A JEGYZETBŐL ÁTVÉVE:

1. Megjegyzés. *Az*

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

differenciálegyenlet megoldásait lényegében csak akkor tudjuk konkrét képlettel kiszámolni, ha az egyenlet állandó együtthatós (homogén vagy inhomogén) lineáris illetve szétválasztható:

- $f(t,x) = Ax + b(t)$
- $d = 1$ *és* $f(t,x) = g(t) \cdot h(x)$
- *valamint a fenti két típus „rokonsága”*

Numerikus, közelítő eljárások természetesen mindig rendelkezésre állnak.

Az $\lambda^3 - 2 = 0$ egyenlet nem oldható meg "pontosan": már a $\sqrt[3]{2}$ kiszámolása is numerikus módszert igényel.

A számítógépek elterjedésével a matematika részint experimentális tudománnyá vált. *Numerikus módszerek nélkül egy tapodtat se!*

KIEGÉSZÍTÉS A FENTIEKHEZ:

Egy–egy példa szétválasztható, illetve arra visszavezethető differenciálegyenletre — egyúttal igazán szép számolási gyakorlatok[1]:

1.) Párhuzamos fénysugarakat egyetlen pontba visszaverő forgásfelület — Parabola–tükör

2.) A légnyomás függése a tengerszint feletti magasságtól

`parabola` **1. Példa.** Keresendő olyan $y = y(x)$ függvény, amelynek grafikonja az x tengellyel párhuzamos, jobbról érkező fénysugarakat a teljes visszaverődés törvénye szerint a koordinátarendszer $O = (0,0)$ origójába gyűjti össze.

Először kiszámoljuk, hogy az $y = y(x)$ *görbét a* $P = (x, y(x))$ *pontban érintő egyenes hol metszi a vízszintes tengelyt:*

$$\left.\begin{array}{l} Y - y(x) = y'(x)(X - x) \\ Y = 0 \end{array}\right\} \quad \Rightarrow \quad X = -\frac{y(x)}{y'(x)} + x \, .$$

Tehát a kérdéses metszéspont $M = (X, 0)$*, ahol (amint azt a fenti képlet is kifejezi) a metszéspont első,* X *koordinátája mind az* $y = y(x)$ *görbe, mind*

[1]magukat a megoldandó differenciálegyenleteket is levezetjük — sokkal több, mint a középiskolás fizika, nem kell egyikhez sem

a P pont első, x koordinátájának függvénye. Mivel a beesési szög megegyezik a visszaverődés szögével, az MPO háromszög egyenlő szárú. (Ha jó ábrát készítünk, akkor azon négy darab egyforma szöget látunk, köztük párhuzamos szárú és váltószögeket. A fizika ezzel be is fejeződött, a geometriából még egy kis lépés van hátra.) Az M és az O pontoknál lévő szögek egyenlősége miatt az MO és az OP szakaszok hossza megegyezik egymással:

$$|-\frac{y(x)}{y'(x)}+x|=\sqrt{y^2+x^2}\,.$$

Ami ezután jön, már csak számolás — természetesen a matematikai analízis alapművelete, a differenciálás már a kiinduláskor jelen volt, amikor is az érintő egyenes $m = m(x)$ meredekségét mint az $y'(x)$ deriváltat határoztuk meg.

Négyzetre–emelés és egyszerűsítések után lehetőség nyílik egy új, $z = z(x)$ ismeretlen függvény bevezetésére:

$$\left(\frac{y}{y'}\right)^2-2x\,\frac{y}{y'}=y^2 \quad\Leftrightarrow\quad {y'}^2y+2y'x-y=0\,,$$

$$y'=\frac{-x+\sqrt{y^2+x^2}}{y} \quad\Leftrightarrow\quad y'y+x=\sqrt{y^2+x^2}\,.$$

A legutolsó, szokatlan lépéshez kifejezetten jó matematikai érzékre van szükség. A $z=y^2+x^2 \;\Leftrightarrow\; z(x)=y^2(x)+x^2$ helyettesítés azonnal célba ér és egy fekvő, jobbfelé nyitott parabola egyenletéhez vezet:

$$\frac{z'}{2}+z=0 \quad\Rightarrow\quad \int\frac{dz}{2\sqrt{z}}=\int dx \quad\Rightarrow\quad \sqrt{z}=x+c$$

$$\Rightarrow\quad y^2+x^2=(x+c)^2 \quad\Rightarrow\quad y^2=2cx+c^2\,.$$

(Ez valóban parabola egyenlete, amint azt az $x=\frac{1}{2c}y^2-\frac{c}{2}$ illetve az $y^2+x^2=(x-(-c))^2$, $c>0$ képletek bármelyike mutatja. Ez utóbbi közvetlenül utal a definícióra: a parabola azon pontok mértani helye, amelyek adott egyenestől és adott ponttól [az $x=-c$ egyenletű vezéregyenestól és az $0=(0,0)$ fókuszponttól] egyenlő távolságágra vannak. A $c\neq 0$ kikötés mindenképpen szükséges, a $c<0$ esetet a "jobbról érkező fénysugarak" feltétellel zártuk ki, a számolásokban pedig a gyökvonás előjelenek megválasztásával vettük figyelembe.)

A "tankönyvi megoldás" nem egy, hanem két egymás utáni számolási lépést igényel, éspedig a $z=\frac{y}{x} \;\Rightarrow\; y'=z'x+z$ új változó bevezetését valamint[2]

[2] a sinus és a cosinus hyperbolicus függvényekre az angol nyelvű szakirodalomban szokásos jelöléseket alkalmazva

a $z = \sinh(u)$ & $dz = \cosh(u)\,du$ *helyettesítéses integrálást:*

$$y' = \frac{-1 + \sqrt{(\frac{y}{x})^2 + 1}}{\frac{y}{x}} \quad \Leftrightarrow \quad z'x + z = \frac{-1 + \sqrt{z^2 + 1}}{z} \,,$$

$$z'x = \frac{-z^2 - 1 + \sqrt{z^2 + 1}}{z} \quad \Leftrightarrow \quad \int \frac{z\,dz}{z^2 + 1 - \sqrt{z^2 + 1}} = -\int \frac{dx}{x} \,.$$

A baloldalon álló integrálban a helyettesítést elvégezve

$$\int \frac{z\,dz}{z^2 + 1 - \sqrt{z^2 + 1}} = \int \frac{\sinh(u)\cosh(u)\,du}{\sinh^2(u) + 1 - \cosh u} = \int \frac{\sinh(u)\,du}{\cosh(u) - 1}$$

adódik, és itt a számlálóban a nevező deriváltja áll. Így az eredmény

$$\ln(\cosh(u) - 1) = -\ln(x) + c_1 \quad \Leftrightarrow \quad \cosh(u) - 1 = \frac{e^{c_1}}{x} \quad \Leftrightarrow \quad \cosh(u) - 1 = \frac{c_2}{x}$$

ami a $\cosh(\sinh(z)) = \sqrt{1 + z^2} = \sqrt{1 + (\frac{y}{x})^2}$ *visszahelyettesítés után a már ismert*

$$\sqrt{1 + (\frac{y}{x})^2} - 1 = \frac{c}{x} \quad \Leftrightarrow \quad \sqrt{y^2 + x^2} = x + c \quad \Leftrightarrow \quad y^2 = 2cx + c^2$$

alakra egyszerűsödik.

`pressure` **2. Példa.** Keresendő a $p = p(x)$ légnyomás mint a tengerszint feletti $x \geq 0$ magasság (egyváltozós, idealizált) függvénye.

Tekintsünk egy függőleges, henger alakú légoszlopot, amelynek keresztmetszete legyen $A > 0$. *A tengerszint felett* $x \geq 0$ *magasságban erre a vízszintes keresztmetszetre*

$$F(x) = Ap(x)$$

nyomóerő hat, amely az arra nehezedő,

$$m(x) = A \int_x^\infty \rho(h)\,dh$$

tömegű levegőréteg súlyából származik:

$$F(x) = m(x) \cdot g \,.$$

Magától értetődően $\rho = \rho(h)$ *a levegő sűrűsége* $h \geq 0$ *magasságban. Eddig a makrofizikai megfontolások.*

A nyomás magyarázata mikroszinten a levegőmolekulák véletlenszerű ütközéseinek statisztikus, átlagolt kiértékelése, mely szerint alkalmas $k > 0$ konstanssal

$$p(x) = k \cdot \rho(x) \quad \forall\ x \geq 0 \qquad \Leftrightarrow \qquad p(h) = k \cdot \rho(h) \quad \forall\ h \geq 0\,.$$

Ez az intuitíve is jól érthető összefüggés azt mondja ki, hogy a levegő nyomása egyenesen arányos annak sűrűségével.

A többi már csupán matematika. A fenti összefüggéseket egymással kombinálva az $A > 0$ paraméter kiesik:

$$p(x) = \int_x^\infty p(h)\, dh \cdot \frac{g}{k} \quad \forall\ x \geq 0\,.$$

Mindkét oldal x szerinti deriváltját véve, az $a = \frac{g}{k} > 0$ jelöléssel

$$p'(x) = -ap(x) \quad \forall\ x \geq 0 \qquad \Rightarrow \qquad p(x) = p(0)e^{-ax} \quad \forall\ x \geq 0\,,$$

ahol az eddig elhanyagolt fizikai mértékegységeket is figyelembe véve, a tengerszintre vonatkozó (és a magyarországi átlagos páratartalmú és hőfokú levegőből visszaszámolt) adatok

$$p(0) = 1013\, hPa \approx 10^5\, Pa = 10^5\, \frac{N}{m^2} = 10^5\, \frac{kg}{m \cdot sec^2} \quad , \quad \rho(0) = 1,293\, \frac{kg}{m^3}\,,$$

amelyekből $k = 77339.5\, \frac{m^2}{sec^2}$ valamint $a = 0.000127\, \frac{1}{m}$ (a nehézségi gyorsulás értékét fejből is tudjuk és az a Holt–tenger szintjétől a Mount Everest tetejéig tényleg mindenütt [és minden tankönyvben is] ugyanaz a $g = 9,81\, \frac{m}{sec^2}$.)

Ha a legelején nem is gondoltunk volna rá, utólag mindenképpen világos, hogy a kapott $p(x) = p(0)e^{-ax}$, $x \geq 0$ eredmény számos elhanyagolással terhelt és többféleképpen is finomítható.

NUMERIKUS, SZÁMÍTÓGÉPES MEGOLDÁSOK

KIEGÉSZÍTÉS (A JEGYZET 1.3 ALFEJEZETÉHEZ):

A továbbiakban is az 1.1. Példa differenciálegyenletét vizsgáljuk, de most általános kezdetiérték–feltétellel, és jobban figyelve a feladat mély, belső struktúrárájára. Az

$$\ddot{x}+x=0 \ \& \ x(0)=x_0\,,\dot{x}(0)=y_0 \quad \Leftrightarrow \quad \left\{\begin{array}{l}\dot{x}=y\\ \dot{y}=-x\end{array}\right. \quad \& \left\{\begin{array}{l}x(0)=x_0\\ y(0)=y_0\end{array}\right. \qquad (1) \quad \boxed{\texttt{springinit}}$$

feladatra eddigi három módszer után — gyors emlékeztetőül az explicit Euler, implicit Euler, $\theta=\frac{1}{2}$ (más néven trapéz[3]) módszerek lényege:

$$\left.\begin{array}{l}\frac{X-x}{h}=y\\ \frac{Y-y}{h}=-x\end{array}\right\}, \qquad \left.\begin{array}{l}\frac{X-x}{h}=Y\\ \frac{Y-y}{h}=-X\end{array}\right\}, \qquad \left.\begin{array}{l}\frac{X-x}{h}=\frac{y+Y}{2}\\ \frac{Y-y}{h}=-\frac{x+X}{2}\end{array}\right\}$$

— most lássunk egy negyedik, hibrid módszert:

$$\left.\begin{array}{l}\frac{X-x}{h}=y\\ \frac{Y-y}{h}=-X\end{array}\right\} \quad \Leftrightarrow \quad \left.\begin{array}{l}X=x+hy\\ Y=y-hx-h^2y\end{array}\right\} \qquad (2) \quad \boxed{\texttt{hybrid}}$$

2. Megjegyzés. *Az első egyenletet $(X+x)$–el, a másodikat $(Y+y)$–al szorozva, majd az eredményeket összeadva*

$$\left.\begin{array}{l}X-x=hy\\ Y-y=-hX\end{array}\right\} \quad \Rightarrow \quad \left.\begin{array}{l}X^2-x^2=hyX+hyx\\ Y^2-y^2=-hXY-hXy\end{array}\right\}$$

$$\Rightarrow \quad X^2+Y^2+hXY=x^2+y^2+hxy\,,$$

és ennek mind a fizika, mind a numerika szempontjából fontos jelentése van. Konkrét példánkban a negyedik, hibrid módszer az energiát nem őrzi meg, de a kicsivel módosított majdnem–energiát igen. Az $\frac{1}{2}(y^2+x^2)$ tényleges energia mint fizikai invariáns helyébe egy/az attól (legalábbis a $0<h\ll 1$ esetben) alig különböző $\frac{1}{2}(y^2+x^2+hxy)$ numerikus invariáns lép. A fázisportrén a pontos megoldások $y^2+x^2=const$ körei helyett a diszkretizált megoldások az azokat jól közelítő $y^2+x^2+hxy=const$ ellipszis–család tagjain helyezkednek el. Az ellipszisek centruma az origó, a nagytengelyek a -45, a kistengelyek a $+45$ fok irányában állnak.

[3] A trapéz módszer — az explicit és az implicit Euler módszerekkel részleges ellentétben — nem a derivált, hanem az integrál numerikus közelítésén alapul:

$$\text{ha} \quad \dot{x}=y\,, \quad \text{akkor} \quad x(h)-x(0)=\int_0^h y(s)\,ds\approx h\,\frac{y(0)+y(h)}{2} \quad \Leftrightarrow \quad X-x\approx h\,\frac{y+Y}{2}\,.$$

A (2) jobb oldalán definiált $\mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$, $\binom{x}{y} \to \binom{X}{Y}$ leképezés Jacobi mátrixa és ennek determinánsa az $\mathbb{R}^2$ sík tetszőleges $\binom{x}{y}$ pontjában

$$J = \frac{\partial(X,Y)}{\partial(x,y)} = \begin{pmatrix} 1 & h \\ -h & 1-h^2 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \det(J) \equiv 1\,,$$

a $h \in [0, h_0]$ lépésköz mint paraméter bármely értékénél. A negyedik, hibrid módszer tehát megőrzi a területet (amelyet egyébként — jóllehet "véletlenül" — a $\theta = \frac{1}{2}$ módszer is megőriz, az explicit Euler módszer megnövel, az implicit Euler módszer módszer pedig csökkent).

Célfeladathoz célprogramot: speciális szerkezetű egyenlethez speciális algoritmust

Az (1) kezdetiérték–feladat a Newton második törvényét potenciális erőtérben leíró

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

differenciálegyenletek családjához tartozik. A (PN) differenciálegyenletek két különleges tulajdonsággal rendelkeznek:

- pontos megoldások mentén az $E(x,y) = \frac{y^2}{2} + V(x)$ energia megőrződik
- az idő múlása a fázisportrén/fázissíkon megőrzi a területet

A $H(x,y) = \frac{y^2}{2} + V(x)$ Hamilton–függvény, esetünkben az energia megmaradása a pontos megoldások dinamikájának jól ismert tulajdonsága, amelyet matematikailag az összetett függvény deriválási szabálya igazol:

$$\frac{d}{dt} H(x(t), y(t))\big|_{(\mathrm{PN})} = (H'_x \cdot \dot{x} + H'_y \cdot \dot{y})\big|_{(\mathrm{PN})} = V'(x)\cdot y + y \cdot (-V'(x)) = 0\,.$$

Ennél jóval nehezebb igazolni, hogy a pontos megoldások dinamikájában a terület is változatlan marad: ez Liouville egy tételének speciális esete (és a $\mathrm{div}\binom{y}{-V'(x)}$ divergencia azonosan nulla voltával egyenértékű)[4]. Ezen a ponton

[4] Az Olvasó a részletekért fellapozhatja a jegyzet 50–edik oldalát: a lényeg az (1.27) formula.

A területtartásra egy közvetlen bizonyítást is vázolunk: a $\dot{\Phi}(t,x,y) = \Psi(t,x,y)$, $\dot{\Psi}(t,x,y) = -V'(\Phi(t,x,y))$ formulákat kell csak az x valamint az y változók szerint egyszer–egyszer parciálisan deriválni, majd $J(0) = I$ per definitionem és $\frac{d}{dt}J(t) \equiv 0$: minden kiesik, direkt számolás a megfelelő visszahelyettesítésekkel.

már világos kell legyen, hogy a H Hamilton–függvény és a $2d$–dimenziós térfogat invarianciája az általános, Hamilton típusú $\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial y}(x,y)$, $\dot{y} = -\frac{\partial H}{\partial x}(x,y)$ (ahol $x, y \in \mathbb{R}^d$) dinamikákban is teljesül.

A szemi–implicit Euler módszert a (PN) feladatok osztályán szokás definiálni, mint a

$$\phi_S : [0,h_0] \times \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2 \ , \ \phi_S\left(h, \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}\right) = \begin{pmatrix} x + hy \\ y - hV'(x+hy) \end{pmatrix}$$

leképezést, amely mögött természetesen most is a deriváltak különbségi hányadosokkal történő közelítése áll:

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

A $V(x) = \frac{x^2}{2}$ speciális esetben a (2) képletet kapjuk vissza.

1. Lemma. *A (PN) differenciálegyenletek osztályán a rögzített $h \in [0, h_0]$ lépésközzel vett szemi–implicit Euler módszer megőrzi a területet.*

Bizonyítás. Azt kell igazolnunk, hogy $\det(J) \equiv 1$. Valóban,

$$J = \frac{\partial(X,Y)}{\partial(x,y)} = \begin{pmatrix} 1 & h \\ -hV''(x+hy) & 1 - hV''(x+hy) \cdot h \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \det(J) \equiv 1 \, ,$$

s már készen is vagyunk. □

A Verlet (más néven Störmer–Verlet) módszert a (PN) feladatok osztályán szokás definiálni, mint a

$$\phi_V : \left(h, \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}\right) \to \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x + hy - \frac{h^2}{2}V'(x) \\ y - \frac{h}{2}V'(x) - \frac{h}{2}V'\left(x + hy - \frac{h^2}{2}V'(x)\right) \end{pmatrix}$$

leképezést. Verlet módszere mögött is a deriváltak különbségi hányadosokkal történő közelítése áll, de az y koordinátában most 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:

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

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

Ez az egyszerűsítési lehetőség vezetett el a $\phi_V : [0, h_0] \times \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$ Verlet módszer általunk is használt, teljesen explicit definíciójához.

Az egymás utáni $t_k = kh$, $k = 0, 1, 2, \dots$ időpillanatokhoz tartozó $x_k \approx x(kh)$, $y_k \approx y(kh)$ és a $t_{k+1/2} = \left(k + \frac{1}{2}\right) h$ időpillanathoz tartozó $y_{k+1/2} \approx y(t_{k+1/2})$ közelítő értékekre az első látásra implicitnek tűnő

$$\left.\begin{array}{l} \frac{x_{k+1}-x_k}{h} = y_{k+1/2} \\ \frac{y_{k+1/2}-y_k}{h/2} = -V'(x_k) \\ \frac{y_{k+1}-y_{k+1/2}}{h/2} = -V'(x_{k+1}) \end{array}\right\} \quad \Leftrightarrow \quad \left.\begin{array}{l} x_{k+1} = x_k + hy_{k+1/2} \\ y_{k+1/2} = y_k - \frac{h}{2}V'(x_k) \\ y_{k+1} = y_{k+1/2} - \frac{h}{2}V'(x_{k+1}) \end{array}\right\}$$

rekurzió tartozik, amely azonban az

$$\left.\begin{array}{l} x_{k+1} = x_k + hy_k - \frac{h^2}{2}V'(x_k) \\ y_{k+1} = y_k - \frac{h}{2}V'(x_k) - \frac{h}{2}V'(x_k + hy_k - \frac{h^2}{2}V'(x_k)) \end{array}\right\}, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

explicit rekurzióvá, ha úgy tetszik, közvetlenül programozható utasítás–sorozattá szelídül.

2. Lemma. *A (PN) differenciálegyenletek osztályán a rögzített $h \in [0, h_0]$ lépésközzel vett Verlet módszer megőrzi a területet.*

Bizonyítás. Azt kell igazolnunk, hogy $\det(J) \equiv 1$. Valóban,

$$J = \frac{\partial(X,Y)}{\partial(x,y)} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{h^2}{2}V''(x) \equiv \frac{\partial X}{\partial x} & h \\ -\frac{h}{2}V''(x) - \frac{h}{2}V''(X) \cdot \frac{\partial X}{\partial x} & 1 - \frac{h}{2}V''(X) \cdot h \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad \det(J) = \frac{\partial X}{\partial x} + \frac{h^2}{2}V''(x) \equiv 1$$

amit bizonyítani akartunk. □

Mind a szemi–implicit, mint a Verlet módszer megőrzi tehát a (PN) differenciálegyenletre vonatkozó két megmaradási törvény egyikét: a fázisportrén/fázissíkon a terület a numerikus megoldás során sem változik. Az energiát a két módszer egyike sem őrzi meg[5], de még ha viszonylag nagy lépésközzel számolunk is, roppant hosszú ideig elképesztően jól közelíti.

[5]ezt nem is nagyon teheti: a Ge–Marsden Tétel azt mondja ki, hogy 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: az (1) egyenletre — szerencsés véletlen! — ezt a $\theta = \frac{1}{2}$ trapéz módszer is megteszi. Az

Itt a legfőbb ideje, hogy konkrét számadatokat is mondjunk.

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	a numerikus energia $t=0$ és $t=T$ között
1	ϕ_E	0.001	100	monoton nő 1 és $1.068\ldots$ között
2	ϕ_E	0.001	1000	monoton nő 1 és $1,70\ldots$ között
3	ϕ_I	0.001	100	monoton fogy 1 és $0.934\ldots$ között
4	ϕ_I	0.001	1000	monoton fogy 1 és $0.46\ldots$ között
5	ϕ_S	0.1	10000	oszcillál 0.957 és 1.045 között
6	ϕ_V	0.1	10000	oszcillál 0.998 és az $1.000\ldots$ között

Az utolsóelőtti kísérletben az oszcillációk összessége sinus–hullám, az utolsó kísérletben ciklois–hullám jellegűek voltak. (Az oszcillációk száma mindkét esetben jó közelítéssel ezer volt.)

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

energia megmaradását már láttuk, ez volt az $X^2+Y^2=x^2+y^2$ összefüggés. A $\det(J)\equiv 1$ terület–megmaradás is egyszerű: az odáig vezető számolás első lépése

$$\left.\begin{aligned} X-\tfrac{h}{2}\,Y &= x+\tfrac{h}{2}\,y \\ Y+\tfrac{h}{2}\,X &= y-\tfrac{h}{2}\,x \end{aligned}\right\} \quad\Leftrightarrow\quad \left.\begin{aligned} X &= \tfrac{1}{1+\frac{h^2}{4}}\left(x+hy-\tfrac{h^2}{4}x\right) \\ Y &= \tfrac{1}{1+\frac{h^2}{4}}\left(y-hx-\tfrac{h^2}{4}y\right) \end{aligned}\right\}.$$

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.

3. Megjegyzés. *Az implicit Euler módszer a számítógép részére természetesen nem adható meg* $\binom{X}{Y} = \binom{x}{y} + h\binom{Y}{-\sin(X)}$ *alakban. Szükség van az* $X = x + hY$, $Y = y - h \cdot \sin(X)$ *egyenletrendszer, illetve az ebből kapott* $X = x + hy - h^2 \sin(X)$ *egyenlet megoldására. Ez utóbbi sem adható meg zárt alakban:* X *pontos értéke helyett meg kell elégednünk annak egy* $\tilde{X}$ *közelítésével. Ha azonban* $\tilde{X}$ *már ismert, akkor* Y *helyett vehetjük annak* $\tilde{Y} = y - h \cdot \sin(\tilde{X})$ *közelítését.*

Feladatunk tehát az $X = x+hy-h^2\sin(X)$ *egyenlet numerikus megoldása, amelyet elegendően kicsiny* h *lépésköz mellett iterációval végezhetünk. Az*

$$\mathcal{F}_{h,x,y} : \mathbb{R} \to \mathbb{R} \quad , \quad X \to \mathcal{F}_{h,x,y}(X) = x + hy - h^2 \sin(X)$$

képlettel definiált egyváltozós valós függvény $\frac{d}{dX}\mathcal{F}_{h,x,y}(X) = -h^2 \cos(X)$ *deriváltja abszolút értékben legfeljebb* $q = h^2$ *lehet. Amennyiben* $q < 1$, *ha tehát* $0 < h \leq h_0 < 1$, *akkor az* $X = x + hy - h^2 \sin(X) \;\Leftrightarrow\; X = \mathcal{F}_{h,x,y}(X)$ *fixpont–egyenletre az iterációs módszer minden további nélkül alkalmazható. Az* $X_{n+1} = \mathcal{F}_{h,x,y}(X_n)$, $n = 0, 1, 2, \ldots$ *sorozat — tetszőleges* $X_0 \in \mathbb{R}$ *kiinduló érték esetén — a fixpontegyenlet egyetlen,* $X = X^* \in \mathbb{R}$ *megoldásához tart. Az iterációt a számítógépes program az* $|X_{n_*} - X_{n_*-1}| < TOL$ *megállási feltétel teljesülésekor fejezi be, és az* X^* *fixpontot a* $\tilde{X} = X_{n_*}$ *értékkel azonosítja. A korábbi analízis tanulmányainkból ismert és tetszőleges kontrakcióra érvényes (az emlékezetet a jegyzet 82–ik oldalán szereplő 2.30 Megjegyzés is frissíti)*

$$|X_n - X^*| \leq |X_1 - X_0| \cdot \frac{q^{n-1}}{1-q} \quad , \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

hibabecslés roppant gyors konvergenciát jelent, ami geometriailag a pókháló–diagramm pár lépés utáni "bekonvergálásával" szemléltethető. Az iterációt a szokásos $X_0 = x$ *értékkel indítva* $|X_1 - X_0| = |hy - h^2 \sin(X_0)| \leq h(|y| + h)$. *Így az* $|y| \leq 10$ *feltétel mellett a* 10^{-12} *pontossághoz a* $h = 0.1$ *illetve* $h = 0.001$ *lépésköz–választással nyolc illetve három iterációs lépés már elegendő.*

Itt jegyezzük meg azt is, hogy a ϕ_E, ϕ_I és a ϕ_θ (a paraméter $0 \leq \theta \leq 1$, $\theta \neq \frac{1}{2}$ értékeire), valamint a ϕ_S módszerek mindegyike elsőrendű, a $\theta = \frac{1}{2}$ trapéz módszer és a ϕ_V módszerek pedig másodrendűek.

Néhány igazán nehéz konkrét feladat

Az általános, $d+d=2d$ dimendimenziós, Hamilton típusú $\dot{x}=\frac{\partial H}{\partial y}$, $\dot{y}=-\frac{\partial H}{\partial x}$ differenciálegyenletek számítógépes megoldását a Verlet módszer és az annak nyomán felfedezett további szimplektikus algoritmusok tették lehetővé. Ezek olyan diszkretizációs eljárások, amelyek a H Hamilton függvény kivételével[6] — amely szinte mindig mint össz–energia interpretálható — az összes fizikailag releváns megmaradó mennyiséget (köztük a $2d$–dimenziós térfogatot) pontosan megőrzik, és az energiát csak kicsit torzítják.

Első példánk egyúttal az egyik legrégebbi is.

3. Példa. *Newton Nap–Föld gravitációs, a többi bolygó hatását elhanyagoló*

$$m\ddot{\mathbf{r}}+\underline{grad}\, V(\mathbf{r})=0\ , \quad \textit{ahol}\ \ V(\mathbf{r})=-\gamma Mm\,\frac{1}{|\mathbf{r}|}\ \ \textit{és}\ \ \underline{grad}\, V(\mathbf{r})=\gamma Mm\,\frac{1}{|\mathbf{r}|^3}\mathbf{r}$$

egyenletében a fázistér az eddigi kettő helyett négydimenziós. Az egyenlet az m tömegű Föld mozgását írja le az M tömegű Nap körül, amely a koordinátarendszer origójában áll, γ a gravitációs állandó, V a gravitációs potenciál. A fizikusi–mérnöki szóhasználat szerint a négy a feladat szabadságfoka, maga a geometriai tér — az $\mathbf{r}=\binom{x}{y}$ pozíció–vektorok tere — kettő dimenziós, az $\dot{\mathbf{r}}=\binom{\dot{x}}{\dot{y}}$ sebesség–vektorok tere szintén. Az energia mellett egy terület is megmarad — ez utóbbi, amint azt már Kepler is megállapította, a pozíció–vektorok geometriai terében: a Föld Nap körüli pályáján egyenlő időközök alatt egyenlő területeket súrol.[7]

Második példánk a hagyományosan, többtest–problémaként felfogott molekuláris dinamika alapegyenlete:

4. Példa.

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

A Hamilton–függvény $H(x,y)=\frac{1}{2}\langle M^{-1}y,y\rangle+V(x)$. Itt $M=M^T$ $d\times d$ méretű és pozitív definit mátrix (az általánosított tömegmátrix), $V:\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}$

[6] a Ge–Marsden Tétel — amelynek az előző lábjegyzetben csak egy síkbeli, speciális esete szerepelt — már eredeti formájában is erre az általános esetre vonatkozott

[7] A szintén Kepler által felismert tény, hogy a Föld ellipszis alakú pályán kering (és hogy a Nap ennek az ellipszisnek az egyik fókuszpontja), ugyancsak levezethető a mozgásegyenletből. A Kepler–féle terület megmaradása mögött az impulzus–momentum, mint fizikai mennyiség megmaradási tétele áll. De amire igazán utalni szeretnék, az az, hogy a Newton második törvényét potenciális erőtérben leíró (PN) differenciálegyenlet vektoros alakban is érvényes, és hogy a rá vonatkozó speciális numerika is végső soron "átmegy" a többféle, közöttük a kvantummechanikai (nemlineáris Schrödinger) általánosítások mindegyikére.

a potenciális energia ($V'(x) = \underline{grad}\, V(x)$ gradiens–vektorral), $x, y \in \mathbb{R}^d$ az atomi sokaság helyzetre és momentumra vonatkozó kanonikus koordinátái.

Az össz–energia megmaradását az alábbi számolás fejezi ki:

$$\frac{d}{dt}H(x(t),y(t))\big|_{(MD)} = \frac{1}{2}\big(\langle M^{-1}\dot{y}, y\rangle + \langle M^{-1}y, \dot{y}\rangle\big) + \langle V'(x), \dot{x}\rangle\big|_{(MD)}$$

$$= \frac{1}{2}\big(\langle M^{-1}\dot{y}, M\dot{x}\rangle + \langle M^{-1}M\dot{x}, \dot{y}\rangle\big) + \langle V'(x), \dot{x}\rangle\big|_{(MD)}$$

(vegyük észre, hogy a kerek zárójelen belüli első tag $\langle M^{-1}\dot{y}, M\dot{x}\rangle = \langle M^T M^{-1}\dot{y}, \dot{x}\rangle = \langle MM^{-1}\dot{y}, \dot{x}\rangle = \langle \dot{y}, \dot{x}\rangle$, ami pontosan a kerek zárójelen belüli második taggal egyenlő. Így azt kapjuk, hogy)

$$\Rightarrow \quad \frac{d}{dt}H(x(t),y(t))\big|_{(MD)} = \langle \dot{y}, \dot{x}\rangle + \langle V'(x), \dot{x}\rangle\big|_{(MD)} = \langle \dot{y} + V'(x), \dot{x}\rangle\big|_{(MD)} = 0.$$

Menet közben az is kiderült, hogy $\frac{\partial H}{\partial y} = M^{-1}y$ és $\frac{\partial H}{\partial x} = V'(x)$.

Hogy tételesen mit lehet jelenleg még biztonságosan kiszámolni, arra állion itt három egészen friss eredmény, amelyeket a 2013 szeptemberi "Scientific Computation and Differential Equations" konferencián hallottam:

- 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

A Naprendszer 60002013–ik évi állapota egyikünket sem érinti közvetlenül, de a másik két példa világos módon utal az ipari alkalmazások lehetőségére a néhány atomnyi vastagságú speciális felületi rétegek kialakításában (a mérnök–informatikus hallgatók nagyobb örömére), illetve új gyógyszerek, a fehérjékhez jól kapcsolódni képes molekulák kifejlesztésében (a biotechnológus hallgatók ugyanúgy gondolhatnak saját magukra).