Differenciálegyenletek, szimulációk

A fizika numerikus módszerei I.

mf1n1a06- mf1n2a06

Csabai István

A differenciálegyenletek matematikai és fizikai jelentése

$$\frac{dx}{dt} = f(x,t) \qquad \frac{dx}{dt} = ax$$

- függő (x) és független (t) változó : tetszőleges t-nél kereshetjük a megoldást
- Egyenletek + kezdeti feltételek, peremfeltételek
- Matematika: függvény-egyenlet
- Fizika: a természet léptetési algoritmusa

$$\Delta x / \Delta t = f(x,t)$$

$$x_{n+1} = x_n + \Delta t * f(x_n, t_n)$$

Differenciálegyenletek típusai

- Elsőrendű – magasabb rendű : hányadik derivált

$$\frac{dy}{dt} = -3t^2 y + t^9 + y^7 \qquad \frac{d^2y}{dt^2} + \lambda \frac{dy}{dt} = -3t^2 \left(\frac{dy}{dt}\right)^4 + t^9 y(t)$$

- Lineáris – nemlineáris: a függő változó és deriváltjainak kitevője

$$\frac{dy}{dt} = g^3(t) y(t) \qquad \frac{dy}{dt} = \lambda y(t) - \lambda^2 y^2(t)$$

- Közönséges – parciális: egy vagy több független változó

$$\frac{dx}{dt} = a x(t) \qquad \frac{\partial x(t,u)}{\partial t} + \frac{\partial x(t,u)}{\partial u} = a x(t,u)$$

Magasabb-rendű egyenletek átalakítása

Példa: 2-od rendű közönséges diff. egy:

$$\frac{d^2y}{dx^2} + q(x)\frac{dy}{dx} = r(x)$$

Új változó bevezetésével:

$$z(x) = dy/dx$$

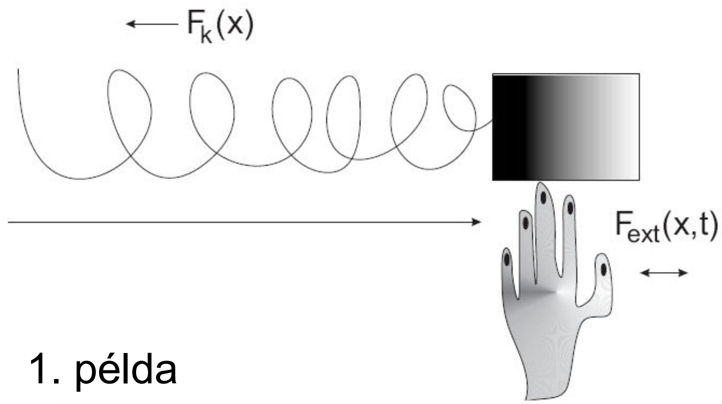
Két darab elsőrendű egyenletből álló
Differenciál egyenlet rendszerré alakítható:

$$\frac{dy}{dx} = z(x)$$
$$\frac{dz}{dx} = r(x) - q(x)z(x)$$

Általános alak:

$$\frac{dy_i(x)}{dx} = f_i(x, y_1, \ldots, y_N), \qquad i = 1, \ldots, N$$

Példa: oszcillátor



$$F_k(x) + F_{\text{ext}}(x,t) = m\frac{d^2x}{dt^2}$$

- 1. példa

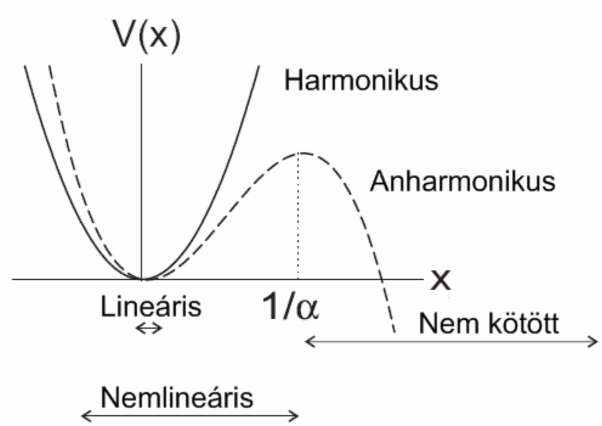
$$V(x) \simeq \frac{1}{2}kx^2\left(1 - \frac{2}{3}\alpha x\right)$$

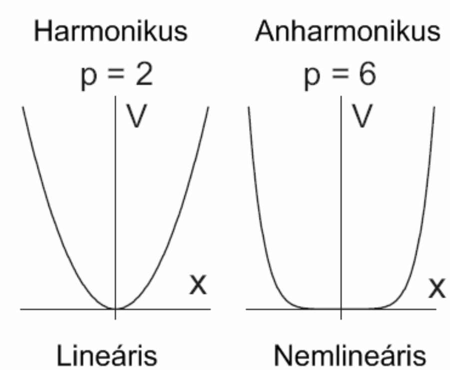
$$F_k(x) = -\frac{dV(x)}{dx} = -kx(1-\alpha x) = m\frac{d^2x}{dt^2}$$

- Harmonikus, ha $\alpha x \ll 1$
- 2. példa (p páros)

$$V(x) = \frac{1}{p}kx^p$$

$$F_{\text{ext}}(x,t) - kx^{p-1} = m\frac{d^2x}{dt^2}$$





Más tudományok

- Populációdinamika: Lotka-Volterra
  - x: nyulak; y: rókák;

$$\frac{dy}{dt} = -y(\gamma - \delta x) \qquad \frac{dx}{dt} = x(\alpha - \beta y)$$

- Kémiai reakciók
  - a,b,c: reagensek; k: reakció álladók

$$\left.\begin{array}{l} A + B \underset{2}{\overset{1}{\leftrightarrows}} X \\ X + B \xrightarrow{3} R + S \end{array}\right\} \Longrightarrow A + 2\,B \longrightarrow R + S$$

$$\begin{aligned} \partial_t a[t] &= -k_1\, a[t]\, b[t] + k_2\, x[t] \\ \partial_t b[t] &= -k_1\, a[t]\, b[t] + k_2\, x[t] - k_3\, b[t]\, x[t] \\ \partial_t x[t] &= k_1\, a[t]\, b[t] - k_2\, x[t] - k_3\, b[t]\, x[t] \end{aligned}$$

- Geometriai Brown-mozgás

$$dX_t = \mu X_t dt + \sigma X_t B_t$$

- Részvény-opciók árazása: Black-Scholes formula
  - S:részvény; μ: hozam; σ: volatilitás

$$dS_t = \mu S_t\, dt + \sigma S_t\, dW_t$$

- Különböző jelenségek – ugyanazon matematikai leírás

Megoldás

- Analitikus megoldás a differenciálegyenletek nagyon kis hányadára (többnyire a legegyszerűbbekre) van
  - Közelítő alak, linearizálás
  - Numerikus megoldás, „diszkrét szimuláció”

Numerikus megoldás: Euler formula

- Infinitezimális folytonos differenciálokról véges diszkrét differenciákra térünk át (a differenciálás definíciójának megfordítása)

$$\frac{dx}{dt} = f(x,t) \qquad \frac{\Delta x}{\Delta t} = f(x,t)$$

$$\Delta x = \Delta t \, f(x,t)$$

- Diszkrét lépésekben értékeljük ki az egyenletet

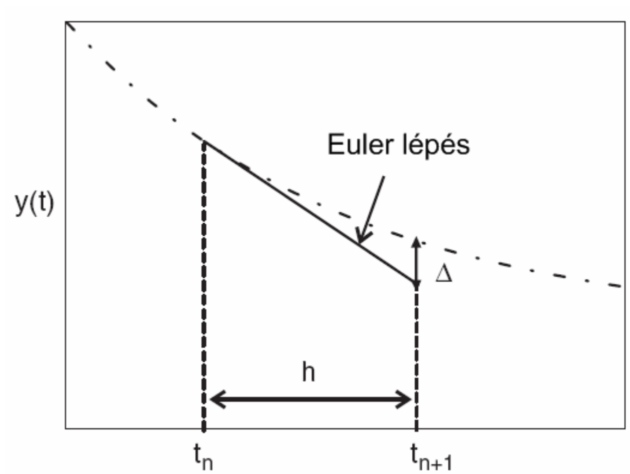
$$t_0 + n\Delta t \equiv t_n \qquad x(t_n) \equiv x_n \qquad x_{n+1} - x_n = \Delta x$$

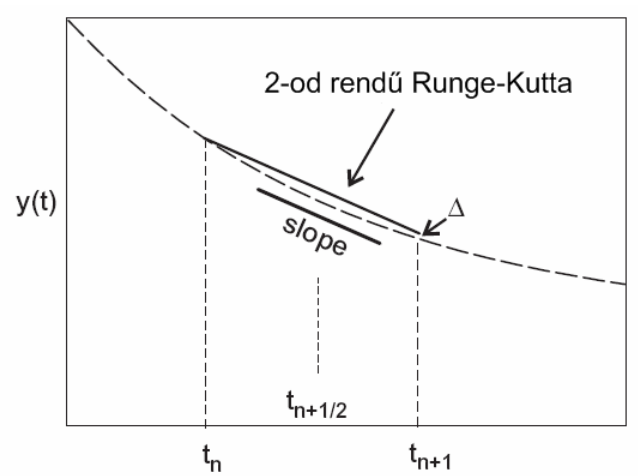
$$x_{n+1} = x_n + \Delta t \, f(x_n, t_n)$$

Euler formula

$$\frac{dx}{dt} = f(x,t) \quad \Longrightarrow \quad x_{n+1} = x_n + \Delta t f(x_n, t_n)$$

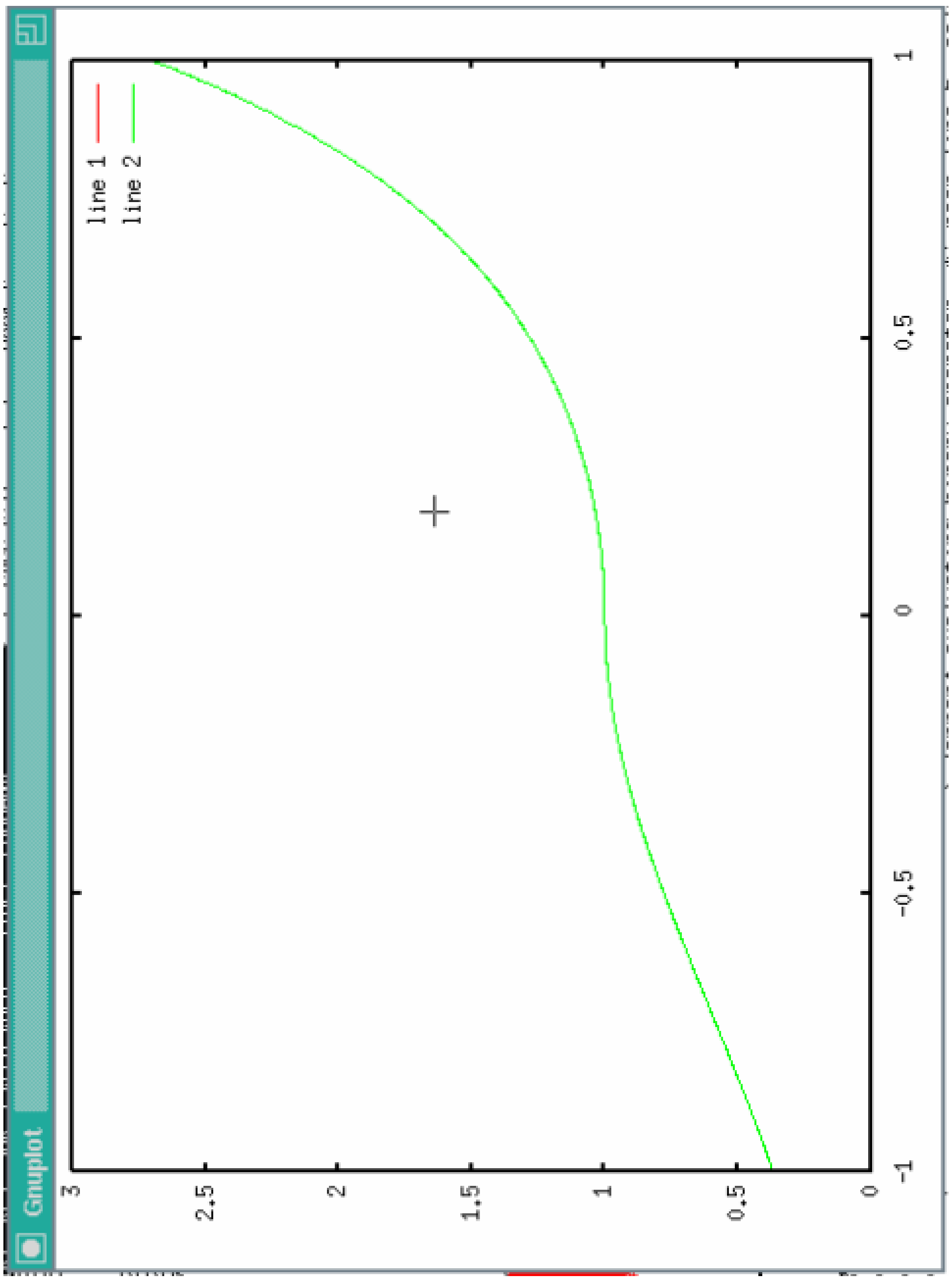
- Nem egzakt, a pontosság függ
  - lépéshossztól (Δt)
  - formulától (explicit/implicit Euler, Runge-Kutta, stb.)
  - differenciálegyenlet alakjától
- Számolási pontatlanságok, kerekítési hibák
- Dilemma: lépések nagysága
  - Kis lépések: pontosabb
  - Nagy lépések: gyorsabb
  - Adaptív lépéshossz változtatás
- Vannak más, pontosabb formulák is





Közönséges differenciálegyenletek megoldása octave-al

```
function xdot = f(x,t)
  xdot = 2*abs(t)*x;
end

x0 = exp(-1);
t = linspace (-1, 1, 1000);
x = lsode ("f", x0, t);
% exact solution
y = exp(t.*t.* sign(t));
plot(t,x, t,y)
```



Gnuplot
line 1
line 2
3
2.5
2
1.5
1
0.5
0
-1
-0.5
0
0.5
1

Paraméterek

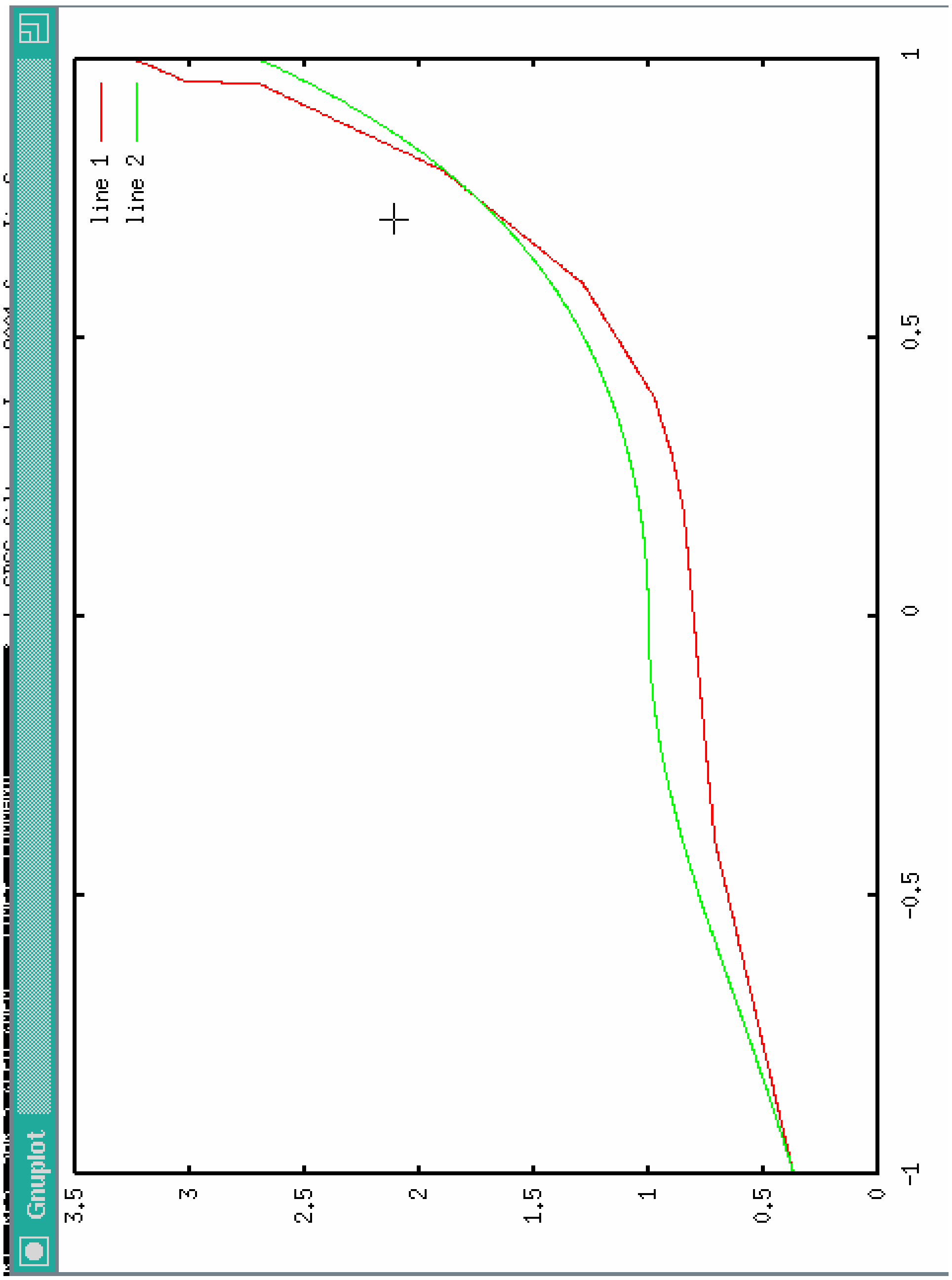
- **lsode_options** (*opt, val*)

- **"absolute tolerance"**
- **"relative tolerance"**
  - abs (local error in x(i)) <= rtol * abs (y(i)) + atol(i)

- **"integration method"**
  - **"adams"**
  - **"non-stiff"**
  - **"bdf"**
  - **"stiff"**

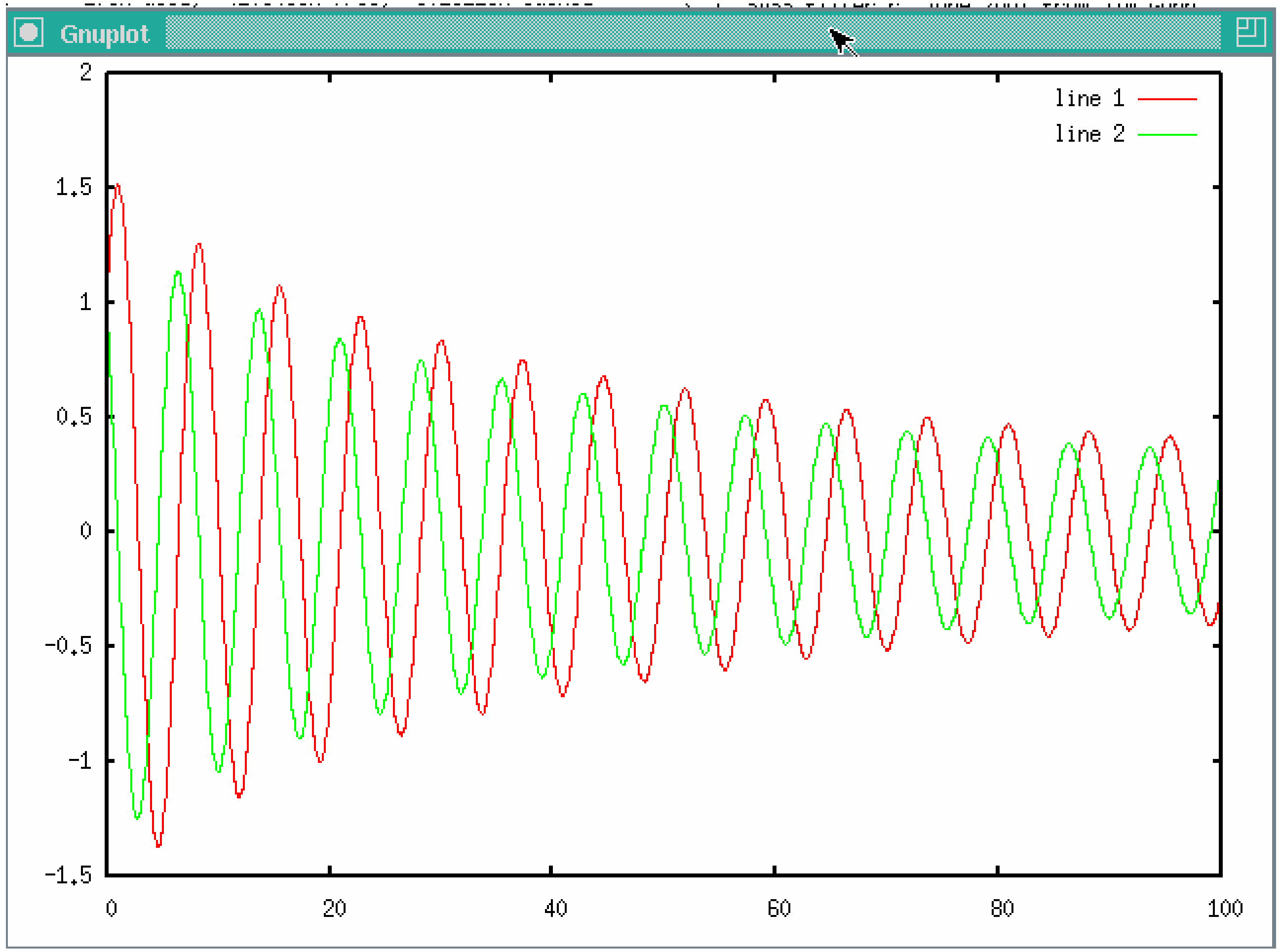
- **"initial step size"**
- **"maximum order"**
- **"maximum step size"**
- **"minimum step size"**
- **"step limit"**

```
lsode_options("relative tolerance", 0.5);
x = lsode ("f", x0, t);
plot(t,x, t,y)
```


Gnuplot
line 1
line 2
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3
3.5
-1
-0.5
0
0.5
1

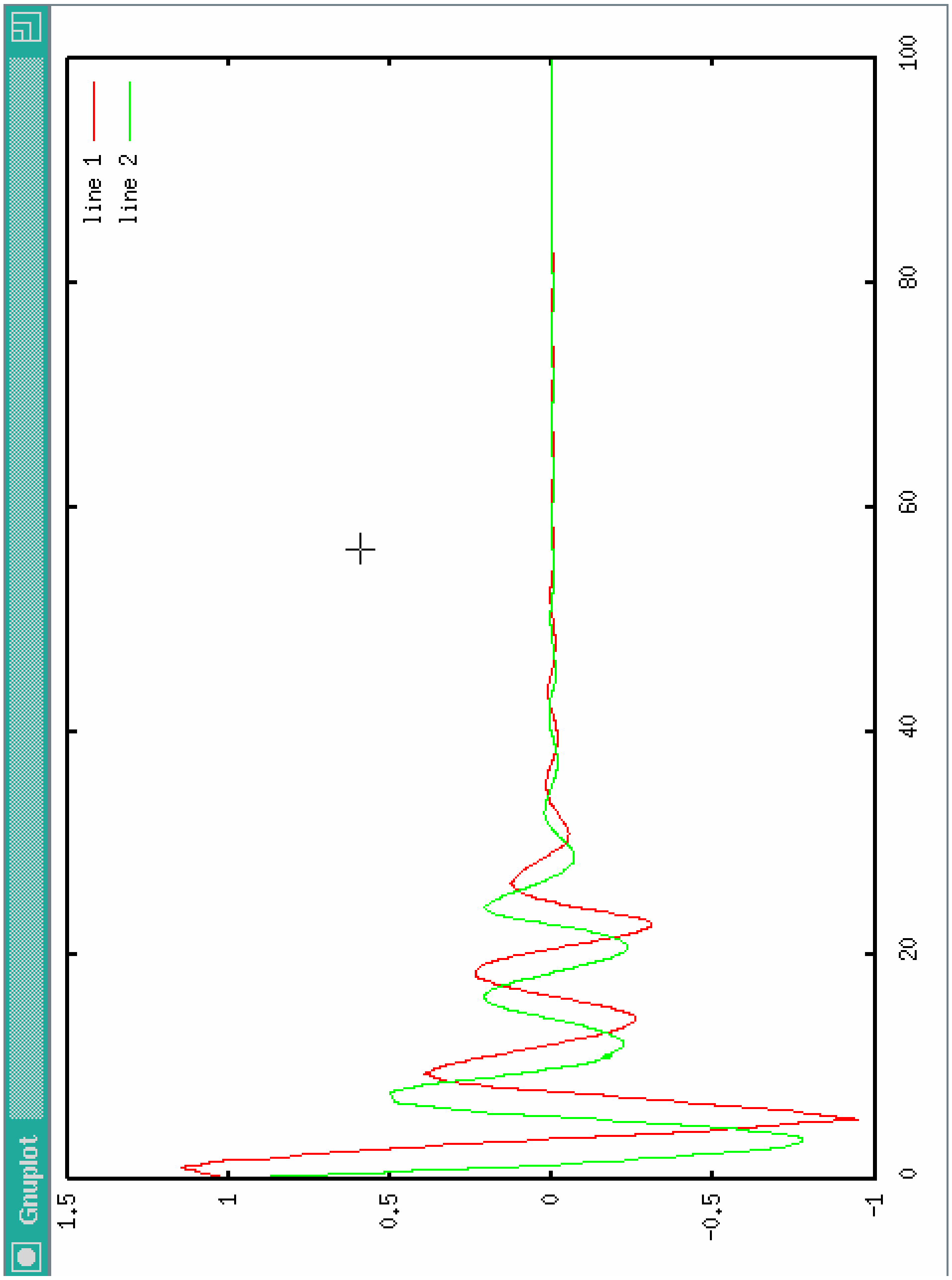
Több változó: pl. csillapított rezgőmozgás

```
function xdot = f(x,t)

  %rugoallando
  k=3;
  %csillapitas
  c=0.2;
  %tomeg
  m=4;
  % kiteres: x(1) ; sebesseg: x(2)
  xdot = zeros (2,1);
  xdot(1) = x(2);
  xdot(2) = (-k/m*x(1)-c/m*sign(x(2))*x(2)^2);
end

x0 = [1,1];
t = linspace (0, 100, 1000);
x = lsode ("f", x0, t);
plot(t,x)
```


Gnuplot
line 1
line 2
2
1.5
1
0.5
0
-0.5
-1
-1.5
0
20
40
60
80
100

Numerikus „disszipáció”

```
lsode_options("relative tolerance", 0.5);
x = lsode ("f", x0, t);
plot(t,x)
```


Gnuplot
line 1
line 2
1.5
1
0.5
0
-0.5
-1
0
20
40
60
80
100

Érzékenység a kezdeti paraméterekre

parameters σ = 10, b = 8/3, r = 28

$$\frac{d}{dt}\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma(y_2 - y_1) \\ r y_1 - y_2 - y_1 y_3 \\ y_1 y_2 - b y_3 \end{bmatrix}$$