

## 6. tétel

Kaszás Bálint

2019. június 18.

## Kivonat

Differenciálegyenletek numerikus vizsgálata, Euler-módszer, Runge-Kutta módszer, stabilitás, parciális differenciálegyenletek. Dinamikai rendszerek, kaotikus viselkedés (Complex and Adaptive Dynamical Systems alapján).

# 1. Differenciálegyenletek numerikus vizsgálata

A természettudományos, műszaki alkalmazások szempontjából lényeges, folytonos modelleket általában differenciálegyenletek formájában fogalmazzuk meg. Ez azt jelenti, hogy a probléma megoldása során egy olyan függvényt keresünk, amelynek deriváltjai között adott összefüggés érvényes. Aszerint, hogy a keresett függvény milyen változóktól függ, és az előírt összefüggésben milyen deriváltak szerepelnek, elkülönítünk *közönséges* és *parciális* differenciálegyenleteket. Először a közönséges differenciálegyenletek (vagy ODE, ordinary differential equation) felhasználására és numerikus megoldására koncentrálunk. A parciális differenciálegyenletek (PDE, partial differential equation) tárgyalása lényegesen bonyolultabb, ezért ott csak a fő eredményeket közöljük.

Tekintsük tehát a következő közönséges differenciálegyenletet [1],

$$F\left(t, x, \frac{dx}{dt}, \frac{d^2x}{dt^2}, \dots, \frac{d^{n-1}x}{dt^{n-1}}\right) = \frac{d^nx}{dt^n}, \quad (1)$$

amely úgy értendő, hogy keressük azt az  $x(t) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  függvényt, amelynek  $t$  változó szerinti deriváltjai között  $F$  függvény teremt kapcsolatot. Ekkor (1) egy  $n$ . rendű ODE-t definiál. A keresett  $x$  függvény változóját  $t$ -vel jelöltük, utalva ezzel arra, hogy az alkalmazások szempontjából érdemes erre egy *időben változó mennyiségként* gondolni. Azt az  $x(t)$  függvényt, amely a fenti összefüggést kielégíti, a differenciálegyenlet megoldásának hívjuk. A legáltalánosabb ilyen függvény tartalmaz  $n$  darab integrálási állandót, ez az egyenlet *általános megoldása*. Ebből, az állandók megfelelő megválasztásával, amelyekkel a megoldás illeszkedik előre megadott *kezdeti vagy peremfeltételekhez*, kapjuk az egyenlet partikuláris megoldásait. Egyelőre az adott kezdeti feltételekhez illeszkedő megoldás megkeresésére koncentrálunk (kezdeti érték feladat), a peremérték-feladatokat később tárgyaljuk röviden.

A fenti egyenlet egyszerűen leképezhető elsőrendű egyenletek rendszerére, az  $x_i = \frac{d^i x}{dt^i}$  új változó bevezetésével, az  $i$ . derivált helyett. Ezért a továbbiakban kizárólag elsőrendű differenciálegyenletek rendszerével foglalkozunk, azaz hogyha a különböző változók vektora  $\mathbf{x}(t) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ , akkor

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t)), \quad (2)$$

kiegészítve azzal a kezdeti feltétellel, hogy  $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$  adott vektor. Ezen kezdeti érték feladat megoldására nincs általános módszer, csak nagyon speciális alakú  $\mathbf{f}(t, \mathbf{x})$  függvények mellett ismert a megoldás explicit alakja (például ha  $\mathbf{f}$  lineáris  $\mathbf{x}$ -ben). A legtöbbször azonban muszáj numerikus módszerekre hagyatkozni. Ezek azt a tulajdonságot használják ki, hogy az ODE-k széles osztálya <sup>1</sup>, adott kezdeti feltétel mellett egyértelmű megoldással rendelkezik. Ez azt teszi lehetővé, hogy az adott kezdeti feltételből indulva, kis időlépéseket téve göngyölítsük fel a megoldást.

---

<sup>1</sup>A Picard–Lindelöf tétel[1] globális megoldhatóságot garantál: Amennyiben  $\mathbf{f}$  Lipschitz folytonos  $\mathbf{x}$ -ben, és folytonos  $t$ -ben, akkor van olyan időintervallum, amelyen tetszőleges  $\mathbf{x}_0$  kezdeti értékhez tartozó megoldás létezik és egyedi. (Lipschitz-folytonosság: Bármely  $t$ -re, és  $\forall \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^n$ ,  $\exists K > 0$   $\|\mathbf{f}(t, \mathbf{x}_1) - \mathbf{f}(t, \mathbf{x}_2)\| \leq K\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|$ )

## 1.1. Explicit és implicit módszerek

A numerikus megoldás előállításához diszkrét időközönként,  $t_n = t_0 + nh$  időpontokban keressük a megoldás  $\mathbf{x}(t_n)$  pontjait, ahol  $t_0$  a kezdő időpont és  $h$  a lépésköz. A feladat az, hogy  $\mathbf{x}(t_{n+1})$  pontot kifejezzük a korábbi pillanatbeli  $\mathbf{x}(t_n)$  értékkel, feltéve hogy (2) jobb oldalát,  $\mathbf{f}$ -et is ismerjük. Ez a megközelítés az úgynevezett *explicit módszer*, mert egy explicit kifejezést használunk, amely  $\mathbf{x}(t_{n+1})$ -et megadja. Ennél általánosabbak (és robosztusabbak) az *implicit módszerek*, amelyek csak egy  $G(\mathbf{x}(t_n), \mathbf{x}(t_{n+1})) = 0$  alakú implicit összefüggést követelnek meg. A tapasztalat szerint azonban a problémák többségében elegendő explicit módszereket használni [4, 3].

Minden, a továbbiakban tárgyalt explicit módszert úgy kapunk, hogy  $\mathbf{x}(t_{n+1}) = \mathbf{x}(t_n + h)$ -t Taylor-sorba fejtjük, azaz

$$\mathbf{x}(t_{n+1}) = \mathbf{x}(t_n) + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i!} \frac{d^i \mathbf{x}(t_n)}{dt^i} h^i. \quad (3)$$

Ezt követően a megoldás deriváltjait a differenciálegyenlet, (2) alapján fejezzük ki.

## 1.2. Euler módszer

A legegyszerűbb közelítést akkor kapjuk, hogyha a (3) Taylor-sorfejtést mindössze első rendig tekintjük. Ekkor, felhasználva a differenciálegyenletet,

$$\mathbf{x}(t_{n+1}) = \mathbf{x}(t_n) + h\mathbf{f}(t_n, \mathbf{x}(t_n)), \quad (4)$$

adódik. Ismert az is, hogy az elkövetett hiba  $h^2$ -el arányos. Az Euler-módszer hátránya, hogy ha elég pontos közelítést szeretnénk kapni, nagyon kis  $h$  lépésközt kell választanunk. Ezzel azonban a megtett lépések számát növeljük, aminek következtében az egy lépésben elkövetett numerikus, kerekítési hibák gyorsan felnövekedhetnek [4].

## 1.3. Runge-Kutta módszer

A Runge-Kutta módszerekre a Taylor-sorfejtés magasabb rendű tagjai vezetnek. Másodrendnél megállva,  $\frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2}$ -et a differenciálegyenlettel kifejezve kapjuk a következő, *másodrendű Runge-Kutta módszert*.

$$\mathbf{x}(t_{n+1}) = \mathbf{x}(t_n) + \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2), \quad (5)$$

$$\mathbf{k}_1 = h\mathbf{f}(t_n, \mathbf{x}(t_n)), \quad \mathbf{k}_2 = h\mathbf{f}(t_n + h, \mathbf{x}(t_n) + \mathbf{k}_1). \quad (6)$$

Itt az egy lépésben elkövetett hiba már csak  $h^3$  rendű. A folyamat elméletileg tetszőleges rendig folytatható, de a gyakorlatban a *negyedrendű* Runge-Kutta módszer már jó kompromisszumnak. Ezt a következő összefüggések definiálják

$$\mathbf{x}(t_{n+1}) = \mathbf{x}(t_n) + \frac{1}{6}(\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4), \quad (7)$$

$$\mathbf{k}_1 = h\mathbf{f}(t_n, \mathbf{x}(t_n)), \quad \mathbf{k}_2 = h\mathbf{f}\left(t_n + h/2, \frac{\mathbf{x}(t_n) + \mathbf{k}_1}{2}\right) \quad (8)$$

$$\mathbf{k}_3 = h\mathbf{f}(t_n/2, \mathbf{x}(t_n) + \mathbf{k}_2/2), \quad \mathbf{k}_4 = h\mathbf{f}(t_n + h, \mathbf{x}(t_n) + \mathbf{k}_3). \quad (9)$$

Ezzel a negyedrendű módszerrel a lépésenkénti hiba  $h^5$  nagyságrendű. Ugyan a számítási igény is nagyobb (lépésenként 4-szer kell kiértékelni  $\mathbf{f}$ -et), elegendő kisebb  $h$  lépésközt választani a kellő precizitás eléréséhez.

További általánosítást jelentenek az adaptív lépésközös Runge-Kutta algoritmusok. Legismertebb az új. n. Runge-Kutta-Fehlberg módszer. Ehhez, egyetlen lépést a negyed- és az ötödrendű Runge-Kutta módszerrel egyszerre számolva teszünk meg. A magasabb rendű módszer segítségével megbecsülhető a lépés során elkövetett hiba. Amennyiben ez a numerikus integrálás során egy előre definiált korlátot túllép, a *lépésköz csökkentését* követően megismételjük a hibás lépést.

## 1.4. A módszerek stabilitása

Fontos kérdés, hogy a választott numerikus módszer milyen feltételek mellett, vagy milyen lépésközök esetén marad numerikusan stabil. Azokat a rendszereket, amelyek tipikusan instabillá válnak, általában *stiff*-nek hívjuk. Pontos definíció közlése nélkül azon problémák stiffek, amelyek megoldásai gyorsan változnak egy tartományon.

A numerikus ODE megoldó algoritmusok stabilitását a következő prototipikus egyenleten keresztül szokás vizsgálni

$$\frac{dy}{dx} = ky. \quad (10)$$

Az egyenlet megoldásai nullához tartanak, amennyiben  $k < 0$ . A numerikus módszer stabil, hogyha a közelítő  $y_n$ -ek sorozata is nullához tart. Alkalmazzuk (10)-re az Euler-módszert. Indukcióval belátható, hogy a megoldás numerikus közelítése

$$y_n = y_0(1 + hk)^n,$$

ahol  $y_0 = y(0)$ , a kezdőfeltétel. Látható, hogy az  $y_n$  sorozat akkor tart nullához, ha teljesül  $|1 + hk| < 1$ , ami a stabilitás feltételét adja. Azt is mondhatjuk tehát, hogy ez az egyenlet stiff, mert a stabilitáshoz rendkívül kicsi lépésközzel kellene közelítenünk a megoldást.

Az ilyen, stiff egyenletek kezelésére alkalmasak a fent már említett *implicit módszerek*. Itt csak a legegyszerűbb esetet tárgyaljuk, az implicit Euler módszert, amit a következő összefüggés definiál

$$\mathbf{x}(t_{n+1}) = \mathbf{x}(t_n) + h\mathbf{f}(t_{n+1}, \mathbf{x}(t_{n+1})). \quad (11)$$

Mivel azonban a keresett  $\mathbf{x}(t_{n+1})$  az egyenlet mindkét oldalán szerepel, itt minden lépésben egy algebrai egyenletet kell megoldani (például Newton-Raphson módszerrel [4]). Belátható, hogy az implicit Euler-módszert alkalmazva (10) egyenletre, a stabilitási feltétel  $1/|1 + hk| < 0$ , ami viszont tetszőleges  $h > 0$ -ra teljesül (feltéve hogy  $k < 0$ ).

## 1.5. Parciális differenciálegyenletek

A parciális differenciálegyenletek (a közönségesekkel ellentétben) a keresett függvény egynél több változója szerinti parciális deriváltjait is tartalmazhatják. Legtöbbször a keresett függvény egy fizikai skalármező  $U(x, y, z, t)$  amely egyszerre függ a helytől és az időtől is. A dinamikát leíró egyenleten túl a problémát a peremfeltétel megadása egészíti ki. A PDE-k esetén nincsen olyan egyszerűen megfogalmazható feltétel, amely garantálná a megoldás létezését és jól definiáltságát, sokszor fizikai intuícióna kell hagyatkozni (például, hogy elég peremfeltételt adtunk-e meg).

Éppen ezért a numerikus megoldásra, nincsen olyan egyszerű, explicit módszer mint ami az ODE-knél rendelkezésre állt. A legegyszerűbb megoldási módszer az, hogy az egyenletben szereplő deriváltakat véges különbségekkel helyettesítjük, ez az úgynevezett *véges differenciák módszere, vagy FDM*. Az általános leírás helyett célszerű egy egyszerű példán bemutatni a megoldás menetét. Tekintsük tehát a 2 dimenziós Laplace egyenletet,

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} = 0. \quad (12)$$

Ahol a keresett függvény  $U(x, y)$ . Sorba fejtve,  $U(x + \Delta x, y)$  és  $U(x - \Delta x, y)$  közelítéséből adódik,

$$U(x + \Delta x, y) = U(x, y) + \frac{\partial U}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \Delta x^2 + \dots \quad (13)$$

$$U(x - \Delta x, y) = U(x, y) - \frac{\partial U}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \Delta x^2 - \dots \quad (14)$$

, mely két egyenletet kivonva egymásból véges közelítését kapjuk a második deriváltak.

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = \frac{U(x + \Delta x, y) + U(x - \Delta x, y) - 2U(x, y)}{\Delta x^2}. \quad (15)$$

Elismételve az  $y$  irányban is, és feltételezve hogy  $\Delta x = \Delta y = \Delta$ , kapjuk a Laplace egyenlet véges differencia-közelítését.

$$U(x + \Delta, y) + U(x - \Delta, y) + U(x, y + \Delta) + U(x, y - \Delta) - 4U(x, y) = 0. \quad (16)$$

Ennek ismeretében, az egyenletet  $U(x, y)$ -ra rendezve, minden pontban kiszámolhatjuk  $U$  értékét, a körülötte  $\Delta$  távol lévő pontokban mért értékek segítségével. Ezt a gyakorlatban iteratívan végezzük, azaz egy kezdeti  $U(x, y)$  függvényből indulva, lépésenként minden pontban *frissítjük*  $U(x, y)$  aktuális értékét, a (16) egyenlet szerint.

## 2. Dinamikai rendszerek

A dinamikai rendszerek elmélete, a fent tárgyalt differenciálegyenletek alkalmazása valós, időben változó problémákra [3, 2]. Egy dinamikai rendszert a

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t)) \quad (17)$$

egyenlet definiál. A rendszer változói  $(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = \mathbf{x}$  által kifeszített teret hívjuk a rendszer *fázisterének*. Az ebben leírt  $\mathbf{x}(t)$  görbe, amely megoldása (17)-nek, pedig a rendszer egyik *trajektóriája*. A továbbiakban ezen trajektóriák közül, valamilyen kitüntetett viselkedést mutatókra fogunk koncentrálni. Az egyszerűség kedvéért *autonóm* rendszereket fogunk tekinteni, amelyben a dinamika nem függ explicite az időtől, így  $\mathbf{f}$   $t$  függését el is hagyjuk.

A legfontosabb speciális trajektóriák a *fixpontok*. Ezek a dinamika invariáns pontjai a fázistérben, azaz  $\mathbf{f}(\mathbf{x}(\mathbf{t})) = 0$ . Egy fixpontot *stabilnak* mondunk, ha a környező trajektóriákat vonzza, és *instabilnak*, ha a azokat taszítja.

## 2.1. Kaotikus viselkedés

### Hivatkozások

- [1] I. Arnold, Vladimir. *Ordinary Differential Equations* . Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1992.
- [2] Claudius Gros. *Complex and Adaptive Dynamical Systems*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2011.
- [3] Márton Gruiz and Tamás Tél. *Chaotic Dynamics*. Cambridge University Press, 2006.
- [4] Rubin H. Landau, Jose Paez, and Cristian C. Bordeianu. *A Survey of Computational Physics: Introductory Computational Science*. Princeton University Press, Princeton, NJ, USA, har/cdr edition, 2008.