Differenciálegyenletek numerikus integrálása

2019. február 25.

Differenciálegyenletek

Olyan egyenletek, ahol

- a megoldást függvény alakjában keressük
- az egyenletben a függvény és deriváltjai szerepelnek
- adottak még kezdeti feltételek és határfeltételek

Példa: leejtett kő mozgásegyenlete

$$\frac{\mathrm{d}^2 x(t)}{\mathrm{d}t^2} = \frac{F}{m}$$

Kezdeti feltételek:

$$x(t=0) = x_0 \qquad \left.\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0} = v_0$$

Tipikus fizikai problémák

- n-test szimulációk (csillagászat)
- molekuladinamika (kölcsönható részecskék)
- hővezetés
- hidrodinamika (turbulens áramlások)
- magnetohidrodinamika (csillagmodellek, plazmafizika)
- gravitációs hullámok
- molekulapályák számítása (időfüggetlen Schrödinger-egyenlet)
- stb.

Példa egyszerű egyenlet megoldására

Az előbbi egyszerű mozgásegyenletet kétszer integrálva $\mathrm{d}t$ szerint:

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}^2 x(t)}{\mathrm{d}t^2} &= \frac{F}{m} \\
\frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} &= \frac{F}{m} t + v_0 \\
x(t) &= \frac{F}{2m} t^2 + v_0 t + x_0
\end{aligned}
$$

Differenciálegyenletek csoportosítása

Változók száma szerint

- *közönséges:* egyváltozós, az $x = x(t)$ megoldás csak t-től függ
- *parciális differenciálegyenlet:* többváltozós
  ilyenkor parciális deriváltak is szerepelnek

Lineáris vagy nem lineáris

- *lineáris:* ha az $x(t)$ és deriváltjai mind első rendben szerepelnek
- *nem lineáris:* az $x(t)$ vagy deriváltjai magasabb hatványon

A *differenciálegyenlet rendje*

- az a legmagasabb derivált, ami szerepel az egyenletben
- minden magasabb rendű differenciálegyenlet átírható
  többváltozós csatolt elsőrendű egyenletek rendszerére

Közönséges vs. parciális differenciálegyenlet

Közönséges: a keresett függvénynek csak egy változója van
Ebben a példában $x = x(t)$ időfüggő

$$m\frac{\mathrm{d}^2 x(t)}{\mathrm{d}t^2} = -kx(t)$$

Parciális: a keresett függvénynek több változója is van
az egyenletben szerepelnek a parciális deriváltak is
Most a $\phi = \phi(x, t)$ függvény hely és időfüggő is

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial x^2}$$

Lineáris vs. nem lineáris differenciálegyenlet

A tananyagban általában lineáris differenciálegyenletek fordulnak elő, de pl. a folyadékáramlás vagy az általános relativitáselmélet egyenletei nem azok.
(Nem is nagyon lehet őket általános esetben megoldani.)

Lineáris differenciálegyenlet, példa: harmonikus oszcillátor
Bár szerepel második derivált, minden derivált lineáris

$$m\frac{\mathrm{d}^2 x(t)}{\mathrm{d}t^2} = -kx(t)$$

Nem lineáris differenciálegyenlet
Példa: Navier–Stokes-egyenletek

$$\rho\left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\nabla\mathbf{v}\right) = -\nabla p$$

Elsőrendű vs. magasabb rendű differenciálegyenlet

Az *első rendű* egyenletben legfeljebb első rendű derivált szerepel
Példa: az $I = I(x)$ fényintenzitás csökkenése fényelnyelő közegben:

$$\frac{\mathrm{d}I(x)}{\mathrm{d}x} = -kx$$

A dinamikai törvények többsége lineáris *másodrendű* differenciálegyenlet
Példa: ismét a harmonikus oszcillátor

$$m\frac{\mathrm{d}^2x(t)}{\mathrm{d}t^2} = -kx(t)$$

Differenciálegyenletek rendszere

Ha egyszerre több ismeretlen függvényünk is van, és ezekre több egyenletünk, akkor az egy differenciálegyenlet-rendszer.

- az egyenletek ugyanazoktól a változóktól függnek

Az egyenletrendszer általában csatolt

- ugyanaz a függvény több egyenletben is szerepel, pl:

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}y(t)}{\mathrm{d}t} &= z(t)\\ \frac{\mathrm{d}z(t)}{\mathrm{d}t} &= t - t^2 z(t)\end{aligned}$$

Másodrendű lineáris egyenletek átírása

Másodrendű (vagy akár magasabb rendű) egyenletek numerikus megoldása általában nem probléma, ha az egyenlet maga lineáris.

Megoldás menete: átírjuk az egyenletet elsőrendű egyenletek rendszerére, és azokat párhuzamosan integráljuk.

Példa: rugó egyenlete

$$\frac{\mathrm{d}^2 x(t)}{\mathrm{d}t^2} = -k\frac{x(t)}{m}$$

Átírva:

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}v(t)}{\mathrm{d}t} &= -k\frac{x(t)}{m}\\ \frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} &= v(t)\end{aligned}$$

Differenciálegyenletek numerikus megoldása

Lineáris egyenletek analitikus megoldásakor

- a homogén egyenlet megoldása az *általános megoldás*
- a konkrét kezdeti feltételeket megkövetelve *partikuláris megoldást* kapunk

Numerikus integráláskor

- majdnem mindig csak partikuláris megoldást adunk
- a függvény értékeit csak diszkrét helyeken adjuk meg
- bízunk abban, hogy ez nagyon hasonlít az analitikus megoldáshoz

Mi csak közönséges kezdeti érték problémákat fogunk nézni.

Térbeli határfeltételek

A végtelen fázisteret általában nem szimuláljuk

- a fizikai folyamatok valamilyen dobozba vannak zárva
- a doboz falán van valamilyen határfeltétel

Példa: molekuladinamika

- mi történik a részecskével a doboz falán?
- rugalmasan visszapattan
- kimegy az egyik oldalon és bejön a másikon
  ezt periodikus határfeltételnek hívjuk
  a nagyon nagy vagy végtelen teret szimulálja

A határfeltétel parciális differenciálegyenleteknél bonyolult.

Közönséges első rendű egyenletek rendszere

Az általános probléma: N darab egyenlet rendszere

$$\frac{\mathrm{d}y_i(x)}{\mathrm{d}x} = f_i(x, y_1, y_2, ..., y_N)$$

- az f_i függvények tetszőlegesek, de nem tartalmazzák az y_i-k deriváltjait.
- kezdeti feltételek: $y_i(x = x^{(0)}) = y_i^{(0)}$

A továbbiakban az i indexet elhagyjuk, és y-t mindig vektornak tételezzük fel.

Kezdeti- és peremfeltételek

Általában a keresett függvények értékei a kiindulási pontban vannak megadva

- ez persze nem mindig van így
- lehet, hogy a kezdeti és végpont is adott
- vagy nem azonos időpontban adottak a kezdeti paraméterek

Példák:

- kisbolygók pozícióját eltérő időpontokban sikerült csak meghatározni, integrálni kell a pályájukat
- ismerjük a részecske kezdőpontját és a végpontbeli sebességét, meg kell határozni a pályáját

Az Euler-módszer

Ötlet:

- kezeljük a problémát iteratívan
- írjük át a dx differenciálokat véges Δx differenciákra
- a Δx lépéshosszt általában h-val jelöljük
- léptessük a változók értékét diszkrét lépésekben
- az összes változót egyszerre!

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot f(x_n, y_n)$$

Eközben a független változó is lép:

$$x_{n+1} = x_n + h$$

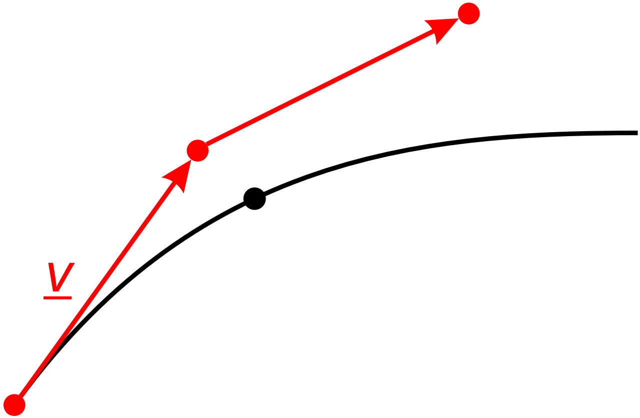
Ez az ún. Euler-módszer

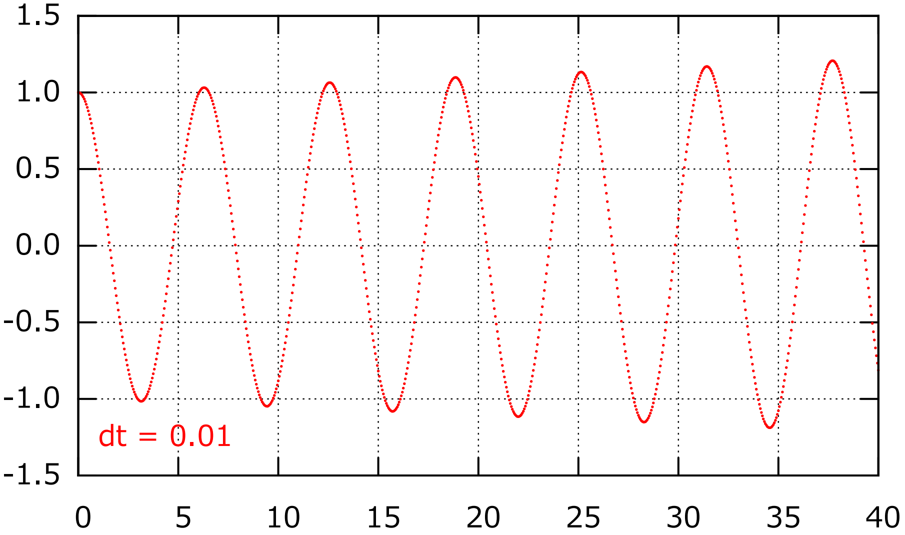
- nem jó módszer
- még akkor sem, ha a lépéseket nagyon picire vesszük

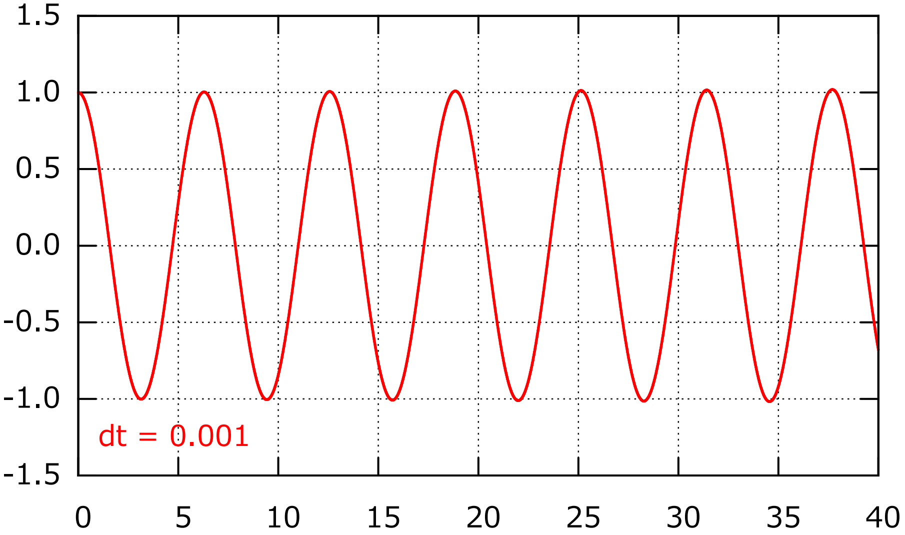
Az Euler-módszer hibája

Az Euler-módszer esetében a deriváltak értékét mindig a lépés elején vesszük

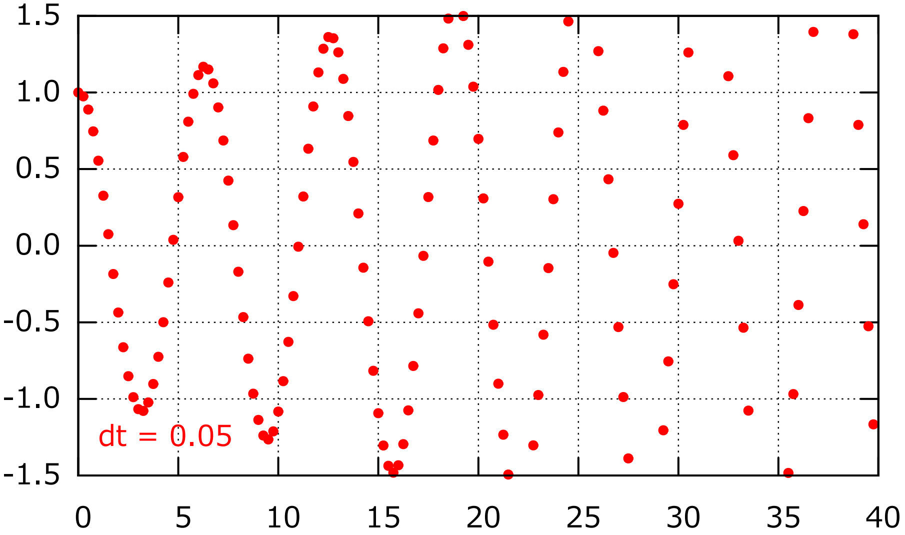
- ha a derivált a lépés során túl gyorsan változik, akkor a lépésnek lesz valamekkora hibája
- idővel nagy lesz az eltérés az analitikus megoldástól
- az Euler-módszer hibája ugyan $O(h^2)$
- viszont a lépések számával a hiba felösszegződik
- ha a lépést felére csökkentjük, a hiba a negyedére csökken, de kétszer több lépésre van szükség


v


1.5
1.0
0.5
0.0
-0.5
-1.0
-1.5
0
5
10
15
20
25
30
35
40
dt = 0.01



1.5
1.0
0.5
0.0
-0.5
-1.0
-1.5
dt = 0.001
0
5
10
15
20
25
30
35
40


1.5
1.0
0.5
0.0
-0.5
-1.0
-1.5
0
5
10
15
20
25
30
35
40
dt = 0.05

A hiba kiszámítása

Euler-módszer formulája:

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot f(x_n, y_n)$$

Tegyük fel, hogy x_n helyen a diszkréten számított y_n és az egzakt $y(x_n)$ megoldás azonos volt.

- nézzük meg az eltérést egy lépés után
- ez lesz a *lokális hiba*
- tekintsük y Taylor-sorát x körül az $x + h$ helyen:

$$y_{n+1} = y(x+h) = y(x) + \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}h + \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2y}{\mathrm{d}x^2}h^2 + \ldots$$

- hasonlítsuk össze az Euler-módszer formulájával
- mivel a módszer kifejezése ennek csak az első két tagját adja meg, nem lehet pontosabb $O(h^2)$-nél

Mivel a teljes számolás során $\sim 1/h$ lépés végzünk, ezért a globális hiba nem lehet kisebb $O(h)$-nál.

Energiamegmaradás

Az előző példában: harmonikus oszcillátor

- a test minden kilengéskor egy kicsit túllendült
- ez a módszer módszer pontatlansága miatt volt így
- a test minden kitéréskor plusz potenciális energiát nyert
- ez kinetikus energiává konvertálódott

Dinamikai rendszerek szimulációjakor az energiamegmaradás alapkövetelmény $\Rightarrow$

- az Euler-módszer nem lesz jó!
- túl nagy energia nyereség/veszteség lépésenként
- vagy keresünk olyan módszert, ami megtartja az energiát[1],
- vagy megpróbáljuk csökkenteni a hibát

---

[1] ún. szimplektikus integrátorok

A leapfrog[2] módszer

Másodrendű dinamikai egyenleteknél működik

- a sebességeket és a koordinátákat külön-külön lépésben frissítjük
- másodrendű módszer, a hiba $O(h^4)$

$$
\begin{aligned}
x_n &= x_{n-1} + \Delta t \cdot v_{n-1/2} \\
a_n &= \frac{F(x_n)}{m} \\
v_{n+1/2} &= v_{n-1/2} + \Delta t \cdot a_n
\end{aligned}
$$

A hiba lecsökkent, mégis ugyanannyi számolást kell csak végezni!

[2] bakugrás

Az integrálási idő invertálhatósága

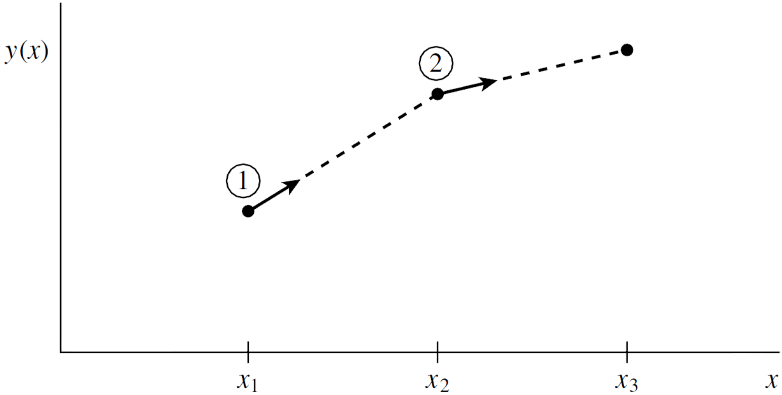
Vajon visszafele integrálható-e egy rendszer

- ha nem disszipatív, akkor elvileg igen
- megmarad az energia
- nincsen belső súrlódás, viszkozitás stb.

Érdekes kérdés:

- visszafele léptetve egy diszkrét integrátort, visszajutunk-e az eredeti kiindulási pontba?
- egyszerű integrátorral általában nem
- a numerikus hibák összeadódnak
- kaotikus egyenleteknél pedig fel is erősödnek

Az Euler-módszer



Az Euler-módszer javítása

Az Euler-módszer aszimmetrikus:

- Fejezzük ki most y_n-et y_{n+1}-ből:

$$y_n = y_{n+1} - h \cdot f(x_n, y_n)$$

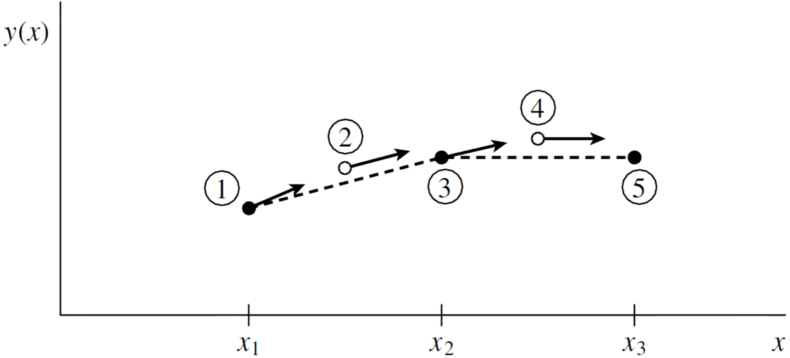
- az aszimmetria ott jelenik meg, hogy a deriváltat mindig az x_n helyen vesszük.

Javítsunk a módszeren:

- kiszámoljuk a deriváltat egy középső pontban
- ezt használjuk a teljes lépésben

$$\begin{aligned}
k_1 &= h \cdot f(x_n, y_n) \\
k_2 &= h \cdot f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right) \\
y_{n+1} &= y_n + k_2 + O(h^3)
\end{aligned}$$

Az Euler-módszer javítása



Az Euler-módszer

Az összes változót egyszerre léptetjük:

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot f(x_n, y_n) + O(h^2)$$

Majd végül léptetjük a független változót is:

$$x_{n+1} = x_n + h$$

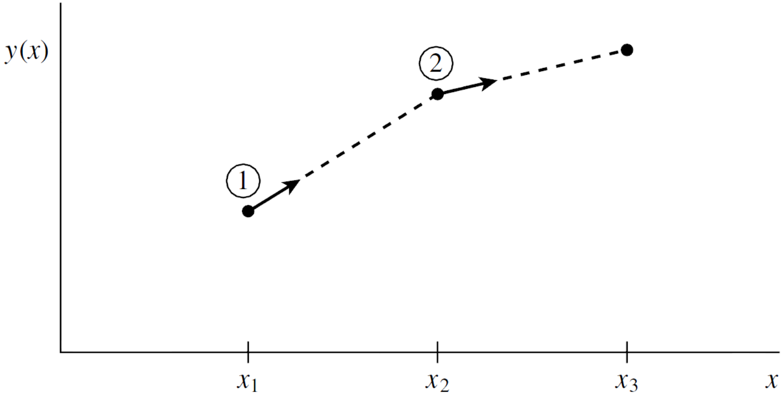
Az y itt több változó vektora:

- tetszőleges fizikai mennyiségekből áll
- pl.: fázistér: koordináták és sebességek

Az x változó skalár, és általában az időnek felel meg.

Figyelem: a potenciálokat is mindig az időlépés kezdetén kell kiértékelni!

Az Euler-módszer



Példa Euler-módszerre

Harmonikus oszcillátor: $\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2} = -\frac{kx}{m}$
Mivel ez másodrendű, átírjuk elsőrendű egyenletek rendszerére

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} &= -\frac{kx}{m} \\ \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} &= v \end{aligned}$$

Felírjuk az egyenletrendszer diszkretizált változatát

$$\begin{aligned} v_{n+1} &= v_n - \frac{k \cdot x_n}{m} \cdot \Delta t \\ x_{n+1} &= x_n + v_n \cdot \Delta t \end{aligned}$$

Majd az idő léptetése

$$t_{n+1} = t_n + \Delta t$$

Itt most x és v felel meg a korábbi y vektor elemeinek, t a korábbi x független változónak és Δt a h lépésköznek.

```
void euler_step(double* x, double* y,
                double* yn, double h,
                int N)
{
  int i;
  for (i = 0; i < N; i++)
  {
    yn[i] += y[i] + h * dy(x, y, i);
  }
  *x += h;
}

double dy(double* x, double* y, int i)
{
  // itt kiszamoljuk az i. derivaltat
}
^^I
```

Példa a leapfrog módszerre

Korábbi egyenlet: harmonikus oszcillátor

Először a sebességet léptetjük
(az összes komponenst, bár itt most csak egy van)

$$v_{n+1/2} = v_n - \frac{k \cdot x_n}{m} \cdot \Delta t$$

majd a koordinátát

$$x_{n+1} = x_n + v_{n+1/2} \cdot \Delta t$$

végül az időt

$$t_{n+1} = t_n + \Delta t$$

Az Euler-módszer javítása: középponti módszer

Az Euler-módszer aszimmetrikus:

- Fejezzük ki most y_n-et y_{n+1}-ből:

$$y_n = y_{n+1} - h \cdot f(x_n, y_n)$$

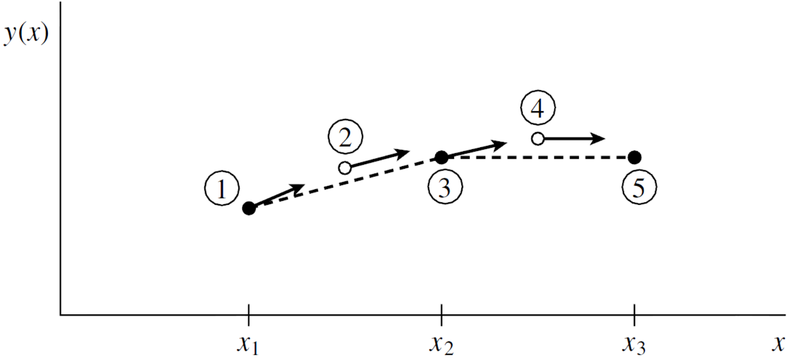
- az aszimmetria ott jelenik meg, hogy a deriváltat mindig az x_n helyen vesszük.

Javítsunk a módszeren:

- teszünk egy fél lépést
- kiszámoljuk a deriváltat egy középső pontban
- ezt használjuk a teljes lépésben

$$\begin{aligned}
k_1 &= h \cdot f(x_n, y_n) \\
k_2 &= h \cdot f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right) \\
y_{n+1} &= y_n + k_2 + O(h^3)
\end{aligned}$$

A középponti módszer

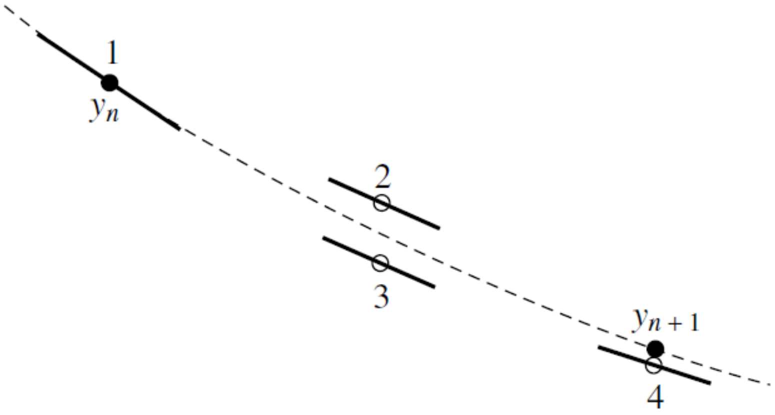


A hiba további csökkentése: a Runge–Kutta-módszer

A lépést több részlépésből előállítva bízhatunk abban, hogy a hiba tovább csökken.

$$
\begin{aligned}
k_1 &= h \cdot f(x_n, y_n) \\
k_2 &= h \cdot f(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + \tfrac{1}{2}k_1) \\
k_3 &= h \cdot f(x_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + \tfrac{1}{2}k_2) \\
k_4 &= h \cdot f(x_n + h, y_n + k_3) \\
y_{n+1} &= y_n + \tfrac{1}{6}k_1 + \tfrac{1}{3}k_2 + \tfrac{1}{3}k_3 + \tfrac{1}{6}k_4 + O(h^5)
\end{aligned}
$$

A negyedrendű Runge–Kutta-módszer



Módszerek összehasonlítása

	f kiértékeléseinek száma	hiba
Euler-módszer	1	$O(h^2)$
középponti módszer	2	$O(h^3)$
4-ed rendű Runge–Kutta	4	$O(h^5)$

A Runge–Kutta-módszer magasabb rendekre is általánosítható

- meddig érdemes elmenni?
- a több köztes pont mindig nagyobb pontosságot jelent?
- nem feltétlenül
- viszont több függvénykiértékeléssel jár

Adaptív lépéshossz-változtatás

Eddig a h lépéshosszt rögzítettnek vettük

- a megoldás van, ahol gyorsan változik, van ahol lassan
- ahol lassan változik, ott léphetnénk nagyobbat
- valahogyan meg kell becsülni, hogy h megváltoztatásával mekkora hibát vétünk
- ha kellően kicsit, akkor megéri h-t növelni

Végezzük el az előbbi RK4 lépést

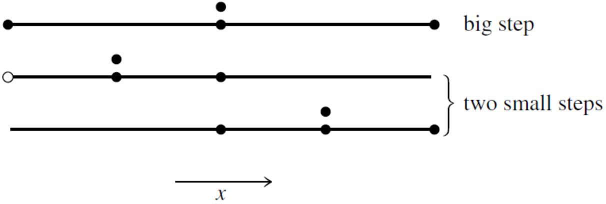
- egyetlen lépésben
- két fél lépésben

Ez jóval több függvénykiértékelést igényel (12, de kettő azonos helyen van véve, így csak 11)

- megéri-e?
- a konkrét problémától függ

A Runge–Kutta-lépés hibájának becslése

Az RK4 lépést előbb egy, majd két fél lépésben végezzük:



Tekintsük a végeredmények különbségét

$$\Delta = y_2 - y_1$$

- több koordináta esetén a maximum Δ kell

Az optimális lépéshossz kiválasztása

A negyedrendű Runge–Kutta-módszer hibája $O(h^5)$

- h_1 nagyságú lépést téve a hiba Δ_1
- mekkora legyen h_0, hogy a hiba Δ_0 legyen?

$$h_0 = h_1 \left| \frac{\Delta_0}{\Delta_1} \right|^{\frac{1}{5}}$$

- h_1-et az előző lépésből vesszük
- Δ_1-et számoljuk
- Δ_0 viszont adott
- megmondjuk, hogy mekkora hibát engedünk az integrálás során

Az adaptív lépéshossz előnye és hátránya

Előnye

- nem kell előre megbecsülni a lépéshosszt
- azt a módszer automatikusan kitalálja
- a megoldás lapos szakaszain nagyon gyorsan halad

Hátránya

- nem becsülhető előre a futásidő
- ha a megoldás végig gyorsan változó, nagyon belassul

Példa: Naprendszer szimulációja

- nagyon pontos számítást igényel (akár RK8)
- a Merkúr nagyon közel van a Naphoz
- miatta folyton nagyon belassul

A Runge–Kutta-együtthatók meghatározása

Az együtthatók meghatározása nagyon nehéz

- minden módszer egy külön cikket ér!
- az együtthatókat egy ún. Butcher-táblában adják meg
- RK4 táblázata:

$$
\begin{array}{c|cccc}
0 & & & & \\
\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & \\
\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & \\
1 & 0 & 0 & 1 & \\
\hline
 & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6}
\end{array}
$$

TABLE III

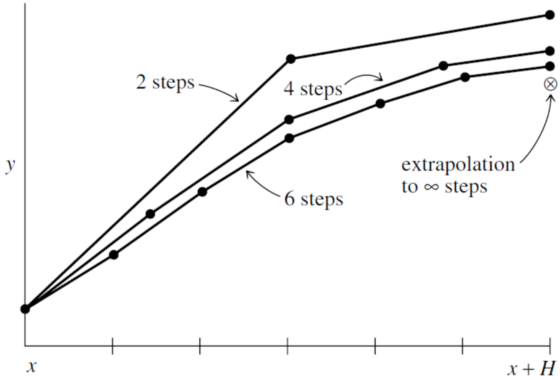
Runge–Kutta–Nystrom 7(6)T

c_i	a_{ij}								$\hat{b}_i$	b_i	$\hat{\hat{b}}_i$
0									$\frac{1}{20}$	$\frac{1}{20}$	$\frac{1}{20}$
$\frac{1}{10}$	$\frac{1}{200}$								0	0	0
$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{150}$	$\frac{1}{75}$							0	0	0
$\frac{3}{8}$	$\frac{171}{8192}$	$\frac{45}{4096}$	$\frac{315}{8192}$						0	0	0
$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{288}$	$\frac{25}{528}$	$\frac{25}{672}$	$\frac{16}{693}$					$\frac{8}{45}$	$\frac{8}{45}$	$\frac{16}{45}$
$\frac{7-\sqrt{21}}{14}$	$\frac{1003-205\sqrt{21}}{12348}$	$\frac{-25}{90552}(751-173\sqrt{21})$	$\frac{25}{43218}(624-137\sqrt{21})$	$\frac{-128}{237699}(361-79\sqrt{21})$	$\frac{3411-745\sqrt{21}}{24696}$				$\frac{7}{360}(7+\sqrt{21})$	$\frac{7}{360}(7+\sqrt{21})$	$\frac{49}{180}$
$\frac{7+\sqrt{21}}{14}$	$\frac{793+187\sqrt{21}}{12348}$	$\frac{-25}{90552}(331+113\sqrt{21})$	$\frac{25}{43218}(1044+247\sqrt{21})$	$\frac{-128}{9745659}(14885+3779\sqrt{21})$	$\frac{3327+797\sqrt{21}}{24696}$	$\frac{-(581+127\sqrt{21})}{1722}$			$\frac{7}{360}(7-21)$	$\frac{7}{360}(7-\sqrt{21})$	$\frac{49}{180}$
1	$\frac{-(157-3\sqrt{21})}{378}$	$\frac{25(143-10\sqrt{21})}{2772}$	$\frac{-25}{3969}(876+55\sqrt{21})$	$\frac{1280}{596673}(913+18\sqrt{21})$	$\frac{-1}{2268}(1353+26\sqrt{21})$	$\frac{7}{4428}(1777+377\sqrt{21})$	$\frac{7(5-\sqrt{21})}{36}$		0	$-\lambda$	$\frac{1}{20}$
1	$\frac{1}{20}$	0	0	0	$\frac{8}{45}$	$\frac{7(7+\sqrt{21})}{360}$	$\frac{7(7-\sqrt{21})}{360}$	0	0	$+\lambda$	0

A Richardson-extrapoláció

Ha garantált, hogy a megoldás sima

- tegyünk meg egy lépést először kettő
- majd 4, 6, 8 stb. részlépésben
- nézzük a megoldás konvergenciáját
- extrapoláljunk a $h = 0$ esetre



A függvénykiértékelések számának minimalizálása

A Richardson-extrapoláció rengeteg függvénykiértékelést igényel

- próbáljunk ezen optimalizálni
- egy H lépést tegyünk meg n kis lépésben: $h = \frac{H}{n}$

$$
\begin{aligned}
z_0 &= y(x) \\
z_1 &= z_0 + h \cdot f(x, z_0) \\
z_{m+1} &= z_{m-1} + 2h \cdot f(x + mh, z_m),
\end{aligned}
$$

  ahol az harmadik sor $m = 1, 2, ..., n-1$ esetekre vonatkozik.
- ezekből az n részlépéses próbalépés végül

$$y(x+H) \approx \frac{1}{2}\left[z_n + z_{n-1} + h \cdot f(x+H, z_n)\right]$$

- belátható, hogy – szemben a Runge–Kuttával, ahol egy lépéshez négy függvénykiértékelés kellett – most csak egy kiértékelés kell

Az extrapoláció numerikus stabilitása

Richardson-extrapolációkor

- a lépésközt n növelésével finomítani kell
- extrapolálni kell a $h = 0$, azaz $n = \infty$ esetre

Bulirsch–Stoer-módszer

- végezzük az extrapolációt racionális törtfüggvényekkel
- ez numerikusan stabil lesz
- tovább bonyolítható: adaptív lépéshossz-változtatás

Extrapoláció racionális törtfüggvényekkel

Írjuk a kiszámolt értékeket egy táblázatba:

$$\begin{array}{llll} T_{11} & & & \\ T_{21} & T_{22} & & \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} & \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{array}$$

- $T_{k1} = y_k$, ahol $y_k = y(x + H)$, ahol a H lépést n_k kisebb $h = H/n_k$ lépésből tettük meg
- a sorokat így lehet polinommal interpolálni:

$$T_{k,j+1} = T_{kj} + \frac{T_{kj} - T_{k-1,j}}{(n_k/n_{k-j})^2 - 1} \qquad j = 1, 2, \dots, k-2$$

- a hibát a sor két utolsó eleme adja

Problémás egyenletek

Ha az integrálás során megjelenő értékek sok nagyságrenddel eltérnek

- a numerikus stabilitás problémás
- a stabilitáshoz irreálisan kis lépéseket kell tenni

Példa egyenlet

$$y' = -cy \qquad c > 0$$

- a megoldást ismerjük: $y(x) = \exp(-cx)$, de
- ha az Euler-formulát írjuk fel, akkor

$$y_{n+1} = y_n + hy'(x_n) = (1 - ch)y_n$$

- ha $h > 2/c$, akkor $|y_n|$ végtelenhez tart, pedig 0-hoz kellene

Egész ártatlan, de problémás egyenletek

Egyszerű egyenlet $u(0) = 1$ és $v(0) = 0$ peremfeltételekkel:

$$\begin{aligned} u' &= 998u + 1998v \\ v' &= -999u - 1999v \end{aligned}$$

Megoldás helyettesítéssel:

$$u = 2y - z \qquad\qquad v = -y + z$$

vagyis

$$\begin{aligned} u &= 2\mathrm{e}^{-x} - \mathrm{e}^{-1000x} \\ v &= -\mathrm{e}^{x} + \mathrm{e}^{-1000x} \end{aligned}$$

A stabilitásához $h = 2/1000$ kellene, pedig a második tagok teljesen elhanyagolhatók.

Implicit integrálási módszerek

Eredeti Euler-lépés:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$$

Vegyük ezt visszafelé, azaz a deriváltakat a lépés végén tekintsük:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1})$$

- y_{n+1} az egyenlet mindkét oldalán szerepel
- ez egy implicit egyenlet y_{n+1}-re
- f tetszőlegesen bonyolult, de ismert függvény
- konkrét f esetén y_{n+1} kifejezhető explicit alakban

Példa implicit módszerre

Korábbi problémás egyenlet:

$$y' = -cy \qquad c > 0$$

Expliciten diszkretizálva:

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot y'(x_n) = y_n - h \cdot cy_n$$

Impliciten diszkretizálva:

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot y'(x_{n+1}) = y_n - h \cdot cy_{n+1}$$

Kifejezve y_{n+1}-et:

$$y_{n+1} = \frac{y_n}{1 + hc}$$

Ez már szépen konvergál 0-hoz, ha $c > 0$

Implicit módszerek differenciálegyenlet-rendszerekre

Ha lineáris differenciálegyenlet-rendszerünk van

- f az y_{n+1}-nek csak lineáris függvénye
- ekkor minden lépésben lineáris egyenlet kell megoldani

Ha f általános függvény

- ezt nem tudjuk egzaktul megoldani
- csak iteratív módszerekkel lehet kezelni az implicit kifejezést