

$$\mu y = 4\int e^{0.8t}\mu\ dt = 4\int e^{1.3t}\ dt$$

$$= \frac{4}{1.3}e^{1.3t} + C$$

$$y = \frac{4}{1.3}e^{0.8t} + Ce^{-0.5t}$$

$$2 = \frac{4}{1.3} + C, \qquad C = 2 - \frac{40}{13} = -\frac{14}{13}$$

$$= -1.0769$$

$$y = \frac{40}{13}e^{0.8t} - \frac{14}{13}e^{-0.5t}$$

2015-05-28, 곽노태