



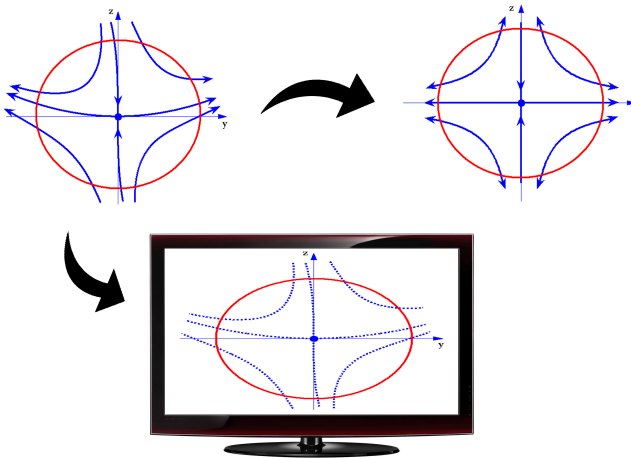
Nemlineáris dinamikus rendszerek

Garay Barna

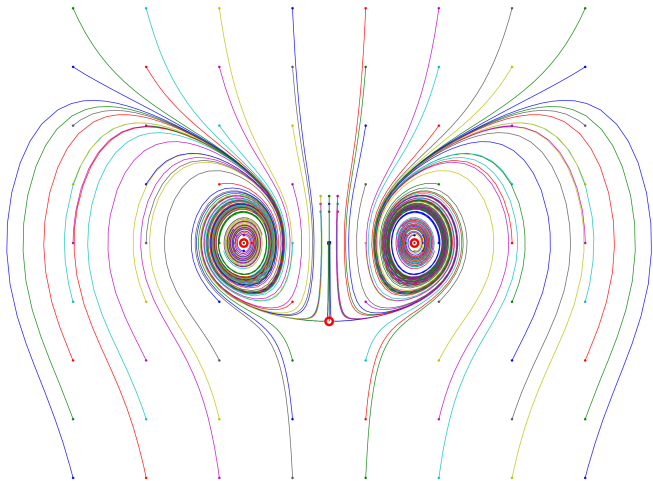
PPKE



Numerikus dinamika dióhéjban



1. ábra: Linearizálás és diszkretizálás nyeregpont körül



2. ábra: Valódi-e a kobra pupillája?

Alapvető megfontolások és molekuláris dinamika

Minden feladat–osztálynak megvan
a feladat méretétől is függő
"saját" numerikus módszere

Általános feladat:

$$\dot{x} = f(x), \quad x(0) = x_0 \in \mathbb{R}^d$$

$\varphi : [0, h_0] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ Általános módszer:

$$x_{k+1} = \varphi(h, x_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots \Leftrightarrow X = \varphi(h, x)$$

φ_E explicit Euler módszer

$$X = \varphi_E(h, x), \quad \text{ahol } X = x + hf(x)$$

φ_I implicit Euler módszer

$$X = \varphi_I(h, x), \quad \text{ahol } X = x + hf(X)$$

A számítógép részére az implicit Euler módszer mint az $X = x + hf(X)$ fixpont-egyenletből származó

$$X_0 = x, \quad X_{\ell+1} = x + hf(X_\ell), \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

iteráció egy megfelelően választott l_* indexű X_{l_*} tagja adható meg.

Elegendően kicsiny h lépésköz mellett az $X = x + hf(X)$ fixpont-egyenletnek pontosan egy X^* megoldása van — nevezetesen $X^* = \varphi_I(h, x)$ — és $X_\ell \rightarrow X^*$ ha $\ell \rightarrow \infty$, egy nullához tartó mértani sorozat sebességével.

A $V : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ potenciális erőterhez tartozó Newton egyenlet

$$\ddot{x} + V'(x) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad (\text{PN}) \quad \begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = -V'(x) \end{cases}$$

φ_S szemi-implicit Euler módszer

$$\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \varphi_S \left(h, \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right), \quad \text{ahol} \quad \begin{cases} X = x + hy \\ Y = y - hV'(x + hy) \end{cases}$$

φ_V Verlet módszer

$$\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \varphi_S \left(h, \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right), \quad \text{ahol} \quad \begin{cases} X = x + hy - \frac{h^2}{2} V'(x) \\ Y = y - \frac{h}{2} V'(x) - \frac{h}{2} V'(X) \end{cases}$$

A (PN) feladat $\Phi : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d, (t, \binom{x}{y}) \rightarrow \Phi(t, \binom{x}{y})$ pontos megoldásai megőrzik

- ▶ az $\frac{y^2}{2} + V(x) = \frac{y_0^2}{2} + V(x_0)$ energiát
- ▶ a fázisportré \mathbb{R}^2 síkján értelmezett $dy dx$ területet

A (PN) feladathoz tartozó fenti két speciális módszer mindegyike — a $\det(J) \equiv 1$ azonosság szerint, ahol $J = \frac{\partial(X,Y)}{\partial(x,y)}$ — megőrzi a $dy dx$ területet.

Mindkét módszer mögött a deriváltak különbségi hányadosokkal történő közelítése áll:

$$\left. \begin{aligned} \frac{X-x}{h} &= y \\ \frac{Y-y}{h} &= -V'(X) \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow \begin{cases} X = x + hy \\ Y = y - hV'(x + hy) \end{cases}$$

de Verlet módszerénél az y koordinátában egy fél lépésközt is közbeiktatunk, majd az $y_f \approx y \left(\frac{h}{2}\right)$ segédváltozót (nagy szerencse, hogy ezt meg lehet tenni) kiküszöböljük:

$$\left. \begin{aligned} \frac{X-x}{h} &= y_f \\ \frac{y_f-y}{h/2} &= -V'(x) \\ \frac{Y-y_f}{h/2} &= -V'(X) \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow \begin{cases} X = x + hy_f \\ y_f = y - \frac{h}{2}V'(x) \\ Y = y_f - \frac{h}{2}V'(X) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} X = x + hy - \frac{h^2}{2}V'(x) \\ Y = y - \frac{h}{2}V'(x) - \frac{h}{2}V'(X) \end{cases}$$

Az inga/hajóhinta $\ddot{x} + \sin(x) = 0$ egyenletét oldjuk meg, az $x(0) = \frac{\pi}{2}$, $\dot{x}(0) = 0$ kezdeti feltétellel. Maga az egyenlet természetesen (PN) típusú és $V(x) = 1 - \cos(x)$. (Elvben lehetne akár $V(x) = -\cos(x)$ is, de a szabad konstansot érdemes úgy választani, hogy a $H(x, y) = \frac{y^2}{2} + V(x)$ összenergia lehetséges minimuma — az inga alsó egyensúlyi helyzetében — zérus legyen.) A kezdeti feltételt/állapotot úgy választottuk, hogy az onnan induló pontos megoldás energiája egységnyi legyen.

Hat MATLAB kísérletet végeztünk, az energiát mindig a megfelelő numerikus megoldás mentén vizsgálva a $[0, T]$ idő-intervallumon. A lépésköz h (és a lépések N számával $T = Nh$). Emlékeztetünk arra, hogy ϕ_E , ϕ_I , ϕ_S és ϕ_V rendre az explicit Euler módszert, az implicit Euler módszert, a szemi-implicit Euler módszert és a Verlet módszert jelentik.

Íme a numerikus eredmények:

#	módszer	h	T	$\frac{y_k^2}{2} + V(x_k)$ ha $0 \leq kh \leq T$
1	ϕ_E	0.001	100	monoton nő 1 és 1.068... között
2	ϕ_E	0.001	1000	monoton nő 1 és 1,70... között
3	ϕ_I	0.001	100	monoton fogy 1 és 0.934... között
4	ϕ_I	0.001	1000	monoton fogy 1 és 0.46... között
5	ϕ_S	0.1	10000	oszcillál 0.957 és 1.045 között
6	ϕ_V	0.1	10000	oszcillál 0.998 és 1.000... között

Lehet csodálkozni. Jóllehet a Táblázat sokkoló jellegét részben a fázistér kétdimenziós volta okozza, a belőle levonható következtetések általában is érvényesek: EGY NUMERIKUS MÓDSZER CSAK AKKOR LEHET IGAZÁN HATÉKONY, HA

- ▶ figyelembe veszi a megoldandó feladat belső, kvalitatív tulajdonságait
- ▶ maximálisan ügyel a fizikára, amelyből a konkrét feladat származik

Célfeladathoz tehát célprogram tartozik. De ahhoz, hogy a számítógépet a valóban éles esetekben is jól tudjuk használni, tudnunk kell, mi van a célprogramok "fekete dobozá"-ban: a konkrét feladat-osztály fizikájától függő hibrid, gondosan konstruált, ám ugyanakkor heurisztikus elemeket is jócskán tartalmazó algoritmusok.

Tétel: (*Ge és Marsden, 1988*) Az a numerikus eljárás, amelyik a (PN) differenciálegyenletek osztályán mind az energiát, mind a területet pontosan megőrzi, nem lehet más, mint a pontos megoldások menti idő-átparaméterezés.

Minden eddigi érvényes marad a hagyományosan, többtest-problémaként felfogott molekuláris dinamika alapegyenletére is:

$$M\ddot{x} + V'(x) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad (\text{MD}) \quad \begin{cases} \dot{x} = M^{-1}y \\ \dot{y} = -V'(x) \end{cases}$$

A $H(x, y) = \frac{1}{2}\langle M^{-1}y, y \rangle + V(x)$ össz-energia itt is Hamilton-függvényt definiál. Az egyenletben $M = M^T$ $d \times d$ méretű és pozitív definit mátrix (az általánosított tömegmátrix), $V : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ a potenciális energia ($V'(x) = \underline{\text{grad}} V(x)$ gradiens-vektorral), $x, y \in \mathbb{R}^d$ az atomi sokaság helyzetre és momentumra vonatkozó kanonikus koordinátái.

Hogy tételiesen mit lehet jelenleg kiszámolni:

- ▶ a Naprendszer nyolc nagy bolygójának és négy legfontosabb kisbolygójának (utóbbiak közé sorolva a Plútót is) helyzete az időben előre és hátra hatvanmillió évig. Ennél jóval hosszabb időtartamot is lehetne számolni, ha a kiindulási adatokat (azaz a Naprendszer mostani állapotát) pontosabban lehetne kimérni–megállapítani
- ▶ egy 126 vas–atomból álló kristályrács — amelynek egyik középső helye "üresen maradt" — telítődésének dinamikája (abban az értelemben, hogy a kívülről érkező 127–edik vas–atom hogyan alakítja ki a stabil kristályszerkezetet)
- ▶ az alanin–dipeptid (egy 23 atomból álló fehérje–darabka) és az őt körülvevő négyszáz vízmolekula tér–idő dinamikája

Az elméletileg biztos általános hibabecslés

Bevezető megjegyzés: Az elméletileg biztos általános hibabecslésnél a gyakorlatban több is, kevesebb is igaz.

Ami a lényegét illeti, a közönséges differenciálegyenletek pontos megoldása — amennyiben véges hosszúságú időintervallumra vonatkozik — a kezdeti kicsiny mérési hibákat nem tudja túlságosan felnöveszteni. Ugyanez igaz (amennyiben a diszkretizációs lépésközt elegendően kicsinynek választhatjuk) a numerikus–közelítő megoldásokra is.

A hibanövekedés általában az idő exponenciális függvénye. A digitális számítógépekben elkerülhetetlen számábrázolási és kerekítési hibák külön megfontolásokat igényelnek.

Definíció: Legyen $p > 0$ egész szám és $h_0 > 0$. A $\phi : [0, h_0] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ leképezés p -edrendű egy lépéses diszkretizációs operátor az $\dot{x} = f(x)$ egyenletre, ha alkalmas $K = K(f) > 0$ konstanssal

$$|\Phi(h, x) - \phi(h, x)| \leq Kh^{p+1} \quad \forall h \in [0, h_0] \quad \forall x \in \mathbb{R}^d .$$

A diszkretizációs operátor iterálása a módszer maga:

$$x_k = \phi^k(h, x_0) \quad \Leftrightarrow \quad x_{k+1} = \phi(h, x_k) , \quad k = 0, 1, 2, \dots .$$

Természetesen azzal a feltevéssel élünk, hogy az f függvény és a h lépésköz ismeretében $\phi(h, x)$ ténylegesen és hatékonyan kiszámítható.

Az elsőrendű módszereket leszámítva a számítógép a diszkretizált megoldást ténylegesen meghatározó véges x_0, x_1, \dots, x_N pontsorozatot nem töröttvonallal, hanem egymáshoz símán csatlakozó polinomdarabkákból álló ún. Bézier–spline–okkal kapcsolja össze: így a számítógép képernyőjén egy, a pontos megoldást (reményeink szerint jól) közelítő görbe jelenik meg.

Tétel: Tetszőleges p -edrendű egylépéses módszerre, a $[0, T]$ intervallumot N egyenlő részre osztva:

$$|\phi^k(h, x) - \Phi(kh, x)| \leq \frac{K}{L} e^{LT} h^p \quad \forall h \in (0, h_0] \quad \forall x \in \mathbb{R}^d, \quad k = 0, 1, \dots, N.$$

Itt a lépésköz $h = \frac{T}{N}$, az L állandó pedig az

$$|f(t, x) - f(t, \tilde{x})| \leq L \cdot |x - \tilde{x}| \quad \forall x, \tilde{x} \in \mathbb{R}^d$$

Lipschitz feltételben szereplő Lipschitz konstans.

Definíció: Az $\dot{x} = f(x)$, $x(0) = x_0$ kezdetiérték-feladat $h \in (0, h_0]$ lépésközzel vett r alappontú p -edrendű Runge–Kutta diszkretizációs operátora minden olyan $\phi_{RK} : [0, h_0] \times \mathbb{R}^d$, $x \rightarrow X = \phi_{RK}(h, x)$ leképezés, amelyre az f függvénytől és magától a módszertől is függő $K = K(f) > 0$ konstanssal teljesül az

$$|\Phi(h, x) - \phi_{RK}(h, x)| \leq Kh^{p+1} \quad \forall h \in [0, h_0] \quad \forall x \in \mathbb{R}^d$$

egyenlőtlenség, s amelyet az

$$X = x + h \sum_{i=1}^r b_i z_i, \quad \text{ahol } z_i = f \left(x + h \sum_{j=1}^r a_{ij} z_j \right), \quad i = 1, 2, \dots, r$$

összefüggések szerint a b_i , $i = 1, 2, \dots, r$ és az a_{ij} , $i, j = 1, 2, \dots, r$ alkalmasan megválasztott valós számok határoznak meg.

Egy Runge–Kutta módszer pontosan akkor *explicit*¹ ha
 $a_{ij} = 0 \quad \forall j \geq i, i, j = 1, 2, \dots, r.$

Elsőrendű : ϕ_E, ϕ_I, ϕ_S (!) Másodrendű : $\phi_{\theta=\frac{1}{2}}, \phi_V$ (!)

¹az elnevezés arra utal, hogy a (z_1, z_2, \dots, z_r) vektor a koordinátánkénti természetes sorrendben az

$$z_i = f \left(x + h \sum_{j=1}^r a_{ij} z_j \right), \quad i = 1, 2, \dots, r$$

egyenletrendszer által explicite meghatározott. Az általános esetben ezt az egyenletrendszert (amelynek jobb oldala $0 < h \ll 1$ esetén az $\mathbb{R}^{rd} = \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \times \dots \times \mathbb{R}^d$ (r -tényezős) szorzattéren kontrakciót határoz meg) az implicit Euler módszer mintájára iterációval kell megoldanunk

A legfontosabb kvalitatív szempontok

- ▶ Elemi példák valódi és hamis periodikus megoldásokra
- ▶ A kerekítési/számábrázolási hibák egy strukturált következménye
- ▶ Jóslási időhorizont és Ljapunov exponens

A nagyméretű, konkrét feladatok jól bevisznek minket a málnásba.

- ▶ Az árnyékolási (shadowing) lemma
- ▶ Takens: "Egy mérés általában elég"
- ▶ Intervallumos programozás

Elemi példák valódi és hamis periodikus megoldásokra

$$\left. \begin{aligned} \dot{x} &= \mu x + y - x(x^2 + y^2) \\ \dot{y} &= -x + \mu y - y(x^2 + y^2) \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow \left\{ \begin{aligned} \dot{r} &= \mu r - r^3 \\ \dot{\varphi} &= -1 \end{aligned} \right.$$

Periodikus megoldás sugara

$$r = \sqrt{\mu}, \quad \text{már amennyiben } \mu > 0$$

Explicit Euler módszer invariáns körének sugara

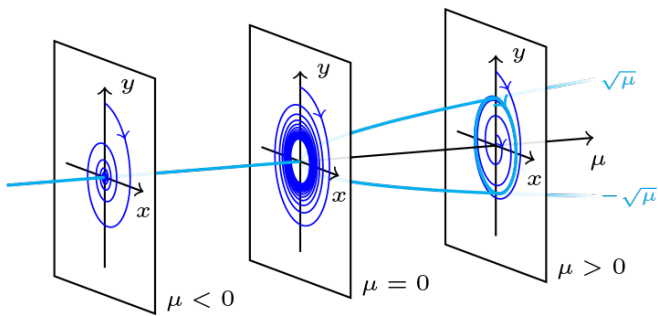
$$(r^2(h))_{1,2} = \frac{1 + h\mu \pm \sqrt{1 - h^2}}{h} \approx \begin{cases} \mu + 2/h & \text{szellem} \\ \mu + h/2 & \text{árnyék} \end{cases}$$

Implicit Euler módszer invariáns körének sugara

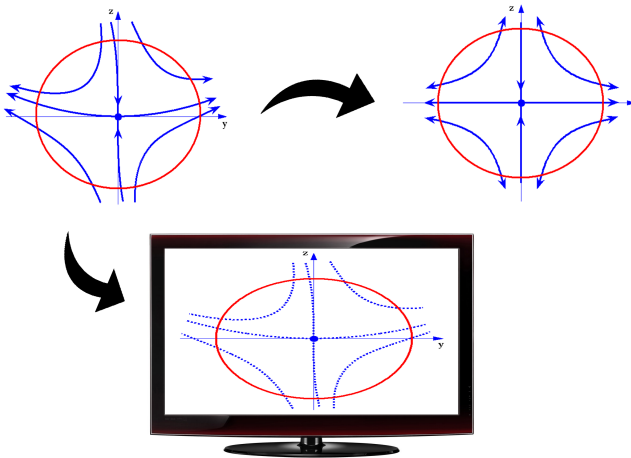
$$(r^2(h))_{1,2} = \frac{-1 + h\mu \pm \sqrt{1 - h^2}}{h} \approx \begin{cases} \mu - h/2 & \text{árnyék} \\ \mu - 2/h & \text{szellem} \end{cases}$$

Az egyenlet numerikus megoldásában a h lépésköz mint diszkretizációs paraméter összeolvad az eredeti μ paraméterrel: a periodikus pálya nem a $\mu > \mu_{crit} = 0$ értékekre jelenik meg, hanem a $\mu > \mu_{numcrit,explEuler} = -\frac{1}{2}h$ (illetve a $\mu > \mu_{numcrit,implEuler} = \frac{1}{2}h$) értékekre.

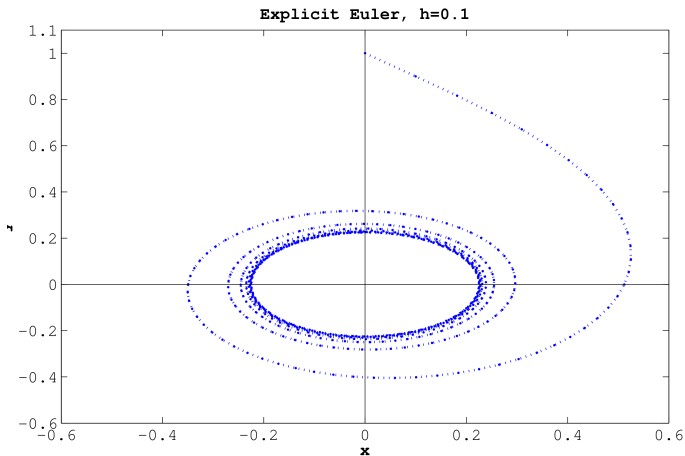
Ezzel együtt a paraméterezett egyenletcsalád egészének viselkedése a diszkretizáció során nem változik: az origó a paraméter növekedésével — egy, a $\mu_{crit} = 0$ paraméterértékhez közeli $\mu_{numcrit}$ paraméterértéknél — elveszti stabilitását, a stabilitás egy invariáns körvonalra tevődik át.



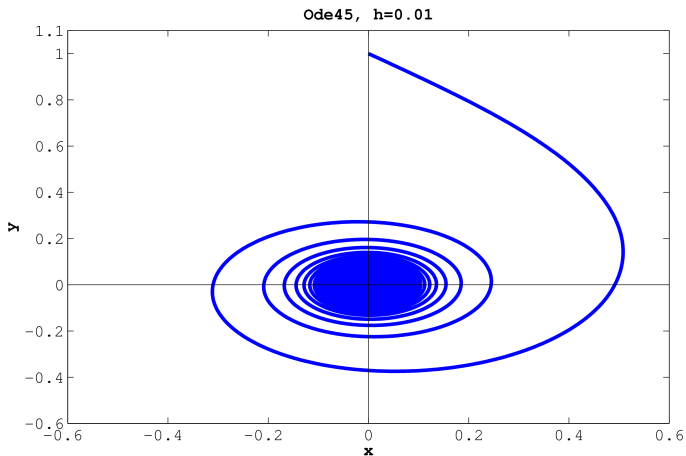
3. ábra: A Hopf bifurkáció egésze numerikusan is strukturálisan stabil



4. ábra: Strukturális stabilitás \Rightarrow Numerikus strukturális stabilitás



5. ábra: $\ddot{x} + x = 0$: baj van az elfajult esetben



6. ábra: $\ddot{x} + x = 0$: a strukturális stabilitás hiánya bajjal jár

$$\left. \begin{aligned} \dot{x} &= y + xf(\sqrt{x^2 + y^2}) \\ \dot{y} &= -x + yf(\sqrt{x^2 + y^2}) \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow \left\{ \begin{aligned} \dot{r} &= rf(r) \\ \dot{\varphi} &= -1 \end{aligned} \right.$$

Periodikus megoldás sugara

$f(r) = 0$, az $f(r) = (r - r_0)^2$ példa esetén roppant kényes

Explicit Euler módszer invariáns körének sugara

$$(f(r))_{1,2} = \frac{-1 \pm \sqrt{1 - h^2}}{h} \approx \begin{cases} -h/2 & \text{a példában üres} \\ -2/h & \text{a példában üres} \end{cases}$$

Implicit Euler módszer invariáns körének sugara

$$(f(r))_{1,2} = \frac{1 \pm \sqrt{1 - h^2}}{h} \approx \begin{cases} 2/h & \text{a példában szellem} \\ h/2 & \text{a példában dupla árnyék} \end{cases}$$

Legyen T egy $\mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ homogén lineáris transzformáció.

Az $\dot{x} = f(x)$ differenciálegyenlet szimmetrikus a T transzformációra, ha

$$f(Tx) = Tf(x) \quad \forall x \in \mathbb{R}^d.$$

A feladat szimmetriája a megoldás-operátor szimmetriájával ekvivalens, sőt *tisztességes* diszkretizációk esetén a numerikus diszkretizáció-operátor szimmetriájával is:

$$\Phi(t, Tx) = T\Phi(t, x) \quad \forall (t, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d,$$

$$\phi(h, Tx) = T\phi(h, x) \quad \forall (h, x) \in [0, h_0] \times \mathbb{R}^d.$$

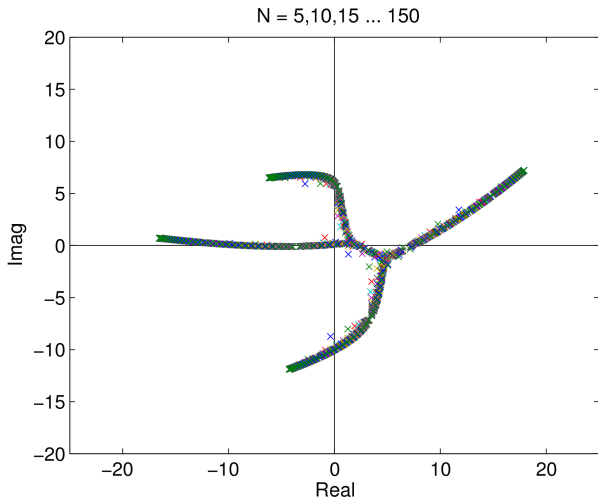
A kerekítési hibák egy strukturált következménye

A numerikus hibák nem mindig zaj jellegűek. A számábrázolási és kerekítési hibák hihetőnek tűnő, de teljességgel hamis struktúrához vezetnek.

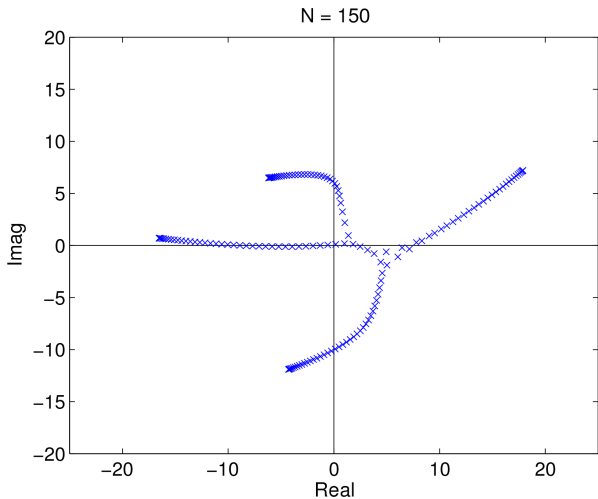
Ezek egyike a *Trefethen bálna*, a növekvő méretű Trefethen mátrixok sajátértékei által meghatározott rajzolat a komplex síkon. A Trefethen mátrixok komplex elemű sávmátrixok, amelyeket a 8×8 méretű T_8 Trefethen mátrix mintájára képezhetünk.

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & i & 3+2i & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 10 & 0 & 1 & i & 3+2i & -1 & 0 & 0 \\ 3+i & 10 & 0 & 1 & i & 3+2i & -1 & 0 \\ 4 & 3+i & 10 & 0 & 1 & i & 3+2i & -1 \\ i & 4 & 3+i & 10 & 0 & 1 & i & 3+2i \\ 0 & i & 4 & 3+i & 10 & 0 & 1 & i \\ 0 & 0 & i & 4 & 3+i & 10 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & i & 4 & 3+i & 10 & 0 \end{pmatrix}$$

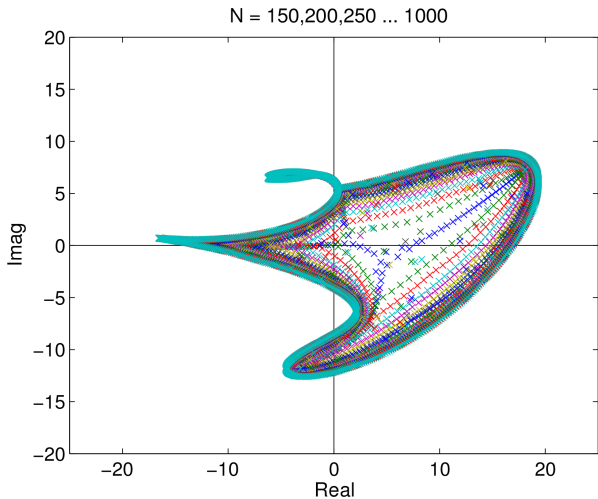
A T_N Trefethen mátrix az $N = 8$ esetben.



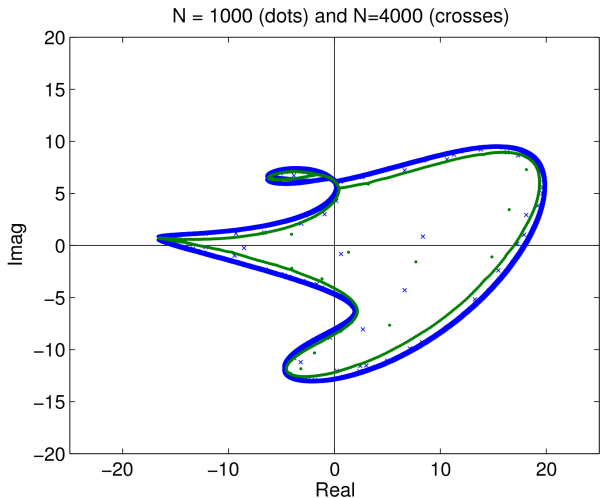
7. ábra: $15 \leq N \leq 150$ MATLAB "Csontváz" : T_N sajátértékei



8. ábra: $N = 150$ MATLAB "Csontváz" : T_N sajátértékei



9. ábra: $150 \leq N \leq 1000$ MATLAB "Bálya" : T_N sajátértékei



10. ábra: $N = 1000$, $N = 4000$ MATLAB "Bálya" : T_N sajátértékei

A "Bálna", jóllehet függ a mögöttes sajátérték–kereső számítógépes program finom részleteitől is (belső tolerancia–beállítások, az egyes változók bit hosszúsága etc.), stabil alakzatként jelenik meg. Az elenyészően kevés számú zavaró sajátérték numerikus zajnak tűnik.

Ezzel együtt a "Bálna" csak virtuálisan létezik. A sajátértékek $\sigma(T_N)$ halmazainak tényleges — matematikailag bizonyított — $N \rightarrow \infty$ határhelyzete enyhén görbített éllekké síkba–rajzolt, hat csúcspontú fa–gráf, amely lényegében azonos az $N = 150$ "Csontváz"–zal.²

²Az absztrakt matematika pontosan meg tudja indokolni a "Bálna" mint szellem létezését. A részletes indoklás A. Böttcher és B. Silbermann *Introduction to Large Truncated Toeplitz Matrices* (Springer, Berlin, 1998) könyvének mintegy felét teszi ki.

Jóslási időhorizont és Ljapunov exponens

Ha a $\lambda_{L_{jap}}$ Ljapunov exponens pozitív, akkor az $\dot{x} = f(x)$ differenciálegyenlet közeli trajektóriái egymástól exponenciális gyorsasággal távolodnak. Mindez a kiindulási adatok $\Delta > 0$ hibájánál sokkal jobban korlátozza kiszámíthatóságot.

Ha a $[0, T]$ időintervallum $T > 0$ végpontjában legfeljebb $\varepsilon > 0$ hibát engedünk meg, akkor a

$$\Delta e^{\lambda_{L_{jap}} T} \approx \varepsilon \quad \Rightarrow \quad T \approx \frac{1}{\lambda_{L_{jap}}} \ln \left(\frac{\varepsilon}{\Delta} \right)$$

összefüggésnél jobbat nem kaphatunk. Ez a *jóslási időhorizont*, amin túl minden szimulációs eredmény jó eséllyel már csak szellem.

Ha például $\varepsilon = 10^{-3}$ és $\Delta = 10^{-7}$, akkor $T \approx \frac{1}{\lambda_{Ljap}} 4 \ln(10)$.

Ha most a kezdeti értékeket valami csoda folytán $\Delta = 10^{-7}$ helyett $\Delta = 10^{-13}$ hibával sikerül meghatároznunk, akkor $T \approx \frac{1}{\lambda_{Ljap}} 10 \ln(10)$.³⁴

³A Ljapunov exponens tényleges értéke ide vagy oda, azt látjuk, hogy a kezdeti állapotra vonatkozó mérési hibahatár egymilliomod-részre történő, $10^{-7} \rightarrow 10^{-13}$ megváltoztatása a jóslási időhorizontot mindössze két és félszeresére növeli.

⁴Többek között ezért lehetetlen, hogy a várható időjárást 4–5 napnál hosszabb távlatban valaha is (belátható időn belül) nagy biztonsággal meg lehessen jósolni.

Az árnyékolási (shadowing) lemma

Legyen $\emptyset \neq M \subset \mathbb{R}^d$ kompakt attraktora az $\dot{x} = f(x)$ differenciálegyenletnek, $A(M)$ vonzási tartománnyal. Tegyük fel, hogy az M halmaz tisztességesen kaotikus⁵ — a maximális Ljapunov exponens fogalmát is ebben a kontextusban vezettük be.

Az árnyékolási lemma azt mondja ki, hogy a tisztességesen kaotikus esetben minden egyes konkrétan kiszámolt trajektória árnyék, nem pedig szellem. A bökkenő csak az, hogy a tisztességes kaotikusság feltételeit abszolút biztonsággal szinte soha nem lehet ellenőrizni.

5

ezt az elnevezést csak házi használatra vezetjük be

a pontos



Legyen x_0 az $A(M)$ egy tetszőleges, számítógépünk aritmetikájában ábrázolható pontja, és tekintsünk azt az \mathbb{R}^d -beli $x_0, \tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \dots$ pontsorozatot, amelyet a számítógép az $\dot{x} = f(x)$, $x(0) = x_0$ kezdetiérték-probléma közelítő megoldásaként produkál.

Az alkalmazott ϕ diszkrétizációs módszer a számítógépen adaptív lépésköz-szabályozással fut, mi csak a maximális h_0 lépésközt írhatjuk elő. Amit ténylegesen kapunk, az a $\tilde{x}_0 = x_0$,

$$\tilde{x}_{k+1} = \tilde{\phi}(\mu, h_{k+1}, \tilde{x}_k) \quad \text{pontosorozat, } k = 0, 1, 2, \dots$$

ahol μ a számábrázolás aktuális pontossága, h_1, h_2, \dots pedig a lépésközök sorozata.

Lemma: Tetszőlegesen adott $\varepsilon > 0$ esetén van olyan $\mu^* > 0$, $h^* > 0$ és olyan $x^* \in \mathbb{R}^d$, továbbá olyan $0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots$ időpont-sorozat, hogy $0 < \mu \leq \mu^*$ és $0 < h \leq h^*$ mellett

$$t_k < t_{k+1} < t_k + 2h_0 \quad \text{és} \quad |\tilde{x}_k - \Phi(t_k, x^*)| < \varepsilon, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

A számítógép olyan közelítő megoldást produkál, amely előre adott $\varepsilon > 0$ hibával megegyezik egy valódi, pontos megoldással⁶

⁶Csakhogy ez a valódi, pontos megoldás nem az $x(0) = x_0$ kezdeti értékből indul ki, hanem egy ahhoz közeli x^* kezdeti értékből, amely mentén az időt át kell paraméterezni. Világos módon t_k ($k > 0$) és $\sum_1^k h_j$ a pontos, illetve a közelítő dinamikában eltelt időt mérik.

Takens: "Egy mérés általában elég"

Takens attraktor–rekonstrukciós tétele azt mondja ki, hogy egy kompakt, kaotikus attraktor jellemezhető bármely megfigyelhető adatának egyetlen, elég hosszú ideig tartó mérésével, például egyetlen megoldás egyetlen koordináta–függvényének viselkedése alapján.⁷

Egy Práter utcai informatika PhD dolgozat a Takens tétel idősoros változatát epilepsziás betegek EEG jeleihez tartozó kaotikus attraktorok keresésére használta. És mindezt hét és nyolc dimenzióban. Hogy a tényleges dimenzió mekkora, az a nagy és nyitott kérdések egyike. Az időkésleltetés $T_* > 0$ paraméterét arra az értékre szokás beállítani, ahol a jel autokorrelációja minimális.

⁷A jellemzés geometriai és a mérések geometriai többségére érvényes. A tisztességesen kaotikusságot továbbra is jó feltételeznünk.

Hogy egészen konkrét legyek, az *El Niño* jelenség

$$\left. \begin{aligned} \dot{x} &= By - C(x + p) \\ \dot{y} &= xz - y \\ \dot{z} &= -xy - z + 1 \end{aligned} \right\}, \text{ ahol } B = 102, C = 3, p = 0.83$$

alakú Vallis modelljének (ez lényegében egy aszimmetrikus Lorenz rendszer) kaotikus attraktorát az $(x(t), y(t), z(t))$ megoldás első, $x(t)$ koordináta-függvényéből képzett

$$\{(x(t), x(t - T_*), x(t - 2T_*)) \in \mathbb{R}^3 \mid t \geq 0\}$$

térgörbe az $(x(0), y(0), z(0)) = (x_0, y_0, z_0) \in \mathbb{R}^3$ kezdeti feltételek és a $T_* > 0$ időkésleltetés (time-lag) paraméter tetszőleges választása mellett 1-valószínűséggel jól jellemzi.

Intervallumos programozás

Minden számítógépes programnak van olyan változata, amely nem pontszerű számokkal, hanem intervallumokkal dolgozik.

Az intervallumok határpontjai a számítógép elektronikája által pontosan reprezentálható (diadikus racionális) számok. Ha a bemenő adatok $x \in [1, 2]$ és $y \in [3, 4]$, akkor az alapműveletek eredményei

$$x \in [1, 2] \text{ és } y \in [3, 4] \Rightarrow \begin{cases} x + y \in [4, 6] \\ x - y \in [-3, -1] \\ xy \in [3, 8] \\ \frac{x}{y} \in [\frac{1}{4}, \frac{2}{3}], \end{cases}$$

ahol a $\frac{2}{3}$ szám az IEEE szabvány szerinti kifelé kerekítéssel, mint nála picivel nagyobb diadikus racionális szám nyer ábrázolást.

Az alpműveletekhez hasonlóan az elemi függvényeknek is vannak intervallumos változatai: ha $[x] \subset \mathbb{R}$ intervallum, akkor $\text{SIN}([x])$ a

$$z \in [x] \Rightarrow \sin(z) \in \text{SIN}([x]) \quad \forall z$$

feltételnek megfelelő intervallum. és így tovább ... minden, valós számokkal dolgozó programnak létezik intervallumos változata.

A futási idő hossza nagyjából ötvenszeresére nő meg ezáltal. Cserébe viszont garantáltan pontos eredményt kapunk, intervallumos formában, a tényleges eredményre biztosan igaz alsó és felső becslésekkel.

Az intervallumos programozás a *számítógéppel segített bizonyítások az analízisben* alpmódszere: a kifejtett káosz létezésének matematikai bizonyítására máig sincsen hatékonyabb módszer ennél.

Számítógéppel segített bizonyítások természetesen az algebrában és a kombinatorikában (például a négyszínsejtésre adott Appel–Haken bizonyítás) is léteznek.⁸⁹

⁸Ha egy feladat (nem egész típusú számokkal történő) számítógépi számításokat igényel, akkor a teljes matematikai szigorúsághoz az összhiba worst-case analízisére van szükség: az intervallumos programozás ezt a feladatot is a számítógépre bízta.

⁹Számos mérnöki feladat is van, amelyben a lehetséges maximális hiba nagyságát pontosan kell ismerni: repülőgépgyártás (R.E. Moore, aki az első intervallumos programot írta, a Boeing gyár mérnöke volt — nem tévesztendő össze G.E. Moore-ral, aki az Intel alapítóinak egyike, és akiről a Moore törvényt elnevezték.)