

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 parciális differenciálegyenleteknél.

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 ¹, adott kezdeti feltétel mellett egyértelmű megoldással rendelkezik. Ez azt teszi lehetővé, hogy az adott kezdeti feltételből indulva, kis időlépéseket téve göngyölítsük fel a megoldást.

¹A Picard–Lindelöf tétel[1] globális megoldhatóságot garantál: Amennyiben \mathbf{f} Lipschitz folytonos \mathbf{x} szerint, és folytonos t szerint, 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 egy-nél 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 deriválnak.

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

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 Δ 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.

Az itt vázolt iterációs módszert valamennyivel gyorsítja, ha a Successive Overrelaxationt (SOR) [4] alkalmazzuk. Az adott iterációs lépésben, az (x, y) pontban legyen $r(x, y) = U^{n+1}(x, y) - U^n(x, y)$ az a szám, amivel frissíteni kell $U(x, y)$ értékét (n index számozza az iterációk számát). A SOR algoritmus szerint ilyenkor az $U^{n+1}(x, y) = U^n(x, y) + \omega r(x, y)$ iterációt alkalmazhatjuk, amely gyakran stabil $1 < \omega < 2$ -re, és nagyban gyorsítja a konvergenciát.

2. Dinamikai rendszerek

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

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

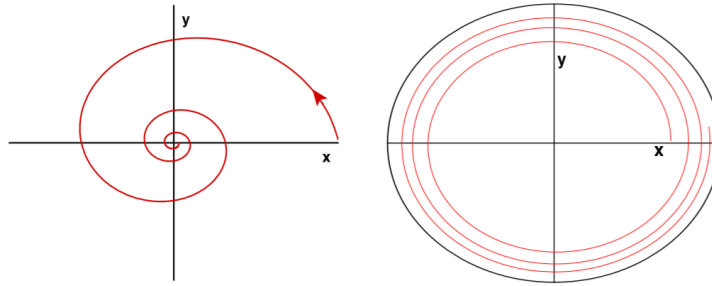
egyenlet definiál. A rendszer változói $(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = \mathbf{x}$ által kifeszített teret hívjuk a rendszer *fázisterének*. Az ebben leírt $\mathbf{x}(t)$ görbe, amely megoldása (17)-nek, pedig a rendszer egyik *trajektóriája*. A továbbiakban ezen trajektóriák közül, valamilyen kitüntetett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

A legfontosabb speciális trajektóriák a *fixpontok*. Ezek a dinamika invariáns pontjai a fázistérben, azaz $\mathbf{f}(\mathbf{x}(t)) = 0$. Egy fixpontot *stabilnak* mondunk, ha a környező trajektóriákat vonzza, és *instabilnak*, ha a azokat taszítja. Példának tekintsük az alábbi, két dimenziós dinamikai rendszert, polárkoordinátákban felírva, azaz $x(t) = r(t) \cos(\varphi(t))$ és $y(t) = r(t) \sin(\varphi(t))$.

$$\frac{d\varphi}{dt} = \omega \quad (18)$$

$$\frac{dr}{dt} = (\gamma - r^2)r \quad (19)$$

A rendszerben szerepel egy γ paraméter is, amely drasztikusan befolyásolja a dinamikát: $\gamma < 0$ esetén a hosszú távú viselkedést az $x = y = 0$ fixpont határozza meg, míg $\gamma = r_c^2 > 0$ -ra egy oszcilláló megoldás jelenik meg, amelynek sugara pont r_c . Ezt a periodikus trajektóriát *határciklusnak* hívják.



1. ábra. A fenti (φ, r) rendszer két tipikus, hosszú távú viselkedését mutató trajektóriák, az x, y síkon szemléltetve. A bal oldalon $\gamma < 0$ esetén, az $x = y = 0$ fixponthoz való konvergenciát látjuk. A jobb oldalon pedig $\gamma = r_c^2 > 0$ esetén kialakuló r_c sugarú periodikus határciklust.

A példaként felírt rendszerben $\gamma = 0$ paraméter értéknél egy drasztikus átmenetet látunk. Azt mondjuk, hogy $\gamma = 0$ -nál *bifurkáció* történik².

Fontos még megemlíteni, hogy bizonyos esetekben, a dinamikai rendszerekhez lehet társítani olyan mennyiségeket, amelyek állandóak egy adott trajektória mentén. A klasszikus mechanikai motiváció miatt ezeket gyakran *mozgásállandónak* hívják. Általánosan elmondható, hogy amennyiben egy rendszer sok mozgásállandóval rendelkezik, a megoldást egy *explicit integrál* kiszámításával kapjuk. Ezért, az elegendő mozgásállandóval rendelkező rendszereket *integrálhatónak* hívjuk. A nem integrálható rendszerekre ezzel ellentétben sokkal bonyolultabb, kaotikus viselkedés is jellemző.

2.1. Kaotikus viselkedés

A huszadik század végére tisztává vált, hogy az integrálható rendszerek sokkal inkább kivételek, egy általános dinamikai rendszer sokkal bonyolultabb viselkedést mutat. A kaotikus rendszerek annyira érzékenyek a numerikus pontatlanságokra, hogy viselkedésük egyáltalán nem jelezhető előre, annak ellenére hogy az őket leíró differenciálegyenletek teljesen *determinisztikusak*.

Pontosabban megfogalmazva, a kaotikus rendszereket a kezdőfeltételre jellemző *exponenciális* érzékenység definiálja. Azaz, a kezdőfeltételben lévő kezdeti hiba időben exponenciálisan növekszik.

²A határciklus viselkedés megjelenése ú. n. Hopf-bifurkációval történik [2]

Az egyik legegyszerűbb példája a kaotikus rendszereknek a *logisztikus leképezés*. Az eddigiekkel ellentétben most nem folytonos idejű, differenciálegyenlettel adott rendszerről lesz szó, hanem egy diszkrét idejű leképezésről, amelyet a következő formula definiál

$$x_{n+1} = rx_n(1 - x_n), \quad x_n \in [0, 1], r \in [0, 4]. \quad (20)$$

Értelmezhetjük úgy, hogy az x_n változó egy faj egyedeinek számát jelenti az n . évben. Minden egyednek $r(1-x_n)$ számú utóda van évente. A rendszer r bizonyos értékeire rendkívül bonyolult, kaotikus viselkedést képes mutatni.

Ezt láthatjuk, ha megvizsgáljuk a rendszer fixpontjait, vagyis azokat az x_n értékeket, amelyeknél a dinamika stabilizálódik hosszú idő után. Azon tulajdonságú x pontokat keressük, amelyekre (n -től függetlenül) $x = rx(1 - x)$.

A nemtriviális megoldás $r(1 - x) = 1$ -ből adódik, amely $x^{(1)} = 1 - 1/r$, amennyiben $r > r_1 = 1$, vagyis egy bifurkációt látunk $r_1 = 1$ értéknél, amelynél megjelenik a fixpont.

A stabilitását megvizsgálva kiderül, hogy van egy r_2 érték, melyre a fixpont $r > r_2$ esetén már elveszíti a stabilitását, a hozzá közeli pontokat *taszítani kezdi*.

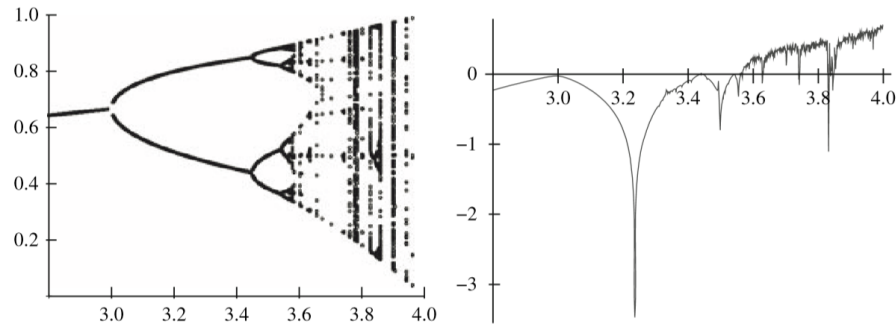
Ebben az r_2 bifurkációs pontban olyan új megoldások születnek (még hozzá kettő), amely a *kétszeresen iterált leképezésnek* fixpontja, vagyis *kettes ciklus*, $x_{n+2} = x_n$. A kettes ciklusnak is kiszámítható a stabilitási tartománya, amely addig tart, amíg a *négyszeresen iterált leképezés* fixpontjai, a *négyes ciklusok* megjelennek.

Általánosan elmondható, hogy r növelésével egyre nagyobb rendű ciklusok jelennek meg, mindig megduplázva az addig stabil ciklus periodicitását. 2^{n-1} darab megoldást találunk, amely a 2^{n-1} -szer iterált leképezésnek fixpontja, vagyis 2^{n-1} -es ciklus. Ezeknek pedig kiszámítható a stabilitási tartománya, amely valamely $r_n < r < r_{n+1}$ intervallum. A logisztikus leképezés esetén az r_n sorozatnak van határértéke,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} r_n = r_\infty = 3.5599456..., \quad (21)$$

ezen r érték fölött *végtelen* periódusú instabil ciklusok jönnek létre, ami azt jelenti hogy a rendszer *soha* nem tér vissza a kezdeti értékére. A végtelen számú instabil pálya által uralt dinamika kaotikussá válik, és megjelenik a kezdőfeltételekre való exponenciális érzékenység.

Ezt számszerűsíti a *Lyapunov-exponens*. Vegyünk két trajektóriáját a logisztikus leképezésnek, amelyek x_0 és y_0 pontokból indulnak. A dinamika során ezek eltávolodhatnak egymástól vagy közeledhetnek egymáshoz, a közöttük lévő $|x_n - y_n|$ távolság $\sim \exp(\lambda n)$ szerint változik, ahol λ a Lyapunov-exponens. Ezzel megfogalmazhatjuk, hogy a $\lambda > 0$ -val jellemezhető viselkedést hívjuk kaotikusnak. A 2. ábra a logisztikus leképezés ciklusait, és az ezekhez tartozó Lyapunov-exponenseket mutatja, az r paraméter függvényében.



2. ábra. A bal panelen a logisztikus leképezés bifurkációs diagramja látható, vagyis a rendszer stabil pályáinak koordinátái, r függvényében. A jobb panelen pedig ugyanaz r értékek mellett számolt Lyapunov-exponensek láthatók. A pozitív λ -jú tartományokban kaotikus viselkedést tapasztalunk.

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.