

Differenciálegyenletek numerikus integrálása

Kormányos Andor

Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

2019. szeptember 30.

Olyan egyenletek, ahol

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

Példa: leejtett kő, homogén gravitációs térben:

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

Kezdeti feltételek:

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

Az előbbi egyszerű mozgásegyenletet kétszer integrálva dt szerint:

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

$$\frac{dx(t)}{dt} = \frac{F}{m}t + v_0$$

$$x(t) = \frac{F}{2m}t^2 + v_0t + x_0$$

Változók száma szerint

- **közönséges:** egyváltozós, az $x = x(t)$ megoldás csak t -től függ

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

- **parciális differenciálegyenlet:** többváltozós, parciális deriváltak is szerepelnek

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

$\phi(x, t)$ függvény hely és időfüggő is

A *differenciálegyenlet rendje*

- az a legmagasabb derivált, ami szerepel az egyenletben

Az *első rendű* egyenletben legfeljebb első rendű derivált szerepel

Példa: az $I = I(x)$ fényintenzitás csökkenése fényelnyelő közegben:

$$\frac{dI(x)}{dx} = -kx$$

A dinamikai törvények többsége lineáris *másodrendű* differenciálegyenlet

Példa: harmonikus oszcillátor

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

Lineáris vs. nem lineáris differenciálegyenlet

A tananyagban általában lineáris differenciálegyenletek fordulnak elő, de pl. bizonyos növekedési folyamatokat leíró, a folyadékáramlás, az általános relativitáselmélet egyenletei nem azok.

Lineáris differenciálegyenlet: ha az $x(t)$ és deriváltjai mind első rendben szerepelnek

példa: harmonikus oszcillátor

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

Nem lineáris differenciálegyenlet: az $x(t)$ vagy deriváltjai magasabb hatványon

Példa: Navier–Stokes-egyenletek

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

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

- az egyenletek ugyanazoktól a változóktól függenek

Az egyenletrendszer általában csatolt

- ugyanaz a függvény több egyenletben is szerepel, pl:

$$\begin{aligned}\frac{dy(t)}{dt} &= z(t) \\ \frac{dz(t)}{dt} &= t - t^2 z(t)\end{aligned}$$

- Minden magasabb rendű differenciálegyenlet átírható többváltozós csatolt elsőrendű egyenletek rendszerére

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

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

Átírva:

$$\frac{dv(t)}{dt} = -k \frac{x(t)}{m}$$

$$\frac{dx(t)}{dt} = v(t)$$

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

Csak közönséges kezdeti érték problémákat fogunk nézni.

- a deriváltak “analitikusan” adottak
- a megoldást “numerikus” alakban keressük

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 \Rightarrow periodikus határfeltétel (nagyon nagy tér szimulációja)

A határfeltétel parciális differenciálegyenleteknél bonyolul lehet (pl. függvényérték és/vagy merőleges irányú parciális derivált megadása).

Az általános probléma: N darab egyenlet rendszere

$$\frac{dy_i(x)}{dx} = f_i(x, y_1, y_2, \dots, y_N)$$

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

Az általános probléma: N darab egyenlet rendszere

$$\frac{dy_i(x)}{dx} = f_i(x, y_1, y_2, \dots, y_N)$$

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

$y_i(x)$ -t és $f_i(x, y_1, y_2, \dots, y_N)$ -t egy vektor elemeinek tekintjük

Vektoros írásmód: $y_i(x) \rightarrow \mathbf{y}(x)$, $f_i(x, y_1, y_2, \dots, y_N) \rightarrow \mathbf{f}(x, y_1, y_2, \dots, y_N)$

$$\frac{d\mathbf{y}(x)}{dx} = \mathbf{f}(x, y_1, y_2, \dots, y_N)$$

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

Ötlet:

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

Ötlet:

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

Az n -ik lépésben:

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h \cdot \mathbf{f}(x_n, \mathbf{y}_n)$$

Eközben a független változó is lép:

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

Az \mathbf{y} itt több változó vektora, pl fázistér: koordináták és sebességek

Az x változó skalár, pl az idő

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

Egy y vektorelemre:

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

Egy y vektorelemre:

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

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

- nézzük meg az eltérést egy lépés után \Rightarrow *lokális hiba*

Egy y vektorelemre:

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

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

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

$$y_{n+1} = y(x + h) = y(x) + \frac{dy}{dx}h + \frac{1}{2} \frac{d^2y}{dx^2}h^2 + \dots$$

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

Egy y vektorelemre:

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

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

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

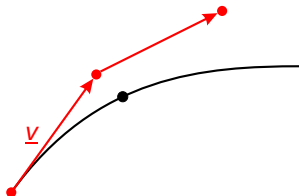
$$y_{n+1} = y(x + h) = y(x) + \frac{dy}{dx}h + \frac{1}{2} \frac{d^2y}{dx^2}h^2 + \dots$$

- mivel az Euler módszer ennek csak az első két tagját adja meg, nem lehet pontosabb $O(h^2)$ -nél
- a teljes számolás során $\sim 1/h$ lépés végzünk, ezért a globális hiba nem lehet kisebb $O(h)$ -nál.

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



Harmonikus oszcillátor: $\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{kx}{m}$

Mivel ez másodrendű, átírjuk elsőrendű egyenletek rendszerére

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{kx}{m}$$

$$\frac{dx}{dt} = v$$

Felírjuk az egyenletrendszer diszkrétizált változatát

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

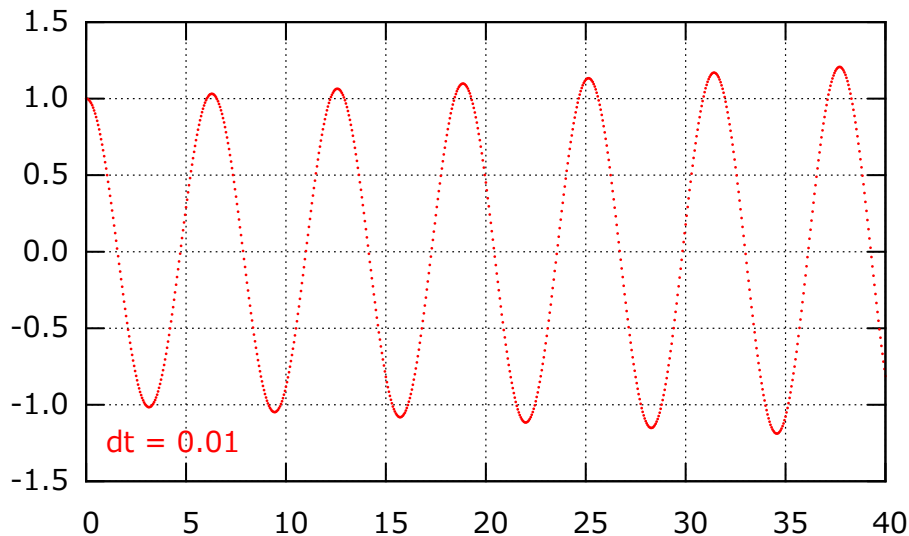
$$x_{n+1} = x_n + v_n \cdot \Delta t$$

Majd az idő léptetése

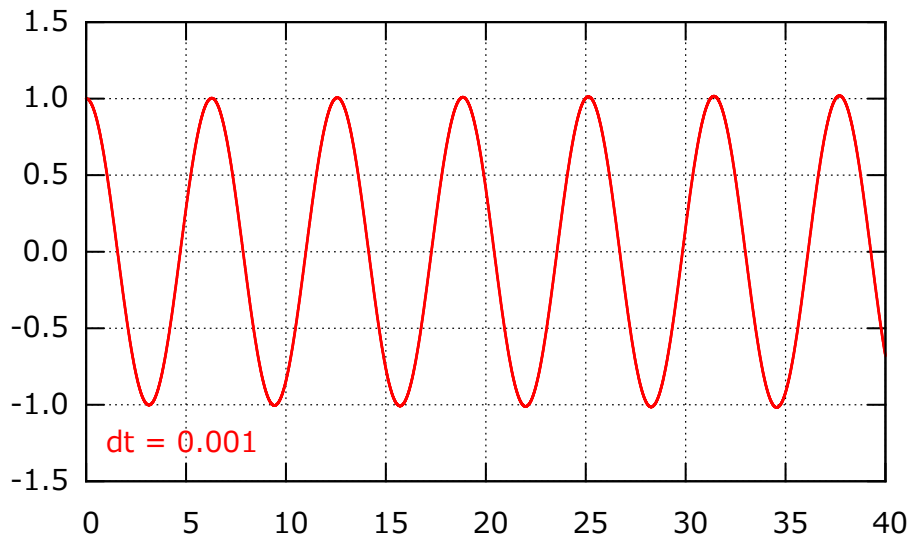
$$t_{n+1} = t_n + \Delta t$$

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

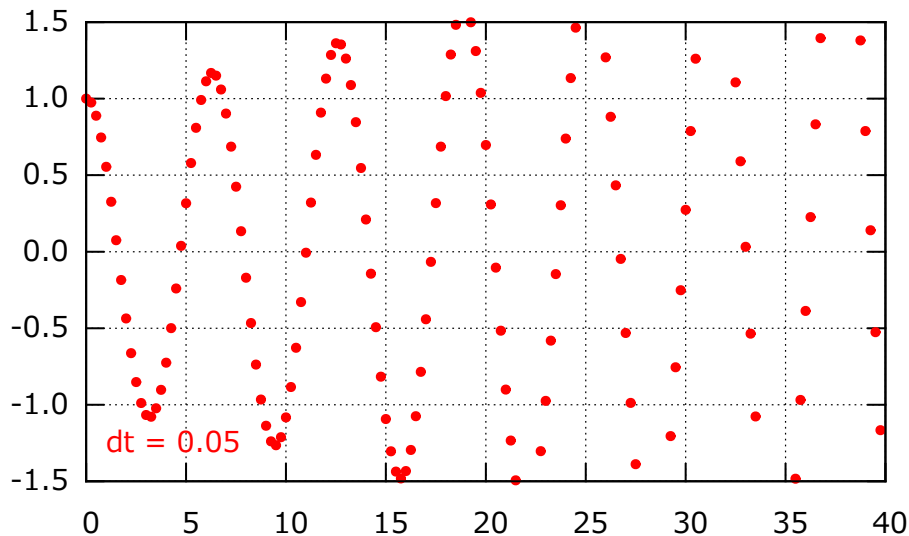
Harmonikus oszcillator integrálása Euler módszerrel



Harmonikus oszcillator integrálása Euler módszerrel



Harmonikus oszcillator integrálása Euler módszerrel



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
⇒ az Euler-módszer nem elég jó!

A leapfrog¹ módszer

Másodrendű dinamikai egyenleteknél működik (molekuladinamikában hasonló az ún. Verlet módszer)

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

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

¹ bakugrás

A leapfrog¹ módszer

Másodrendű dinamikai egyenleteknél működik (molekuladinamikában hasonló az ún. Verlet módszer)

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

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

Ez még átírható így is:

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

A hiba lecsökkent, mégis ugyanannyi számolást kell csak végezni!

¹ bakugrás

Visszafelé időfejlesztve a rendszert visszajutunk-e a kezdeti állapotba?

- ha nem disszipatív (pl nincs súrlódás), akkor elvileg igen
- megmarad az energia

Visszafelé léptetve egy diszkrét integrátort, visszajutunk-e az eredeti kiindulási pontba?

- egyszerű integrátorral általában nem
- a numerikus hibák összeadódnak
- kaotikus egyenleteknél pedig fel is erősödnek

Visszafelé időfejlesztve a rendszert visszajutunk-e a kezdeti állapotba?

- ha nem disszipatív (pl nincs súrlódás), akkor elvileg igen
- megmarad az energia

Visszafelé léptetve egy diszkrét integrátort, visszajutunk-e az eredeti kiindulási pontba?

- egyszerű integrátorral általában nem
- a numerikus hibák összeadódnak
- kaotikus egyenleteknél pedig fel is erősödnek

A leapfrog módszerről megmutatható, hogy az időintegrálás szempontjából invertálható. Ezenkívül a leapfrog módszer szimplektikus, vagyis az energiamegmaradást is teljesül ("symplectic integrator").

Differenciálegyenlet rendszer:

$$\frac{dy(x)}{dx} = \mathbf{f}(x, y_1, y_2, \dots, y_N)$$

Differenciálegyenlet rendszer:

$$\frac{dy(x)}{dx} = \mathbf{f}(x, y_1, y_2, \dots, y_N)$$

```
1 void euler_step(double *x, double *y,  
2               double *yn, double *dy  
3               double h, int N)  
4 {  
5     diff(x, y, dy);  
6     for (int i = 0; i < N; i ++)  
7     {  
8         // változók leptetese  
9         yn[i] += y[i] + h * dy[i];  
10    }  
11    // ido leptetese  
12    *x += h;  
13 }  
14  
15 void diff(double *x, double *y, double *dy)  
16 {  
17     // itt kiszamoljuk az f vektorban  
18     // tarolt derivaltakat  
19 }
```

Figyeljünk a mutatók használatára:

- x skalár változó, az értékét felülírja a függvény és így adja vissza a `main` függvénynek
- y , yn , és dy vektorok, az első elem címét adjuk át mutatóval
- y , yn , és dy elemeit `for` ciklusban számoljuk
- a h -t és az N -t érték szerint is átadhatjuk, mert nem változnak

Az Euler-módszer javítása: középponti módszer

Az Euler-módszer aszimmetrikus:

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

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

Az aszimmetria ott jelenik meg, hogy megoldást egy h -val léptetjük, de a szükséges deriváltat mindig az x_n helyen, vagyis az intervallum elején számítjuk ki.

Javítsunk a módszeren:

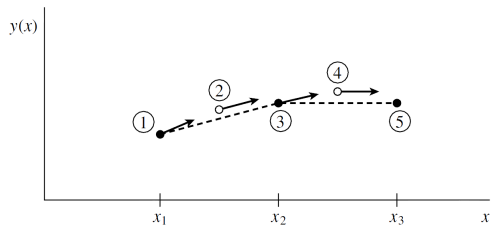
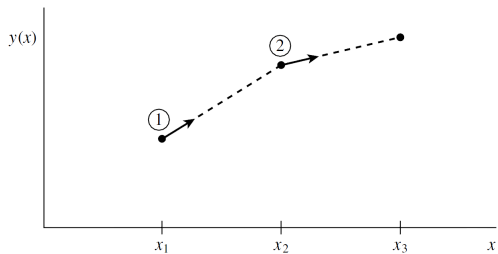
- teszünk egy fél lépést
- kiszámoljuk a deriváltat egy középső pontban
- ezt használjuk a teljes lépésben

$$k_1 = h \cdot f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = h \cdot f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right)$$

$$y_{n+1} = y_n + k_2 + O(h^3)$$

Egyszerű Euler-lépés és a középponti módszer



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

$$k_1 = h \cdot f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = h \cdot f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1)$$

$$k_3 = h \cdot f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_2)$$

$$k_4 = h \cdot f(x_n + h, y_n + k_3)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{3}k_2 + \frac{1}{3}k_3 + \frac{1}{6}k_4 + O(h^5)$$

A negyedrendű Runge–Kutta-módszer

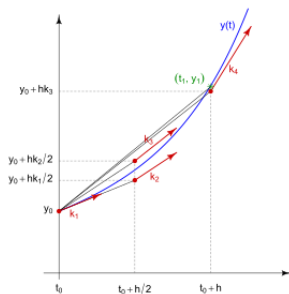


Figure: A függvény deriváltját négy pontban számoljuk ki: a kezdetiben, kétszer a lépéstávolság felénél és egyszer még a lépés végén. [Wikipedia](#).

	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?

	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? \Rightarrow nem feltétlenül
- viszont több függvénykiértékeléssel jár

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

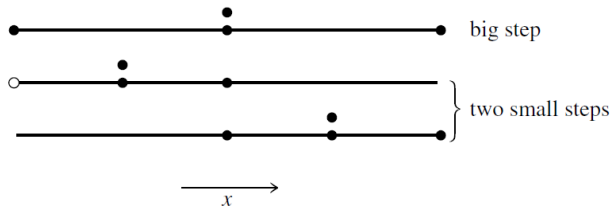
Adaptív lépéshossz-változtatás

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



A két fél-lépés jóval több függvénykiértékelést igényel. Mikor éri meg?

Hasonlítsuk össze a megoldásokat $x_n + 2h$ helyen! Jelölés:

- y_1 : eredmény egy $2h$ lépés használatával
- y_2 : eredmény 2 db h lépés használatával

Tekintsük a végeredmények különbségét

$$\Delta = y_2 - y_1$$

- több koordináta esetén az $y_2 - y_1$ vektor maximális értéke lesz Δ

Az optimális lépéshossz kiválasztása

Elképzelés: megadjuk, hogy Δ legfeljebb mekkora lehet, és ennek megfelelően választunk h -t

Az optimális lépéshossz kiválasztása

Elképzelés: megadjuk, hogy Δ legfeljebb mekkora lehet, és ennek megfelelően választunk h -t

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 adott

Az optimális lépéshossz kiválasztása

Elképzelés: megadjuk, hogy Δ legfeljebb mekkora lehet, és ennek megfelelően választunk h -t

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 adott

Hogyan használhatjuk?

- ha $\Delta_1 > \Delta_0$: \Rightarrow mennyivel kell csökkenteni h_1 -t, hogy megismételve a **jelenlegi** lépést elérjük a kívánt pontosságot
- ha $\Delta_1 < \Delta_0$: \Rightarrow mennyivel növelhetjük h -t a **következő** lépés számolásában

Előnye

- nem kell előre megbecsülni a lépéshosszt, azt a módszer automatikusan meghatározza
- 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 belassul

Az együtthetők meghatározása nehéz és hosszadalmas

- az RK4-re a levezetést lásd pl Wikipedia-n
- általában különböző (rendű) RK-ra az együtthetők egy ún. Butcher-táblában adják meg
- RK4 táblázata:

0				
$\frac{1}{2}$		$\frac{1}{2}$		
$\frac{1}{2}$		0	$\frac{1}{2}$	
1		0	0	1
<hr/>				
		$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$
		$\frac{1}{6}$		$\frac{1}{6}$

- az RK módszer egy általános, sokféle problémára alkalmazható módszer
- speciális feladatok esetén illetve ha a megoldásról van valami előtudás, akkor található ennél optimálisabb módszer is