

Differenciálegyenletek numerikus megoldásai és alkalmazásai

Sáhó Györgyi

Matematika BSc, elemző szakirány

Szakdolgozat

Témavezető:

Valkó Éva

Tanársegéd

Alkalmazott Analízis és Számításmatematikai Tanszék

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar



Budapest, 2017.

Tartalomjegyzék

1. A differenciálegyenlet fogalma	1
2. Bevezető tételek és definíciók	3
3. Egylépéses numerikus módszerek	7
3.1. Taylor-sorba fejtés módszer	7
3.2. Explicit Euler módszer	8
3.3. Implicit Euler-módszer	11
3.4. Crank–Nicolson (Trapéz) módszer	13
4. A-stabilitás	15
4.1. Az Explicit Euler módszer A-stabilitása	16
4.2. Implicit Euler módszer A-stabilitása	17
4.3. A Trapéz módszer A-stabilitása	18
4.4. Egylépéses módszerek összefoglalása	19
5. Runge–Kutta módszerek	20
5.1. Explicit Runge–Kutta módszerek	21
5.2. Másodrendű Runge–Kutta módszerek	22
5.3. Heun-módszer	23
5.4. Negyedrendű Runge–Kutta módszer	24
5.5. Explicitté tett Implicit módszerek	24
5.6. Implicit Runge–Kutta módszerek	25
6. Alkalmazás kémiai feladatokra	26
6.1. Michaelis–Menten-kinetika	26
6.2. Egymást követő elemi reakciók	28
7. Összefoglalás	34
Irodalomjegyzék	34

Köszönetnyilvánítás

Köszönöm szépen témavezetőmnek, Valkó Évának az egész szakdolgozatom készítése alatt nyújtott segítőkész és alapos munkáját. Hálával tartozom családomnak és barátaimnak, amiért elősegítették ennek a szakdolgozatnak a létrejöttét, illetve Havasi Ágnes tanárnőnek, hogy MATLAB fájlaimat ellenőrizte nekem.

Bevezetés

Sokszor találkozunk olyan feladatokkal, amik megoldásához differenciálegyenletekre van szükségünk. Előfordul, hogy ezek megoldása nem könnyű, vagy esetleg borzasztó időigényes, ha nem lehetetlen. Ekkor azt mondjuk hogy analitikus módon nem megoldható. Ebben az esetben az úgynevezett numerikus módszerekkel adhatunk közelítést az egyenletek megoldására. Mi is az a differenciálegyenlet és mik azok a numerikus módszerek? Ebben a szakdolgozatban a numerikus módszerek, azok használata, tulajdonságai szerepelnek. Bemutatjuk, mikor melyik módszert érdemes használni, hogy a legjobb közelítést kapjuk egy differenciálegyenlet megoldásához, illetve kémiai példákon keresztül mutatjuk be az egyes módszerek használatát.

Az első fejezetben Scharnitzky Viktor [1] és Faragó István [2],[3] jegyzeteire támaszkodva definiáljuk a Cauchy problémát és annak megoldhatóságát, a differenciálegyenletek tulajdonságaival egyetemben. A második fejezetben a numerikus módszereket leíró operátorok ismertetése mellett a Cauchy-feladatot definiáljuk operátoregyenlet formájában [2],[3]. A következő fejezet numerikus módszereket mutat be és azok konzisztenciáját, stabilitását és konvergenciáját határozza meg [3],[4]. A negyedik fejezetben azt vizsgáljuk, hogy a numerikus módszereink jól követik-e a folytonos feladat megoldását, azaz a megfelelő tesztfeladaton vizsgáljuk a módszerek viselkedését, definiáljuk az A-stabilitás fogalmát. Az ötödik fejezet az explicit és implicit Runge–Kutta módszereket mutatja be, a módszerek Butcher táblájával reprezentálva őket. Az utolsó fejezetben a fent említett numerikus módszerek használatát kettő kémiai példán keresztül bemutatjuk be. Az első példában a Michaelis–Menten-kinetika analitikus megoldásának közelítését mutatjuk be negyedrendű Runge–Kutta módszerrel [5], míg a másik példán az Explicit Euler módszert, explicitté tett Implicit Euler módszert és a Heun módszert ismertetjük a bizmutizotóp radioaktív bomlásának vizsgálatán keresztül [6],[7].

1. fejezet

A differenciálegyenlet fogalma

Ebben a fejezetben a differenciálegyenletek alapfogalmait vezetjük be. Definiáljuk a megoldás létezésének és egyértelműségének feltételét és a differenciálegyenlet stabilitását.

1.0.1. Definíció. Legyen $G \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d$ egy tartomány (azaz összefüggő, nyílt halmaz), $(t_0, \bar{u}_0) \in G$ egy adott pont ($t_0 \in \mathbb{R}$, $\bar{u}_0 \in \mathbb{R}^d$), $f: G \rightarrow \mathbb{R}^d$ egy folytonos leképezés. A

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} &= f(t, u) \\ u(t_0) &= \bar{u}_0 \end{aligned} \tag{1.1}$$

feladatot kezdetiérték-feladatnak, vagy *Cauchy-feladatnak* nevezzük.

Egy Cauchy-feladat megoldása azt jelenti, hogy meghatározzuk az összes olyan $u: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$ függvényt, amely valamely $I \in \mathbb{R}$ intervallum pontjaiban behelyettesíthető a (1.1) feladatba és ki is elégíti azt. Továbbiakban

- a $t = t_0$ időpontot *kezdőpontnak*,
- az $u(t_0)$ értéket a megoldásfüggvény *kezdeti értékének*,
- és a $(t_0, u(t_0))$ párt pedig *kezdeti feltételnek* nevezzük.

1.0.2. Definíció. Az olyan $u: I \rightarrow \mathbb{R}^d$ (I egy nyílt intervallum) folytonosan differenciálható függvényt, amelyre

- $(t, u(t)) : t \in I \subset G$;
- $\frac{du}{dt} = f(t, u(t))$, minden $t \in I$,
- $t_0 \in I$ és $u(t_0) = u_0$

a *Cauchy-feladat megoldásának* nevezzük.

1.0.3. Definíció. Legyen az f kétváltozós függvény értelmezett a $H \subset \mathbb{R}^2$ halmazon. Azt mondjuk, hogy H -n f második változójára teljesül a *Lipschitz-feltétel*, ha létezik olyan L valós szám, mellyel tetszőleges $(x, y_1), (x, y_2) \in H$ esetén érvényes az

$$|f(x, y_2) - f(x, y_1)| \leq L|y_2 - y_1|$$

egyenlőtlenség.

Az egyértelmű megoldás tárgyalása előtt vezessük be a következő jelölést: $H_{\alpha, \beta}(t_0, u_0) = \{(t, u) : |t - t_0| \leq \alpha, \|u - u_0\|_{\infty} \leq \beta\} \subset G$. Mivel f folytonosan zárt $H_{\alpha, \beta}(t_0, u_0)$ halmazon, értelmes az $M = \max_{H_{\alpha, \beta}(t_0, \bar{u}_0)} \|f(t, u)\|_{\infty}$ valós szám bevezetése. Ekkor létezik a Cauchy-feladatnak $u(t)$ megoldása minden $t, |t - t_0| \leq \min\{\alpha, \beta/M\}$ esetén. Ha emellett $H_{\alpha, \beta}(t_0, u_0)$ halmazon az f függvény a második változójában Lipschitzes, akkor ez a megoldás egyértelmű is.

A továbbiakban mindig feltesszük, hogy a feladat megoldása létezik és egyértelmű. Tehát a Cauchy-feladat megoldása a rendszer időbeli változását írja le, mi egy feladat megoldása során pontosan erre az időbeli változásra vagyunk kíváncsiak. A kezdeti időpontban ismerjük a rendszer állapotát és meg szeretnénk határozni az azt követő időpontban is. Ezt másképpen leírva $u(t_0)$ -t ismerjük és $t > t_0$ értékeit keressük $u(t)$ függvénynek.

1.0.4. Definíció. Azt mondjuk, hogy a

$$\begin{aligned} \frac{du(t)}{dt} &= f(t, u(t)), & t > t_0 \\ u(t_0) &= u_0 \end{aligned} \tag{1.2}$$

feladat $u(t; t_0, u_0)$ megoldása *stabil*, ha minden $\epsilon > 0$ számhoz létezik olyan $\delta > 0$ szám, amelyre érvényes, hogy minden olyan $\bar{v}_0 \in \mathbb{R}$ kezdeti vektorra, amelyre

$$\|u_0 - \bar{v}_0\| < \delta$$

teljesülnek a következők:

- az $u(t; t_0, \bar{v}_0)$ megoldás létezik a $[t_0, \infty)$ intervallumon,
- minden $t > t_0$ esetén

$$\|u(t; t_0, \bar{u}_0) - u(t; t_0, \bar{v}_0)\| < \epsilon$$

1.0.5. Definíció. Azt mondjuk, hogy a (1.2) kezdetiérték-feladat $u(t; t_0, u_0)$ megoldása aszimptotikusan stabil, ha

- ez a megoldás stabil és
- érvényes a $\lim_{t \rightarrow \infty} \|u(t; t_0, \bar{u}_0) - u(t; t_0, \bar{v}_0)\| = 0$ egyenlőség.

1.0.6. *Megjegyzés.* Ha egy megoldás nem stabil, akkor instabil.

2. fejezet

Bevezető tételek és definíciók

Ebben a fejezetben a numerikus módszerek tulajdonságait ismertetjük, megvizsgáljuk a Cauchy feladat operátoros alakját. Defináljuk továbbá a numerikus módszer konzisztenciájának, stabilitásának és konvergenciájának feltételeit.

Először a Cauchy-feladatot operátoregyenlet formájában definiáljuk, majd a numerikus módszereket leíró operátorok ismertetése következik.

2.0.1. Definíció. Az

$$\omega_h := \{t_i = ih; i = 0, 1, \dots, N; h = T/N\}$$

ekvidisztáns rácshálónak hívjuk.

Legyen L egy olyan operátor amely valamely szabály szerint egy adott $[0, T]$ intervallumon értelmezett függvényhez, egy ugyanazon intervallumon értelmezett függvényt rendel hozzá. Egy $\omega(t) \in C^1[0, T]$ függvényhez rendeli hozzá az

$$(L\omega)(t) = \begin{cases} \omega'(t) - f(t, \omega(t)), & \text{ha } t \in (0, T] \\ \omega(0), & \text{ha } t = 0 \end{cases} \quad (2.1)$$

függvényt. Az operátort a feladat operátorának nevezzük. Mivel a Cauchy feladatra érvényes az egzisztencia és az unicitás, ezért az L operátor injektív. Ekkor valamely adott $\beta(t)$ függvény esetén az $Lu = \beta(t)$ feladatnak létezik egyértelmű megoldása. Legyen

$$\varphi(t) = \begin{cases} 0, & \text{ha } t \in (0, T] \\ u_0, & \text{ha } t = 0 \end{cases} \quad (2.2)$$

függvény. Ekkor az

$$Lu = \varphi$$

operátoregyenletnek szintén létezik egyértelmű megoldása, mivel ez éppen a Cauchy-feladatot jelenti.

Az operátoregyenlet felírható más alakban is, az operátor értelmezési tartományának leszűkítésével. Legyen L egy olyan operátor, amely értelmezve van $\omega \in C^1[0, T] : \omega(0) = u_0$ halmazon. Ekkor a hozzárendelés legyen $(L\omega)(t) =$

$\omega'(t) - f(t, \omega(t)), t \in (0, T]$ szabály alapján értelmezett. L egy olyan operátor, amely a $[0, T]$ intervallumon értelmezve van, megfelelően sima, illetve a $t = 0$ pontban adott értékű ω függvényhez egy másik, a $(0, T]$ -n értelmezett $L\omega$ függvényt feleltet meg. Ezt az L operátort az u_0 skalár és az f kétváltozós függvény írja le. Ebben az esetben a Cauchy-feladat, operátoregyenlet formájában a következőképpen néz ki:

$$Lu = 0.$$

Egy olyan $u(t)$ függvényt szeretnénk találni L értelmezési tartományából, amihez az L operátorunk a $(0, T]$ intervallumon értelmezett, azonosan nulla függvényt rendel hozzá. Másképpen megfogalmazva, a feladatunk u ismeretlen függvény meghatározása a $t \in (0, T]$ pontokban $u(0)$ és Lu ismeretében.

A numerikus megoldás meghatározásához olyan rácshálók sorozatát fogjuk vizsgálni, ahol a lépéshossz változik, vagyis:

$$\omega_h := \{0 = t_0 < t_1 < \dots < t_{N-1} < t_N = T\}.$$

Jelölje: $h_i = t_{i+1} - t_i$, $i = 0, 1, \dots, N-1$ és $h = T/N$. Feltesszük, hogy a rácspontok számának növelésével a rácsháló mindenütt finomodik, azaz létezik olyan nulla és végtelen közötti c állandó, amelyre minden N esetén

$$h_i \leq ch, i = 1, 2, \dots, N.$$

Feltesszük továbbá, hogy a rögzített $t^* \in [0, T]$ pont mindegyik rácshálónak az eleme. Legyen n az az index, amire $h_0 + h_1 + \dots + h_{n-1} = t^*$. Jelölje $\omega_h^0 = \omega_h / t_0 = 0$ rácst, $\mathbb{F}(\omega_h)$ és $\mathbb{F}(\omega_h^0)$ az ω_h , illetve az ω_h^0 rácson értelmezett rácsfüggvények vektorterét.

Legyen N_h egy olyan operátor, amely az ω_h pontjaiban értelmezett rácsfüggvényekhez egy másik, szintén az ω_h pontjaiban értelmezett rácsfüggvényt rendel hozzá. Konkrétan, egy $\omega_h \in \mathbb{F}(\omega_h)$ rácsfüggvényhez rendelje hozzá az

$$(N_h \omega_h)(t_n) = \begin{cases} \Phi(h_n, t_{n-1}, \omega_h(t_{n-1}), \omega_h(t_n)), & \text{ha } t_n \in \omega_h^0 \\ \omega_h(0), & \text{ha } t_n = 0 \end{cases} \quad (2.3)$$

rácsfüggvényt. A $\Phi(h_n, t_{n-1}, \omega_h(t_{n-1}), \omega_h(t_n))$ függvényt az adott numerikus módszert leíró függvénynek nevezzük. A Φ függvény negyedik változójában invertálható, azaz a $g(s) := \Phi(h^*, t^*, \omega^*, s)$ függvény injektív. Az $N_h : \mathbb{F}(\omega_h) \rightarrow \mathbb{F}(\omega_h)$ operátor is injektív és a diszkretizációs módszer operátorának nevezzük. Ezek következményeképpen tetszőleges rögzített $\beta_h \in \mathbb{F}(\omega_h)$ rácsfüggvény esetén az $N\omega_h = \beta_h$ feladatnak létezik egyértelmű megoldása. Bevezetünk egy

$$\varphi_h(t) = \begin{cases} 0, & \text{ha } t \in \omega_h^0 \\ u_0, & \text{ha } t = 0 \end{cases} \quad (2.4)$$

rácsfüggvényt, ekkor

$$N_h y_h = \varphi_h$$

operátoregyenlet a Cauchy-feladathoz tartozó diszkretizált feladatot jelenti.

Az N_h operátor vajon milyen hibával közelíti az L_h operátort a pontos megoldásban? A kérdés megválaszolásához arra van szükségünk, hogy a $t_n \in \omega_h$ rácspontokban az $(L_h u)(t_n)$ értékét összehasonlítsuk az $u(t)$ megoldás rácspontbeli értékeiből képzett rácsfüggvény N_h -képével. Bevezetünk egy $P_h : C[0, T] \rightarrow \mathbb{F}(\omega_h)$ operátort, amely a pontos megoldást kiértékeli a rács pontjaiban:

$$(P_h u)(t_n) = u(t_n).$$

Ekkor a célunk egy

$$d_n = |(Lu)(t_n) - (N_h P_h u)(t_n)|, \quad t_n \in \omega_h$$

kifejezés becslése. A kezdeti hiba nyilván 0, vagyis $t_0 = 0$ pontban az operátor definícióját követve $(Lu)(t_0) = u(t_0)$ illetve $(N_h P_h u)(t_0) = (P_h u)(t_0) = u(t_0)$, így ha kivonjuk őket egymásból 0-át kapunk. A másik esetet nézve amikor $t_n \in \omega_h^0$ $(Lu)(t_n)$ értéke 0, ezért ezekhez a pontokhoz tartozó lokális approximációs hiba

$$d_n = |(N_h P_h u)(t_n)|, \quad t_n \in \omega_h^0.$$

Célunk, hogy a hiba $d_n = d_n(h)$ lépéshossztól való függését vizsgáljuk.

2.0.2. Definíció. Az N_h operátorral leírt numerikus módszert *konzisztensnek* nevezzük az L operátorú feladattal az $F[0, T] \subset \text{dom}(L)$ függvényosztályon, ha

$$\lim_{h \rightarrow 0} d_n(h) = 0.$$

Azt mondjuk, hogy *p -ed rendben konzisztens*, amikor $d_n(h) = \mathcal{O}(h^p)$.

Ezek után egy új kérdés fogalmazódik meg bennünk, mégpedig az, hogy a numerikus megoldások sorozata és a pontos megoldás eltérése hogyan viselkedik finomodó felosztássorozat esetén? Másképp megfogalmazva, a konvergenciára vagyunk kíváncsiak. A felosztássorozatnál legyen

$$h = \max_{1 \leq n \leq N} h_n,$$

és tegyük fel, hogy N_h korlátos $h \rightarrow 0$ esetén. Ez azt jelenti, hogy a rács mindegyik részén finomítunk, amit a $h_i \leq ch$ feltétellel biztosítani tudunk, (ahol c egy h -tól független állandó). Legyen $t^* \in (0, T]$ egy olyan rögzített pont, amelyre $t^* \in \omega_h$ minden vizsgált $h > 0$ érték esetén.

2.0.3. Definíció. Az N_h operátorral leírt numerikus módszert *konvergensnek* nevezzük, ha minden $t^* \in (0, T]$ esetén

$$e_n(h) = y_h(t_n) - u(t^*)$$

úgynevezett globális hiba $h \rightarrow 0$ esetén nullához tart, ahol $t_n = t^*$. Azt mondjuk, hogy *q -ad rendben konvergens*, ha $e_n(h) = \mathcal{O}(h^q)$.

2.0.4. Definíció. Az N_h operátorral leírt numerikus módszert *0-stabilnak* (zéró-stabilnak) nevezzük, ha létezik olyan h_0 és K pozitív állandók, hogy minden $h < h_0$ esetén két tetszőleges $\mathbb{F}(\omega_h)$ -beli x_h és z_h rácsfüggvényre érvényes az

$$|x_h(t_n) - z_h(t_n)| \leq K \{ |x_h(t_0) - z_h(t_0)| + \max_{1 \leq j \leq n} |N_h x_h(t_j) - N_h z_h(t_j)| \}$$

egyenlőtlenség tetszőleges $n = 1, 2, \dots, N$ indexre.

A 0-stabilitás tehát azt fejezi ki, hogy ha két $\mathbb{F}(\omega_h)$ -beli rácsfüggvény olyan, hogy a

- a $t = t_0$ pontban közel vannak egymáshoz,
- az N_h -képük $\mathbb{F}(\omega_h^0)$ -ban is közel van egymáshoz, akkor maguk a függvények is pontonként közel vannak egymáshoz $\mathbb{F}(\omega_h)$ -ben. Ez pontosan azt jelenti, hogy a numerikus módszert leíró adatok kis megváltoztatása esetén a numerikus megoldás is csak korlátosan változik.

2.0.5. Tétel. *Tegyük fel, hogy*

- az N_h operátoregyenletnek létezik egyértelmű megoldása,
- az $N_h : \mathbb{F}(\omega_h) \rightarrow \mathbb{F}(\omega_h)$ operátorral leírt numerikus módszer konzisztens és 0-stabil.

Ekkor

- a $N_h y_h = \varphi_h$ egyenletnek létezik y_h egyértelmű megoldása a $\text{dom}(N_h) := \{\omega_h \in \mathbb{F}(\omega_h) : \omega_h(t_0) = u_0\}$ halmazon;
- a numerikus megoldások sorozata konvergens, és a konvergencia rendje megegyezik a konzisztencia rendjével.

3. fejezet

Egylépéses numerikus módszerek

Általában nagyon nehéz a felépített modellünket közönséges differenciálegyenletek kezdetiérték-feladatainak segítségével megoldani, ugyanis csak speciális f függvények esetén létezik analitikus megoldás. Mégis meg tudjuk határozni a megoldást, ha a differenciálegyenletet magában nem is tudnánk megoldani, még hozzá akkor, ha egy numerikus megoldást állítunk elő. Ez azt jelenti, hogy az értelmezési tartomány egyes pontjaiban az ismeretlen megoldásfüggvény értékeit véges számú lépéssel közelítőleg határozzuk meg. Az egylépéses módszerek valamilyen rögzített időpontbeli közelítését, egy azt megelőző időpontbeli közelítés felhasználásával határozzuk meg. Tehát a $T > 0$ olyan szám, hogy

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} &= f(t, u), t \in [0, T] \\ u(0) &= u_0 \end{aligned} \tag{3.1}$$

feladatnak létezik közelítő megoldása, ami egyértelmű és megfelelően sima a $[0, T]$ intervallumon. Mostantól y fogja a közelítő megoldást jelölni, azaz y_i az ismeretlen $u(t)$ függvény t_i pontbeli közelítése, ezért

$$y_0 = u(t_0) = u_0,$$

egyenlőség teljesül.

3.1. Taylor-sorba fejtés módszer

A (3.1)-es egyenlet $u(t)$ megoldását az

$$u'(t) = f(t, u(t)), t \in [0, T] \tag{3.2}$$

azonosság írja le.

Tegyük fel, hogy az f függvény analitikus, ekkor tetszőleges rendű parciális deriváltjai léteznek a Q_T halmazon. Ennek következtében $u(t)$ akárhányszor differenciálható, mert ő is analitikus. A (3.2) azonosságot deriválva a láncszabály

alkalmazásával a $t^* \in [0, T]$ pontban, a következő egyenlőségeket kapjuk:

$$\begin{aligned} u'(t^*) &= f(t^*, u(t^*)), \\ u''(t^*) &= \partial_1 f(t^*, u(t^*)) + \partial_2 f(t^*, u(t^*))u'(t^*), \\ u'''(t^*) &= \partial_{11} f(t^*, u(t^*)) + 2\partial_{12} f(t^*, u(t^*))u'(t^*) \\ &\quad + \partial_{22} f(t^*, u(t^*))(u'(t^*))^2 + \partial_2 f(t^*, u(t^*))u''(t^*). \end{aligned}$$

Ahogy a fenti egyenletekből látszik, $u(t^*)$ ismeretében mindegyik derivált kiszámítható. Mivel $u(t)$ megoldásfüggvény analitikus, ezért Taylor-sora előállítja a t^* pont környezetében. Tegyük fel, hogy most $t > t^*$ és $[t^*, t] \subset [0, T]$, ekkor ez a függvény t^* körüli n -edfokú Taylor polinomja

$$\sum_{k=0}^n \frac{u^{(k)}(t^*)}{k!} (t - t^*)^k.$$

A Taylor polinom $n \rightarrow \infty$ esetén az $u(t)$ megoldáshoz konvergál, ha t megfelelően közel van a t^* ponthoz, de ez azt feltételezi, hogy

- rögzített t pontban a jobb oldali *végtelen numerikus sort* pontosan tudjuk összegezni.
- t^* pontban a függvényünk végtelen sok parciális deriváltját ismerjük.

A fentiek alapján a gyakorlati számítások kivitelezhetetlenek és pontosan ezért ennek közelítését szeretnénk meghatározni. Ezt úgy érhetjük el, hogy egy véges szeletét vesszük a Taylor-sornak.

3.2. Explicit Euler módszer

Csak úgy, mint az előző alfejezetben, itt is a Cauchy feladatot szeretnénk megoldani, ehhez most egy egylépéses numerikus módszert fogunk használni.

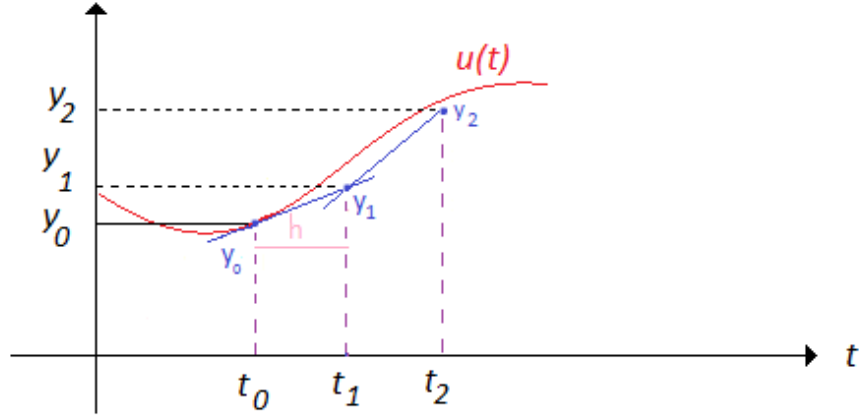
A (3.2) egyenletből kiszámítható $u'(t_0)$, ami a keresett $u(t)$ függvény deriváltjának értéke t_0 pontban. Ez a keresett függvény görbájének $(t_0, u(t_0))$ pontjába rajzolható érintő egyenes $f(t_0, u_0)$ meredeksége. Ezen az érintő egyenesen keressük meg a következő rácshálóbeli pontot t_1 -et. A következő elem meghatározásában t_0 szerepét t_1 veszi fel. Másképp megfogalmazva egy adott t_i pontbeli deriváltat a t_i és t_{i+1} ponthoz tartozó különbségi hányadossal közelítjük.

$$\frac{y(t_{i+1}) - y(t_i)}{h} \approx y'(t_i) = f(t_i, y(t_i)).$$

3.2.1. Definíció. Az

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + h_i f(t_i, y_i), \quad i = 0, 1, \dots, N-1 \\ y_0 &= u(t_0) = u_0 \end{aligned} \tag{3.3}$$

numerikus módszert Explicit Euler módszernek nevezzük.



3.1. ábra. Az Explicit Euler módszer működése

A módszer explicit, mivel a t_{i+1} pontbeli közelítés egyszerű függvény behelyettesítéssel kiszámolható, ha t_i pontbeli értéket ismerjük. A továbbiakban azt vizsgáljuk meg, hogy egy rögzített pontban, ami legyen t^* , a hiba, vagyis a közelítő és a pontos megoldás különbsége hogyan viselkedik. Az ekvidisztáns rácshálók sorozatán vizsgáljuk tovább a feladatot azon feltétel mellett, hogy $t^* \in [0, T]$ mindegyik rácshálónak a pontja. Rögzített rácsháló esetén, n olyan index, hogy $nh = t^*$, ekkor nyilvánvalóan n függ h megválasztásától.

A h ekvidisztáns lépésközt csökkentve célunk a t^* pontbeli pontos és közelítő megoldás különbségének vizsgálata. Finomodó rácsháló esetén tehát vizsgáljuk a $\lim_{n \rightarrow \infty} |e_n| = \lim_{n \rightarrow \infty} |u(t^*) - y_n|$ globális hiba viselkedését. A t_i pontbeli globális hiba $e_i = u(t_i) - y_i$, ahol y_i az Explicit Euler módszerrel nyert t_i pontbeli közelítése a pontos megoldásnak. A t_{i+1} pontbeli globális hiba pedig $e_{i+1} = u(t_{i+1}) - y_{i+1} = u(t_{i+1}) - y_i + hf(t_i, e_i + u(t_i))$. Tekintsük a két hibatag különbségét, $e_{i+1} - e_i = u(t_{i+1}) - y_i + hf(t_i, e_i + u(t_i)) - [u(t_i) - y_i]$. Az Explicit Euler módszer hibaegyenlete:

$$\frac{e_{i+1} - e_i}{h} = -\frac{(u(t_{i+1}) - u(t_i))}{h} + f(t_i, e_i + u(t_i)) = \left[f(t_i, u(t_i)) - \frac{(u(t_{i+1}) - u(t_i))}{h} \right] + \left[f(t_i, e_i + u(t_i)) - f(t_i, u(t_i)) \right].$$

A hibaegyenlet felírható tehát $\frac{e_{i+1} - e_i}{h} = g_i + \psi_i$ alakban, ahol

$$g_i = f(t_i, u(t_i)) - \frac{(u(t_{i+1}) - u(t_i))}{h} \text{ és } \psi_i = f(t_i, e_i + u(t_i)) - f(t_i, u(t_i)).$$

A g_i értéket reziduális hibának nevezzük, ami a numerikus módszer *lokális approximációs hibája* a pontos megoldásra. Azt mutatja meg, hogy a pontos megoldás milyen pontosan elégíti ki a numerikus megoldást meghatározó egyenletet. A

$$\psi_i = f(t_i, e_i + u(t_i)) - f(t_i, u(t_i))$$

különbség pedig azt mutatja meg, hogy az e_i hiba jelenléte mennyivel változtatja meg az $u'(t_i)$ derivált értékét, ugyanis $f(t_i, u(t_i)) = u'(t_i)$ ezért ha f nem függ u -tól, akkor $\psi = 0$. Más szavakkal ψ_i azt mutatja meg, hogy az y_{i+1} érték kiszámolására szolgáló képletben a pontos $u(t_i)$ érték helyett annak közelítésével, y_i -vel számolva mekkora hiba keletkezik egy lépés során.

Célunk a globális hibára egy felső becslést adni a t^* pontban, ezért külön-külön belátjuk, hogy a $|g_i|$ és $|\psi_i|$ értékek felülről korlátosak minden $i = 0, 1, \dots, n$ -re.

3.2.2. Definíció. Azt mondjuk, hogy a numerikus módszer *konzisztens*, ha lokális approximációs hibájára igaz, hogy $g_i = \mathcal{O}(h^p)$, ahol $p > 0$, a legnagyobb ilyen egész p a módszer konzisztencia rendje.

3.2.1. Állítás. Az *Explicit Euler módszer elsőrendben konzisztens*.

Bizonyítás. Vizsgáljuk tehát a $|g_i|$ approximációs hibát.

$$u(t_{i+1}) - u(t_i) = u(t_i + h) - u(t_i) = hu'(t_i) + \frac{1}{2}u''(\epsilon_i)h^2,$$

ahol $\epsilon_i \in (t_i, t_{i+1})$ egy adott pont. Mivel $f(t_i, u(t_i)) = u'(t_i)$ ezért adhatunk egy felső becslést $|g_i|$ -re, méghozzá:

$$|g_i| = \left| \frac{hu'(t_i) - hu'(t_i) - \frac{1}{2}u''(\epsilon_i)h^2}{h} \right| \leq \frac{M_2}{2}h, M_2 = \max|u''(t)|,$$

ahol a maximum $[0, t^*]$ között értendő. Ebből látszik tehát, hogy a módszer elsőrendben konzisztens mert $g_i = -\frac{1}{2}hu''(t_i) + \mathcal{O}(h^2) = \mathcal{O}(h)$. \square

Most vizsgáljuk a módszer stabilitását. A stabilitás a fentiekből azt jelenti, hogy, ha bármely adott lépésben, a tényleges megoldás ($u(t_n)$) némileg eltér a közelítő megoldástól (y_n) a kerekítési hiba következtében, akkor ez az eltérés kicsi marad és nem növekszik n növelésével.

3.2.3. Definíció. Egy numerikus módszer *0-stabil*, ha létezik egy $K > 0$ állandó, hogy:

$$|e_i| \leq K \left(|e_0| + h \sum_{j=0}^{i-1} |g_j| \right).$$

3.2.2. Állítás. Az *Explicit Euler módszer 0-stabil*.

Bizonyítás. A megoldás egyértelműsége miatt használhatjuk a Lipschitzesség definícióját vagyis azt, hogy a függvény második változójában Lipschitzes:

$$|\psi_i| = |f(t_i, e_i + u(t_i)) - f(t_i, u(t_i))| \leq L|(e_i + u(t_i)) - u(t_i)| = L|e_i|.$$

Ezt behelyettesítve az Explicit Euler módszer hibaegyenletébe

$$|e_{i+1}| \leq |e_i| + h|g_i| + h|\psi_i| \leq (1 + hL)|e_i| + hg_i$$

teljesül minden $i = 0, 1, \dots, n - 1$ -re. Ezek alapján a globális hibára igaz, hogy

$$\begin{aligned} |e_n| &\leq (1 + hL)|e_{n-1}| + h|g_{n-1}| \leq (1 + hL)[(1 + hL)|e_{n-2}| + h|g_{n-2}|] + h|g_{n-1}| = \\ &(1 + hL)^2|e_{n-2}| + h[(1 + hL)|g_{n-2}| + |g_{n-1}|] \leq \\ &(1 + hL)^n|e_0| + h \sum_{i=0}^{n-1} (1 + hL)^i |g_{n-1-i}|. \end{aligned}$$

Most azt fogjuk használni, hogy $(1 + hL)^i < (1 + hL)^n$ igaz minden $i = 0, 1, \dots, n - 1$ -re, vagyis akkor

$$|e_n| < (1 + hL)^n \left[|e_0| + h \sum_{i=0}^{n-1} |g_{n-1-i}| \right].$$

Tetszőleges pozitív x esetén igaz az egyenlőtlenség, miszerint $1 + x < \exp(x)$, így $(1 + hL)^n < \exp(nhL)$. Mivel $nh = t^*$ ezért $(1 + hL)^n < \exp(t^*L)$, ezt visszahelyettesítve

$$|e_n| < \exp(Lt^*) \left[|e_0| + h \sum_{i=0}^{n-1} |g_{n-1-i}| \right]. \quad (3.4)$$

□

Ezzel beláttuk, hogy a módszer 0-stabil. Ekkor helyettesítsük be g_i becsült értékét (3.4)-be.

$$|e_n| \leq \exp(Lt^*) \left[|e_0| + hn \frac{M_2}{2} h \right] = \exp(Lt^*) \left[|e_0| + t^* \frac{M_2}{2} h \right].$$

A hiba kezdetben 0 volt, tehát $e_0 = 0$, így

$$|e_n| \leq \exp(Lt^*) \frac{M_2 t^*}{2} h.$$

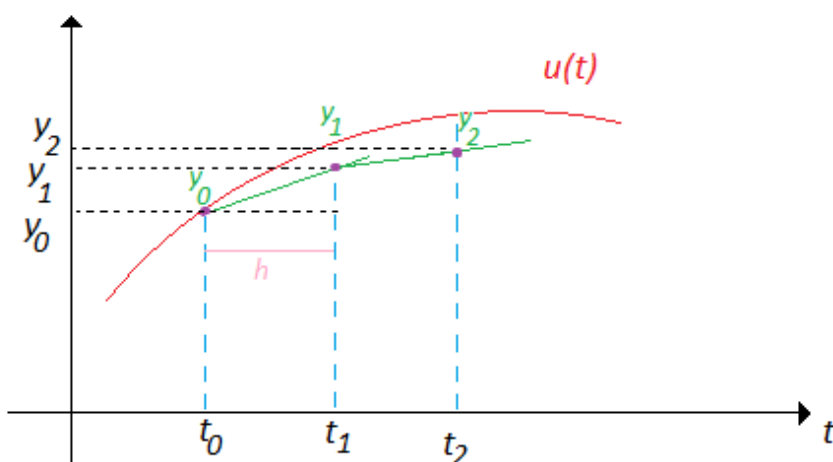
Mivel $\lim_{n \rightarrow \infty} \exp(Lt^*) \frac{M_2 t^*}{2} h = 0$ beláttuk, hogy az Explicit Euler módszer konvergens és a konvergencia elsőrendű.

3.3. Implicit Euler-módszer

3.3.1. Definíció. Az

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + h_i f(t_{i+1}, y_{i+1}), \quad i = 0, 1, \dots, N - 1 \\ y_0 &= u(t_0) = u_0 \end{aligned} \quad (3.5)$$

numerikus módszert Implicit Euler módszernek nevezzük.



3.2. ábra. Az Implicit Euler módszer működése

Az Implicit Euler módszer hibaegyenlete:

$$\frac{e_{i+1} - e_i}{h} = -\frac{(u(t_{i+1}) - u(t_i))}{h} + f(t_{i+1}, u(t_{i+1}) + e_{i+1}) =$$

$$\left[f(t_{i+1}, u(t_{i+1})) - \frac{(u(t_{i+1}) - u(t_i))}{h} \right] + [f(t_{i+1}, u(t_{i+1}) + e_{i+1}) - f(t_{i+1}, u(t_{i+1}))].$$

Ahogy az Explicit Euler módszer vizsgálatakor tettük, ebben az esetben is értelmezhetjük a g_i approximációs hibát, valamint a ψ_i hibatagot:

$$g_i = f(t_{i+1}, u(t_{i+1})) - \frac{(u(t_{i+1}) - u(t_i))}{h},$$

$$\psi_i = f(t_{i+1}, u(t_{i+1}) + e_{i+1}) - f(t_{i+1}, u(t_{i+1})).$$

3.3.1. Állítás. Az Implicit Euler módszer elsőrendben konzisztens.

Bizonyítás. A konzisztencia vizsgálatához a lokális hibát, g_i -t vizsgáljuk.

$$u(t_{i+1}) - u(t_i) = u(t_{i+1}) - u(t_{i+1} - h_i) = h_i u'(t_{i+1}) - \frac{1}{2} u''(\epsilon_i) h_i^2$$

ahol $\epsilon_i \in (t_i, t_{i+1})$ adott pont. A numerikus módszer definíciójából adódik, hogy $f(t_{i+1}, u(t_{i+1})) = u'(t_{i+1})$, ennek következtében

$$|g_i| = \left| u'(t_{i+1}) - \frac{h u'(t_{i+1}) - \frac{1}{2} u''(\epsilon_i) h^2}{h} \right| = \left| \frac{1}{2} u''(\epsilon_i) h \right| \leq \frac{M_2}{2} h,$$

ahol M_2 a második derivált maximumát jelöli a $[0, t^*]$ intervallumon.

□

3.3.2. Állítás. Az Implicit Euler módszer 0-stabil.

3.3.3. Állítás. A (2.0.5) tétel alapján az Implicit Euler módszer elsőrendben konvergens.

3.4. Crank–Nicolson (Trapéz) módszer

A pontosság növelése érdekében, ha az Explicit és Implicit Euler módszerek szám-tani közepét tekintjük, egy újabb numerikus módszer konstruálhatunk. Ebben az esetben egy egylépéses numerikus módszert generálunk, amit *Trapéz-módszernek* hívunk.

3.4.1. Definíció. Az

$$\begin{aligned} y_{i+1} - y_i &= \frac{h_i}{2} [f(t_i, y_i) + f(t_{i+1}, y_{i+1})], \quad i = 0, 1, \dots, N-1 \\ y_0 &= u(t_0) = u_0. \end{aligned} \quad (3.6)$$

numerikus módszert *Trapéz módszernek* nevezzük.

A Trapéz módszer hibaegyenlete:

$$\begin{aligned} \frac{e_{i+1} - e_i}{h} &= \frac{1}{2} \left[f(t_i, e_i + u(t_i)) + f(t_{i+1}, u(t_{i+1}) + e_{i+1}) \right] - \frac{u(t_{i+1}) - u(t_i)}{h} \\ \frac{e_{i+1} - e_i}{h} &= \frac{1}{2} \left[f(t_i, u(t_i)) + f(t_{i+1}, u(t_{i+1})) \right] - \frac{u(t_{i+1}) - u(t_i)}{h} \\ &+ \frac{1}{2} \left[f(t_i, e_i + u(t_i)) - f(t_i, u(t_i)) \right] \\ &+ \frac{1}{2} \left[f(t_{i+1}, u(t_{i+1}) + e_{i+1}) - f(t_{i+1}, u(t_{i+1})) \right] \end{aligned} \quad (3.7)$$

3.4.1. Állítás. A Trapéz módszer másodrendben konzisztens.

Bizonyítás. A Trapéz módszer lokális approximációs hibája:

$$g_i = \frac{1}{2} \left[f(t_i, u(t_i)) + f(t_{i+1}, u(t_{i+1})) \right] - \frac{u(t_{i+1}) - u(t_i)}{h},$$

a ψ_i hibatag pedig:

$$\psi_i = \frac{1}{2} \left[f(t_i, e_i + u(t_i)) - f(t_i, u(t_i)) \right] + \frac{1}{2} \left[f(t_{i+1}, u(t_{i+1}) + e_{i+1}) - f(t_{i+1}, u(t_{i+1})) \right].$$

A g_i lokális approximációs hiba becsléséhez fejtsük Taylor sorba a $t_{i+\frac{1}{2}} = t_i + 0,5h_i$ pont körül $u(t_{i+1}) - u(t_i)$ -t.

$$u(t_{i+1}) - u(t_i) = hu'(t_{i+\frac{1}{2}}) + \frac{h^3}{48}(u'''(\epsilon_i^1) + u'''(\epsilon_i^2)),$$

ahol $\epsilon_i^1, \epsilon_i^2 \in (t_i, t_{i+1})$ adott pontok. A következőket tudjuk még:

$$f(t_i, u(t_i)) = u'(t_i), \text{ illetve } f(t_{i+1}, u(t_{i+1})) = u'(t_{i+1}).$$

Ezek alapján, ha sorba fejtsük az $\frac{1}{2}[u'(t_i) + u'(t_{i+1})]$ kifejezést a $t = t_{i+\frac{1}{2}}$ pont körül, akkor

$$\frac{1}{2}[f(t_i, u(t_i)) + f(t_{i+1}, u(t_{i+1}))] = u'(t_{i+\frac{1}{2}}) + \frac{h_i^2}{16}(u'''(\epsilon_i^3) + u'''(\epsilon_i^4)).$$

Ezek alapján

$$\begin{aligned}
|g_i| &= \left| \frac{1}{2}[f(t_i, u(t_i)) + f(t_{i+1}, u(t_{i+1}))] - \frac{[u(t_{i+1}) - u(t_i)]}{h} \right| \leq \\
&\leq \left| u'(t_{i+\frac{1}{2}}) + \frac{h_i^2}{16}(u'''(\epsilon_i^3) + u'''(\epsilon_i^4)) - \frac{hu'(t_{i+\frac{1}{2}}) + \frac{h^3}{48}(u'''(\epsilon_i^1) + u'''(\epsilon_i^2))}{h} \right| \leq \\
&\leq \frac{8h^2}{48}M_3, \text{ ahol } M_3 = \max_{[0, t^*]} |u'''(t)|.
\end{aligned}$$

Azaz

$$|g_i| = \frac{h^2}{6}u'''(t) \leq \frac{h^2}{6}M_3,$$

ami azt jelenti, hogy a módszer másodrendben konzisztens. \square

3.4.2. Állítás. *A Crank–Nicolson módszer 0-stabil*

3.4.3. Állítás. *A (2.0.5) tétel alapján a Trapéz módszer másodrendben konvergens.*

4. fejezet

A-stabilitás

Fontos szempont annak vizsgálata, hogy a numerikus módszereink jól követik-e a folytonos feladat megoldását, megőrzik-e a folytonos feladat megoldásának legfontosabb kvalitatív tulajdonságait. Az

$$u'(t) = \lambda u(t), t > 0$$

tesztegyenlet megoldására $Re(\lambda) < 0$ esetén igaz, hogy $|u(t)|$ monoton csökkenő. Vizsgáljuk meg a korábban bevezetett három egylépéses numerikus módszerrel nyert megoldások milyen esetben követik a pontos megoldás ilyen jellegű viselkedését, azaz mikor teljesül, hogy $|y_n| \leq |y_{n-1}| \leq \dots \leq |y_0|$.

Ekkor a numerikus módszer stabilitási függvényét a következő képlettel értelmezhetjük:

$$y_{n+1} = R(z)y_n, \text{ ahol } z \in \mathbb{C}$$

és a tesztegyenlet numerikus megoldásának monoton csökkenése miatt elvárjuk, hogy

$$|R(z)| \leq 1$$

legyen. Ezen feltételt kielégítő pontok halmaza alkotja a módszer *abszolút stabilitási tartományát* és az $R(z)$ függvényt a módszer *stabilitási függvényének* nevezzük.

4.0.1. Definíció. Egy numerikus módszert *A-stabil* módszernek nevezzük, ha az abszolút stabilitási tartománya tartalmazza a \mathbb{C}_0^- bal oldali komplex félsíkot.

4.1. Az Explicit Euler módszer A-stabilitása

Az Explicit Euler módszer a tesztfeladaton ekvidisztáns rácshálón:

$$y_n = y_{n-1} + h\lambda y_{n-1} = (1 + h\lambda) y_{n-1}, \text{ azaz}$$

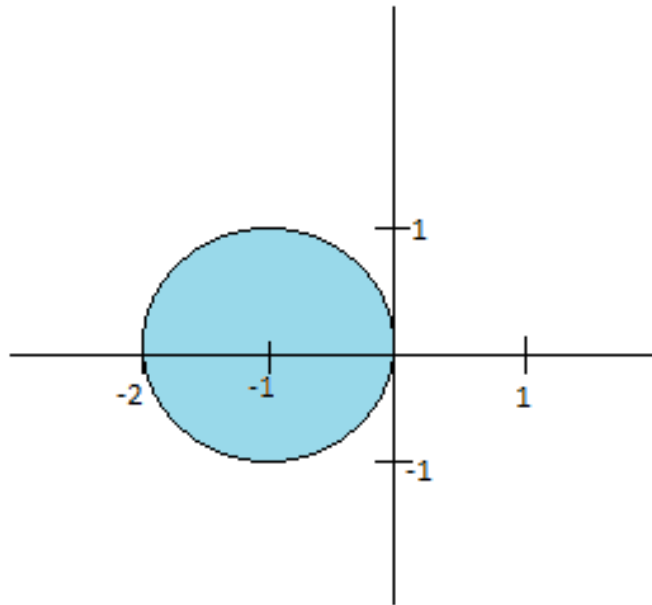
$$y_n = (1 + h\lambda)^n y_0.$$

Vezessük be a $z = \lambda h \in \mathbb{C}$ és $R(z) = 1 + z$ jelöléseket. Ezek alapján az Explicit Euler módszer tehát felírható a következő alakban:

$$y_n = (1 + z)y_{n-1} = R(z)y_{n-1}.$$

Az $|y_n| \leq |y_{n-1}| \leq \dots \leq |y_0|$ feltétel pontosan akkor teljesül, ha $|R(z)| \leq 1$, azaz $|1+z| \leq 1$.

Az Explicit Euler módszer stabilitási tartománya az $|1+z| \leq 1$ tulajdonságú komplex számok halmaza.



4.1. ábra. Az Explicit Euler módszer stabilitási tartománya

Ahogy a 4.1 ábrán látható, az Explicit Euler módszer nem A-stabil, mivel stabilitási tartománya nem tartalmazza a bal oldali komplex félsíkot. Az Explicit Euler módszer esetén az abszolút stabilitási feltétel túlságosan is megszorító lehet, ugyanis nagy abszolút értékű λ esetén csak nagyon kis h választható, amely mellett stabil marad a módszer.

4.2. Implicit Euler módszer A-stabilitása

4.2.1. **Állítás.** *Az Implicit Euler módszer A-stabil.*

Bizonyítás. Az Implicit Euler módszer a tesztfeladaton:

$$y_n = y_{n-1} + h\lambda y_n$$
$$y_n = \frac{1}{1 - h\lambda} y_{n-1}.$$

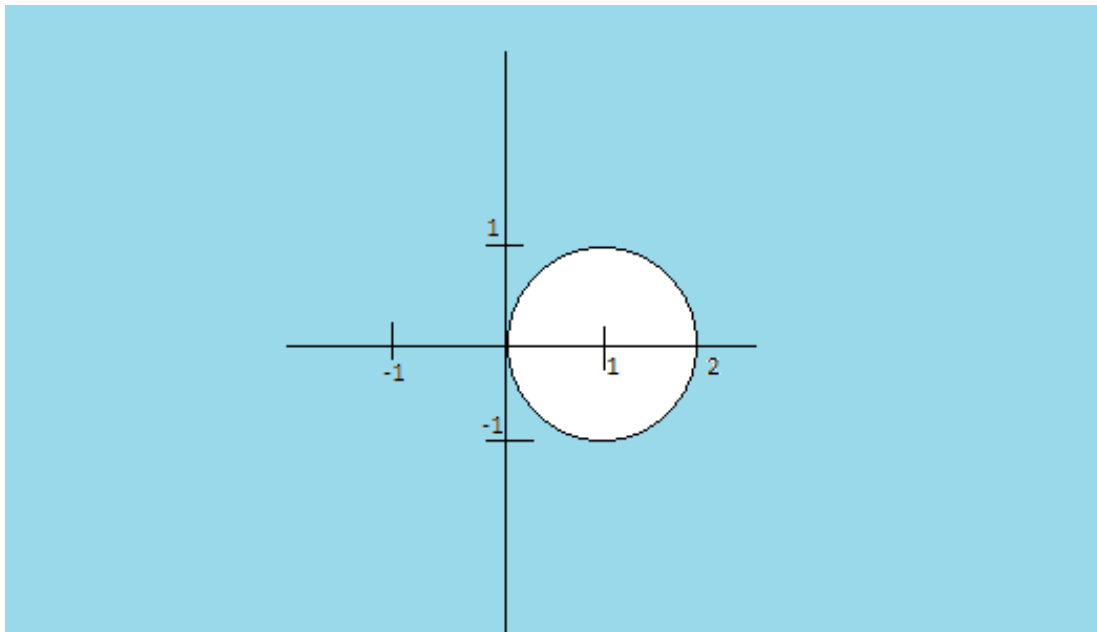
Bevezetve a $z = \lambda h$ jelölést, az Implicit Euler módszer stabilitási függvénye:

$$R(z) = \frac{1}{1 - z}.$$

A fentiek alapján az Implicit Euler módszer abszolút stabilitási tartománya az

$$\frac{1}{|1 - z|} \leq 1$$

tulajdonságú komplex számok halmaza.



4.2. ábra. Az Implicit Euler módszer stabilitási tartománya

Az Implicit Euler módszer tehát A-stabil, mivel stabilitási tartománya tartalmazza a bal oldali komplex félsíkot. \square

4.3. A Trapéz módszer A-stabilitása

4.3.1. **Állítás.** A Trapéz módszer A-stabil.

Bizonyítás. Alkalmazva a trapéz módszert a tesztfeladatra, az

$$y_n = y_{n-1} + \lambda h \frac{y_{n-1} + y_n}{2}$$

egyenlőséget kapjuk. Átrendezve

$$y_n - \frac{\lambda h y_n}{2} = y_{n-1} + \frac{\lambda h y_n}{2}, \text{ azaz}$$
$$y_n = \frac{2 + h\lambda}{2 - h\lambda} y_{n-1}.$$

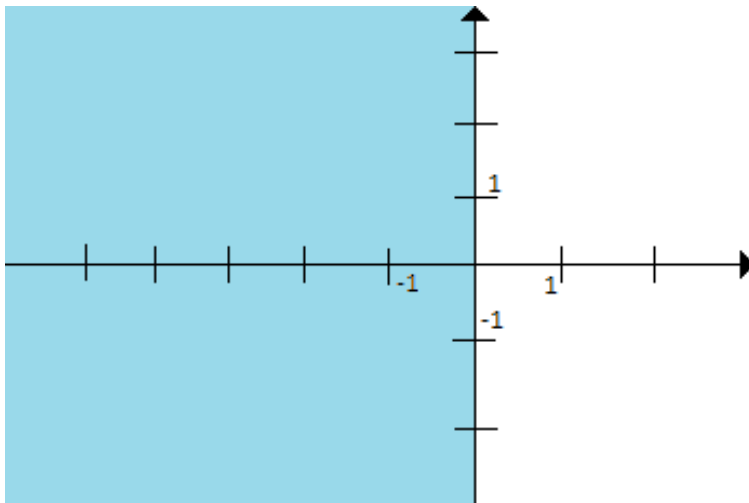
Bevezetve a $z = \lambda h$ jelölést, a Trapéz módszer stabilitási függvénye:

$$R(z) = \frac{2 + z}{2 - z}.$$

A Trapéz módszer abszolút stabilitási tartománya $|R(z)| \leq 1$ feltétel miatt azon komplex számok halmaza, melyekre:

$$\left| \frac{2 + z}{2 - z} \right| \leq 1.$$

A feltétel azon pontokra teljesül, melyekre $|2 + z| \leq |2 - z|$ egyenlőtlenség igaz, azaz a $Re(z) \leq 0$ komplex számok összességére.



4.3. ábra. A Trapéz-módszer stabilitási tartománya

Ahogy az ábrából látszik, a Trapéz módszer A-stabil. \square

4.4. Egylépéses módszerek összefoglalása

4.4.1. Definíció. Azokat a módszereket, amelyekre $\phi = \phi(h, t_i, y_i)$ (tehát a ϕ függvény nem függ y_{i+1} -től) *explicit módszernek* nevezzük. Amennyiben $\phi = \phi(h, t_i, y_i, y_{i+1})$, a módszert *implicitnek* nevezzük.

Az Explicit Euler módszer első rendben konzisztens, 0-stabil és ennek következményeképpen első rendben konvergens. A módszer nem A-stabil. Stabilitási tartománya az $|1 + z| \leq 1$ tulajdonságú komplex számok halmaza. Valós, negatív λ esetén a módszer akkor őrzi meg a tesztegyszerű megoldásának abszolút értékben vett monoton csökkenési tulajdonságát, ha $h\lambda \in [-2, 0]$, azaz ha $h \leq 2/(-\lambda)$. Ez a feltétel nagy abszolút értékű λ esetén túlságosan megszorító, hiszen kicsi h lépésköz választása esetén a futási idő drasztikusan megnőhet.

Az Implicit Euler módszer első rendben konzisztens, 0-stabil és szintén első rendben konvergens, A-stabil.

A Trapéz módszer, mivel másodrendben konzisztens és 0-stabil, ezért másodrendben konvergens is, illetve A-stabil.

5. fejezet

Runge–Kutta módszerek

Tekintsük a Cauchy feladatot ismét:

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} &= f(t, u(t)), \quad \forall t \in [0, T] \\ u(t_0) &= u_0 \end{aligned} \tag{5.1}$$

Ha az (5.1)-es egyenlet mindkét oldalát integráljuk az ω_h rácsháló két tetszőleges szomszédos pontja között, akkor az

$$u(t_n) - u(t_{n-1}) = \int_{t_{n-1}}^{t_n} f(t, u(t)) dt, \quad t \in [t_{n-1}, t_n]$$

egyenlőséget kapjuk. A jobb oldalon lévő integrált közelítő formulával számoljuk ki a $[t_{n-1}, t_n]$ intervallumon.

- Az Explicit Euler módszert kapjuk, ha a téglalap szabályt alkalmazzuk a bal oldali végpontjában.

$$\int_{t_{n-1}}^{t_n} f(t, u(t)) dt \approx h_n f(t_{n-1}, u(t_{n-1}))$$

- Az Implicit Euler módszert kapjuk, ha szintén a téglalap szabályt használjuk, de most a jobb oldali végpontban.

$$\int_{t_{n-1}}^{t_n} f(t, u(t)) dt \approx h_n f(t_n, u(t_n))$$

- A Trapéz módszer nyerhető, ha a közelítő integrálására a trapézsabályt alkalmazzuk.

$$\int_{t_{n-1}}^{t_n} f(t, u(t)) dt \approx \frac{h_n}{2} [f(t_{n-1}, u(t_{n-1})) + f(t_n, u(t_n))]$$

A Runge–Kutta módszer ötletének alapját a numerikus integrálás szabályai alkotják.

5.1. Explicit Runge–Kutta módszerek

5.1.1. Definíció. A

$$\begin{aligned}
 k_1 &= f(t_n, y_n) \\
 k_2 &= f(t_n + a_2 h, y_n + h b_{21} k_1) \\
 k_3 &= f(t_n + a_3 h, y_n + h(b_{31} k_1 + b_{32} k_2)) \\
 k_4 &= f(t_n + a_4 h, y_n + h(b_{41} k_1 + b_{42} k_2 + b_{43} k_3)) \\
 k_m &= f(t_n + a_m h, y_n + h(b_{m1} k_1 + \dots + b_{m,m-1} k_{m-1})) \\
 y_{n+1} &= y_n + h(c_1 k_1 + c_2 k_2 + \dots + c_m k_m)
 \end{aligned} \tag{5.2}$$

numerikus módszert m -lépcsős explicit Runge–Kutta módszernek nevezzük, ahol a_m , b_{ik} és c_1, \dots, c_m tetszőleges paraméterek.

A b_{ik} paraméterek által előállított B mátrixot a Runge–Kutta módszer mátrixának nevezzük, c_i együtthatók a módszer súlyai, a_k számokat pedig a módszer módusainak nevezzük. A súlyok összege 1, vagyis $\sum_{i=1}^m c_i = 1$. A jobb áttekinthetőség érdekében ezeket az együtthatókat egy táblázatba foglaljuk össze, melynek neve Butcher-tábla.

$$\begin{array}{c|cccccc}
 a_2 & b_{21} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
 a_3 & b_{31} & b_{32} & 0 & \cdots & 0 \\
 a_4 & b_{41} & b_{42} & b_{43} & \cdots & 0 \\
 \vdots & & & \vdots & & \\
 a_m & b_{m1} & b_{m2} & b_{m3} & \vdots & b_{m,m-1} \\
 \hline
 & c_1 & c_2 & c_3 & \cdots & c_m
 \end{array}$$

5.1.2. Tétel. *Egy Runge–Kutta módszer explicit, ha $b_{ik} = 0$, ($i < k$) teljesül.*

5.1.1. Állítás. *Ahhoz, hogy egy Runge–Kutta módszer p rendben konzisztens legyen, az alábbi elégséges feltételt írhatjuk fel:*

- elsőrendben: $c^T e = 1$
- másodrendben: $c^T a = 0, 5$
- harmadrendben: $c^T a^2 = \frac{1}{3}$, $c^T B a = \frac{1}{6}$
- negyedrendben: $c^T a^3 = \frac{1}{4}$, $c^T A B a = \frac{1}{8}$, $c^T A a^2 = \frac{1}{12}$, $c^T A a^2 = \frac{1}{24}$

ahol e transzponált egységvektor, c a Butcher tábla c_i elemeiből álló vektor, $a^k = [a_1^k, \dots, a_s^k]$, $A = \text{diag}[a_1, \dots, a_s]$ és B a Butcher táblából a b_{ij} -k által alkotott mátrix.

5.1.3. Tétel. A (6.2)-es alakú Runge–Kutta típusú módszer pontosan akkor konzisztens, amikor teljesülnek a

$$Be = a, \quad c^T e = 1$$

feltételek.

Vizsgáljuk az Explicit Euler módszert:

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

Az előbbieket alapján $f(t_n, y_n) = k_1$, így $c_1 = 1$, minden más tag 0, vagyis az Explicit Euler módszert leíró Butcher tábla

$$\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline & 1 \end{array}$$

alakban írható fel. A táblából kiolvasható, hogy a módszer egy-lépcsős, explicit, illetve elsőrendben konzisztens.

5.2. Másodrendű Runge–Kutta módszerek

Nézzük a másodrendű módszereket. Vegyük a pontos megoldás $t = t^* + h$ pontjában Taylor sorának első tagjait. Ekkor az

$$u(t^* + h) = u(t^*) + hu'(t^*) + \frac{h^2}{2!}u''(t^*) + \mathcal{O}(h^3) \quad (5.3)$$

egyenlőséget kapjuk. A (3.1)-es részben taglalt deriváltakat felhasználva egyszerűsítő jelöléseket vezetünk be:

$$f = f(t^*, u(t^*)), \quad \partial_i f = \partial_i f(t^*, u(t^*)), \quad \partial_{ij} f = \partial_{ij} f(t^*, u(t^*)), \quad \text{stb.}$$

Általánosabban felírva (5.3)-at az

$$u(t^* + h) = u(t^*) + c_1 hf(t^*, u(t^*)) + c_2 hf(t^* + a_2 h, u(t^*) + b_{21} hf(t^*, u(t^*))) + \mathcal{O}(h^3) \quad (5.4)$$

egyenlőséget kapjuk, ahol c_1, c_2, a_2, b_{21} egyenlőre tetszőleges paraméterek. A $t = t_{n-1}$ pontban az előző egyenletet felírva az

$$y_n = y_{n-1} + c_1 hf(t_{n-1}, y_{n-1}) + c_2 hf(t_{n-1} + a_2 h, y_{n-1} + b_{21} hf(t_{n-1}, y_{n-1})) \quad (5.5)$$

egylépéses numerikus módszert kapjuk.

Ennek a módszernek a Butcher táblája:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ a_2 & b_{21} & \\ \hline & c_1 & c_2 \end{array}$$

Fejtsük sorba (5.4) jobb oldalát, ekkor

$$u(t^* + h) = u(t^*) + (c_1 + c_2)hf + h^2[a_2c_2\partial_1f + c_2b_{21}f\partial_2f] + \mathcal{O}(h^3) \quad (5.6)$$

egyenlőséget kapjuk. Az (5.3) és (5.6) képletek összevetéséből azt kapjuk, hogy az (5.5)-ös egyenlettel meghatározott numerikus módszerünk pontosan akkor másodrendű, ha

$$\begin{cases} c_1 + c_2 &= 1 \\ a_2c_2 &= 0,5 \\ b_{21}c_2 &= 0,5 \end{cases} \quad (5.7)$$

5.2.1. Tétel. *Tegyük fel, hogy a c_1, c_2, a_2 és b_{21} paraméterek megoldásai az (5.7) egyenleteknek. Ekkor a*

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_{n-1}, y_{n-1}), \\ k_2 &= f(t_{n-1} + a_2h, y_{n-1} + hb_{21}k_1), \\ y_n &= y_{n-1} + h(c_1k_1 + c_2k_2) \end{aligned} \quad (5.8)$$

képletekkel definiált egylépéses explicit numerikus módszer másodrendű.

5.2.2. Tétel. *Az (5.7) feltételeket kielégítő (5.8) módszert másodrendű Runge–Kutta típusú módszernek nevezzük és RK2 szimbólummal jelöljük.*

A (5.7) egyenletrendszerünkön jól látszik, hogy négy ismeretlenre három egyenletünk van, ezért a megoldás nem egyértelmű. Tetszőleges $\sigma \neq 0$ esetén az egyenletrendszer megoldásai, ha $c_2 = \sigma$ Butcher táblába rendezve:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \hline 1/2\sigma & 1/2\sigma & \\ \hline & 1 - \sigma & \sigma \end{array}$$

alakban írhatók fel.

5.3. Heun-módszer

A $\sigma = 0,5$ megválasztással a következő módszert kapjuk,

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}f(t_n, y_n) + \frac{h}{2}f(t_{n+1}, y_n + hf(t_n, y_n)).$$

A szokásos k_1 és k_2 jelölések mellett a

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2)$$

alakú numerikus módszert *Heun-módszernek* nevezzük. Butcher táblája:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \hline 1 & 1 & \\ \hline & 0,5 & 0,5 \end{array}$$

5.4. Negyedrendű Runge–Kutta módszer

Az (5.2) egyenletrendszerbe $m = 4$ -et helyettesítve a negyedrendű Runge–Kutta módszereket kapjuk. Ahogy a másodrendű esetben néztük, a negyedrendű konzisztencia vizsgálata során az egyenletrendszerben 10 ismeretlenre 8 egyenletünk van, ezért pontos megoldást nem tudunk meghatározni, így több megoldás is lehetséges. Az egyik megoldás Butcher-táblája

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ 0,5 & 0,5 & & \\ 0,5 & 0 & 0,5 & \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{array}$$

Eddig láttuk, hogy az egy-lépcsős módszerek elsőrendűek, míg a két-lépcsős Trapéz módszer másodrendű. Az elérhető maximális $\text{rend}(p)$ és a lépésszám(m) közötti összefüggéseket a következő táblázat szemlélteti:

m	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
p	1	2	3	4	4	5	6	6	7	7

5.5. Explicitté tett Implicit módszerek

Az Implicit Euler módszer és a Trapéz módszer implicit sémát jelentenek, nemlineáris egyenletek (rendszer esetén: egyenletrendszerek) megoldását igénylik minden időrétegen. Ennek elkerülésére az implicit módszerek esetén a jobb oldalon szereplő y_{i+1} értéket közelítsük explicit módszer segítségével, majd behelyettesítve az eredeti formulába a közelítést, már explicit képletet nyerve, meghatározzuk a t_{i+1} pontbeli y_{i+1} közelítést.

Az explicitté tett Implicit Euler módszert leíró egyenlet:

$$y_{i+1} = y_i + hf(t_i, y_i + hf(t_i, y_i)).$$

Két-lépcsős módszer ahol $c_1 = 0$, $c_2 = a_2 = b_{21} = 1$.

Az explicitté tett Implicit Euler módszert leíró Butcher tábla:

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ \hline & 0 & 1 \end{array}$$

A táblából kiolvasható, hogy a módszer két-lépcsős explicit, valamint elsőrendben konzisztens.

A Trapéz módszer explicitté tett változatát leíró séma:

$$y_{i+1} = y_i + 0,5h[f(t_i, y_i) + f(t_{i+1}, y_i + hf(t_i, y_i))],$$

ahol $c_1 = c_2 = 0,5$ míg $b_{21} = a_2 = 1$. Az explicitté tett Trapéz módszert leíró Butcher tábla.

0	0	0
1	1	0
	0,5	0,5

A táblából kiolvasható, hogy a módszer két-lépcsős, explicit, másodrendben konzisztens. Megjegyezzük, hogy az explicitté tett Trapéz módszer éppen a korábban ismertetett Heun módszer.

5.6. Implicit Runge-Kutta módszerek

Az Implicit Runge-Kutta módszerek felírhatók:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^m c_i k_i$$

alakban, ahol

$$k_i = \left(t_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^m b_{ij} k_j \right).$$

Az Implicit Runge-Kutta módszerek paramétereit tartalmazó Butcher tábla a következő alakú:

a_1	b_{11}	b_{12}	\cdots	a_{1m}
a_2	b_{21}	b_{22}	\cdots	a_{2m}
\vdots	\vdots	\vdots		\vdots
a_m	b_{m1}	b_{m2}	\vdots	$b_{m,m}$
	c_1	c_2	\cdots	c_m

Az Implicit Euler módszert leíró egyenlet:

$$y_{i+1} = y_i + h_i f(t_{i+1}, y_{i+1}),$$

ahol $c_1 = a_2 = b_{21} = 1$. Az Implicit Euler módszert leíró Butcher tábla:

1	1
	1

Ahogy a táblából látható a módszer egy-lépcsős, implicit, elsőrendben konzisztens.

A Trapéz módszert leíró séma:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} f(t_i, y_i) + \frac{h}{2} f(t_{i+1}, y_{i+1}),$$

ahol $k_1 = f(t_n + y_n)$ együtthatója $c_1 = 0,5$ és $k_2 = f(t_{i+1}, y_{i+1})$ szorzója $c_2 = 0,5$ továbbá $a_2 = 1$ és $b_{21} = 1$. A Trapéz módszert leíró Butcher tábla:

0	0	0
1	0,5	0,5
	0,5	0,5

A táblából kiolvasható, hogy a módszer két-lépcsős, implicit, másodrendben konzisztens.

6. fejezet

Alkalmazás kémiai feladatokra

6.1. Michaelis–Menten-kinetika

Az enzimek rendkívül fontos szerepet töltenek be a biológia rendszerekben. Hatásuk révén a szervezetben nélkülözhetetlen kémiai reakciók gyorsulnak fel, amelyek másként csak lassan mennének végbe. Az enzimek folyamatokat gyorsító hatásának kvantitatív leírása már egy évszázada alapvető kérdésnek számít a biokémiában. Leonor Michaelis és Maud Menten 1913-ban publikáltak egy cikket [8], amelynek lényege az enzimek kinetikai hatását viszonylag nagy általánossággal leíró egyenlet felfedezése volt. Egy évtizeddel később George Edward Briggs és John Burdon Sanderson Haldane az egyenletet molekuláris alapokon értelmezték, vagyis kémiai magyarázatot adtak rá, a részecskék szabályszerű kölcsönhatását feltételezve. A következőkben a Michaelis–Menten-kinetikát mutatjuk be [5]. Ismertetjük az enzimek által gyakorolt gyorsító hatás matematikai modelljét. A módszer érthetőségét elősegítve először definiálunk pár fogalmat:

6.1.1. Definíció. Az enzim olyan fehérje, ami katalizátorként más anyagok kémiai változását segíti elő, míg magát az enzim nem változtatja meg.

6.1.2. Definíció. A szubsztrát olyan alapanyag, amelyre hatnak az enzimek.

6.1.3. Definíció. A disszociáció két vagy több részre bomlást jelent.

6.1.4. Definíció. Az asszociáció két vagy több részecske összekapcsolódása.

6.1.5. Definíció. A katalizátor olyan anyag, ami egy folyamat sebességét megváltoztatni képes, de a művelet végén változatlan formában kerül ki belőle.

Az enzim kinetika a reakció időbeli lefolyását írja le, és csak bizonyos reakciófeltételek mellett érvényes. Olyan állandókat vezet be, amik az enzim reakciók jellemzésére különösen alkalmasak. A Michaelis–Menten-kinetika az első általánosan elfogadott leírás ezekre a reakcióra. Az enzim és szubsztrátja közötti megfordítható adduktumképződést követően egy termékképződéshez vezető reakció

szerepel. Ez a kémiai séma több különböző matematikai modellt generál. Közönséges, nemlineáris differenciálegyenlet-rendszerrel írható fel a négy résztvevő anyag koncentrációjának változása. Az enzim eredeti formája (E), az átalakítandó molekulát vagy szubsztrátot (S), az enzim szubsztráttal kölcsönhatásban lévő formuláját (ES), míg a termékmolekulát (P)-vel jelöljük. Három reláció szerepel a sémában:



A kiindulási anyag a bal, a termék pedig a jobb oldalon található. A három folyamatból az első az enzim és a szubsztrát közötti asszociáció, terméke enzim-szubsztrát (ES). A második egyenlet az enzimszubsztrát disszociációja az őt alkotó részecskékre. A harmadik folyamat a lényegi termékképződés, ahol visszamarad az enzim eredeti alakja, ami aztán új szubsztrátot köt meg, illetve P , azaz a végtermék keletkezik.

6.1.6. *Megjegyzés.* Az enzim a katalizátor szerepét játsza, mivel igen kevés enzim is nagy mennyiségű termék keletkezését okozhatja.

A (6.1)-es modelltől generált differenciálegyenlet-rendszer, más néven sebességi egyenlet

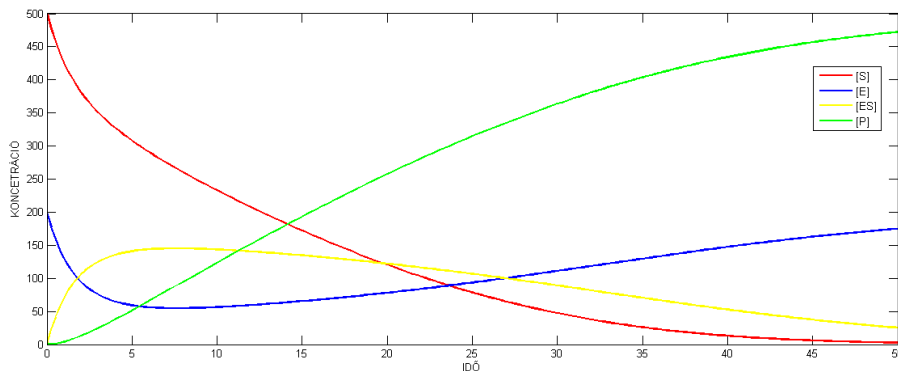
$$\begin{aligned} \frac{d[S]}{dt} &= -k_1[E][S] + k_{-1}[ES] \\ \frac{d[E]}{dt} &= -k_1[E][S] + k_{-1}[ES] + k_2[ES] \\ \frac{d[ES]}{dt} &= k_1[E][S] - k_{-1}[ES] - k_2[ES] \\ \frac{d[P]}{dt} &= k_2[ES] \end{aligned} \tag{6.2}$$

A deriváltak jelölésére $\frac{d}{dt}$ alakot használunk. $[E]$, $[S]$, $[ES]$, $[P]$ ismeretlen függvényeknek a koncentráció esetében a fizikai dimenzió, az anyagmennyiség és a térfogat hányadosa. A reakció sebességi együtthatók k_1 , k_{-1} , k_2 . A k_1 , és k_{-1} egymástól független paraméterek, annak ellenére, hogy olyan kémiai reakciók sebességi állandói amelyek egymás megfordításai, illetve dimenziójuk nem egyezik meg. Az idő dimenziójának reciproka k_2 és k_{-1} (elsőrendű) míg k_1 koncentráció és az idő szorzatának reciproka (másodrendű). Mivel ez egy kezdeti érték feladat, így $[E]_0$, $[S]_0$, $[ES]_0$ és $[P]_0$ paraméterek. Enzim katalízis eseteinél $[ES]_0 = [P]_0$ -lal $[S]_0 \gg [E]_0$; továbbá $k_{-1} \gg k_2$ és $k_1[S]_0 \gg k_2$ igazak.

A következőkben a Michaelis–Menten-kinetikát egy példán keresztül vizsgáljuk meg. Kezdeti értékeink, valamint a sebességi paraméterek értékei:

$[E]_0$	200
$[S]_0$	500
$[ES]_0$	0
$[P]_0$	0
k_1	0,001
k_{-1}	0,0001
k_2	0,1

A (6.2)-es differenciálegyenlet-rendszer megoldásának közelítésére a negyedrendű Runge–Kutta módszert használtuk, a táblázatban szereplő kezdeti és paraméterértékek mellett.



6.1. ábra. A Michaelis–Menten kinetika

Piros szín jelöli a szubsztrát, kék az enzim, sárga az enzimszubsztrát és zöld a termékmolekula koncentrációjának változását. A rajzon megfigyelhető, hogy bár kevés enzim volt kezdetben, mégis sok terméket tudott előállítani.

6.2. Egymást követő elemi reakciók

A bomlási sor a radioaktív bomlástermékek bomlásának sorozatát, mint összefüggő átalakulási láncot írja le [5],[6]. A radioaktív elemek többsége nem közvetlenül stabil állapotba bomlik, hanem több egymást követő bomlás során alakul át végül egy stabil izotóppá. Egy egymást követő elemi reakció modellje három anyag részvétele esetén a következőképpen írható fel:



ahol k_1 és k_2 reakciósebességi együtthatók. Ilyenek a radioaktív bomlási sorok.

Az anyagok koncentrációját $[A]$, $[B]$, $[C]$ -vel jelöljük, kezdeti koncentrációjukat pedig $[A]_0$, $[B]_0$, $[C]_0$ -lal. Az A anyag unimolekulás bomlásának sebessége

$$\frac{d[A]}{dt} = -k_1[A], \quad (6.4)$$

hiszen nincs olyan reakció amiben $[A]$ anyag termelődne. Az A anyagból B anyag képződik, $k_1[A]$ sebességgel, majd C anyaggá alakul $k_2[B]$ sebességgel. A B anyag koncentráció változásának sebessége:

$$\frac{d[B]}{dt} = k_1[A] - k_2[B]. \quad (6.5)$$

Végül B anyagból C anyag keletkezik:

$$\frac{d[C]}{dt} = k_2[B]. \quad (6.6)$$

Az első sebességi egyenlet (6.4) analitikus megoldása

$$[A] = [A]_0 e^{-k_1 t}. \quad (6.7)$$

Ha ezt az összefüggést a (6.5)-ös egyenletbe behelyettesítjük, valamint B anyag kezdeti koncentrációját nullának választjuk meg, akkor a B anyag koncentrációját leíró függvény:

$$[B] = \frac{k_1}{k_2 - k_1} \times (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}) [A]_0. \quad (6.8)$$

A mérlegegyenlet szerint minden t időpontban igaz, hogy

$$[A] + [B] + [C] = [A]_0. \quad (6.9)$$

Ebbe az egyenletbe (6.7) és (6.8) egyenleteket behelyettesítve meghatározható C anyag koncentrációjának függvénye:

$$[C] = \left\{ 1 + \frac{k_1 e^{-k_2 t} - k_2 e^{-k_1 t}}{k_2 - k_1} \right\} [A]_0. \quad (6.10)$$

Egy példán keresztül fogjuk bemutatni az Explicit Euler módszer, explicitté tett Implicit Euler módszer és a Heun módszer működését. A radioaktív bizmutizotóp polóniumon át ólomra alakulását vizsgáljuk, ahol a kezdeti értékek, valamint a reakciósebességi együtthatók:

k_1	k_2	$[A]_0$	$[B]_0$	$[C]_0$
0,144	$5,102 \cdot 10^{-3}$	1	0	0

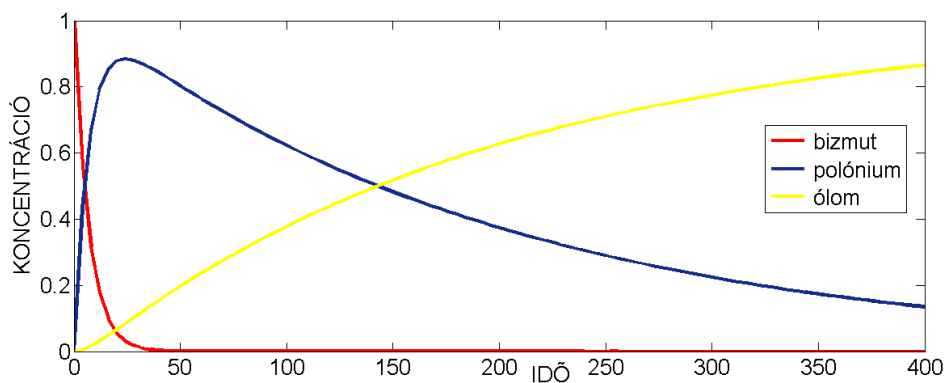
A radioaktív bizmutizotóp ólomra alakulását leíró modell:



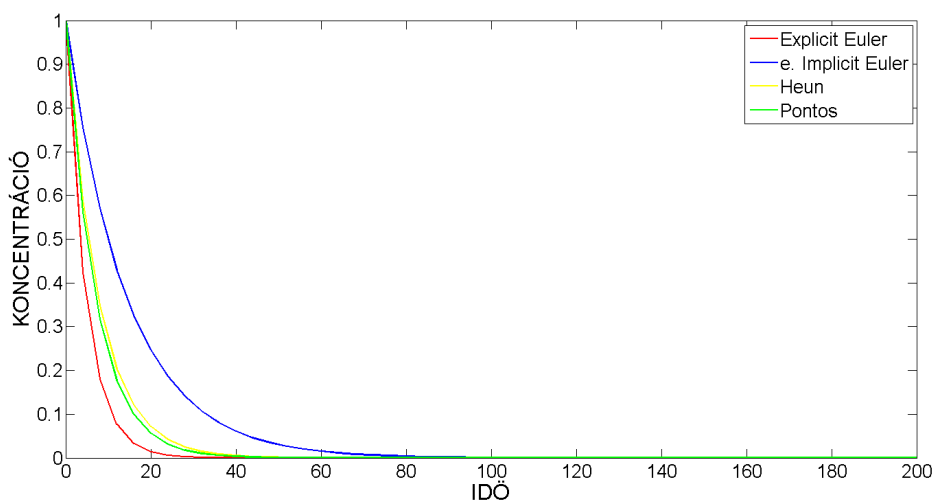
alakú. Az előzőek alapján a folyamatot leíró differenciálegyenlet rendszer:

$$\begin{aligned} \frac{d[Bi]}{dt} &= -k_1[Bi] \\ \frac{d[Po]}{dt} &= k_1[Bi] - k_2[Po] \\ \frac{d[Pb]}{dt} &= k_2[Po] \end{aligned} \quad (6.12)$$

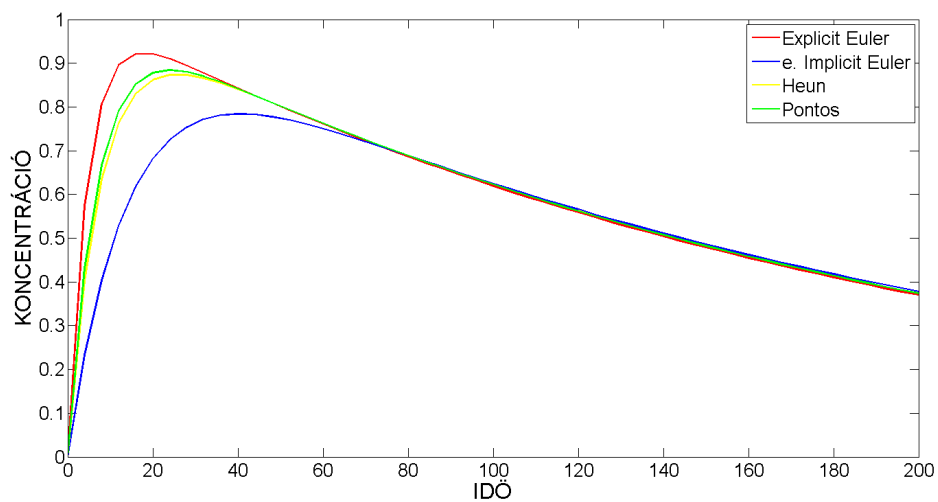
A fenti differenciálegyenlet rendszer megoldását Explicit Euler, explicitté tett Implicit Euler és a Heun módszerrel fogjuk közelíteni, vizsgáljuk a pontos és közelítő megoldások eltérését.



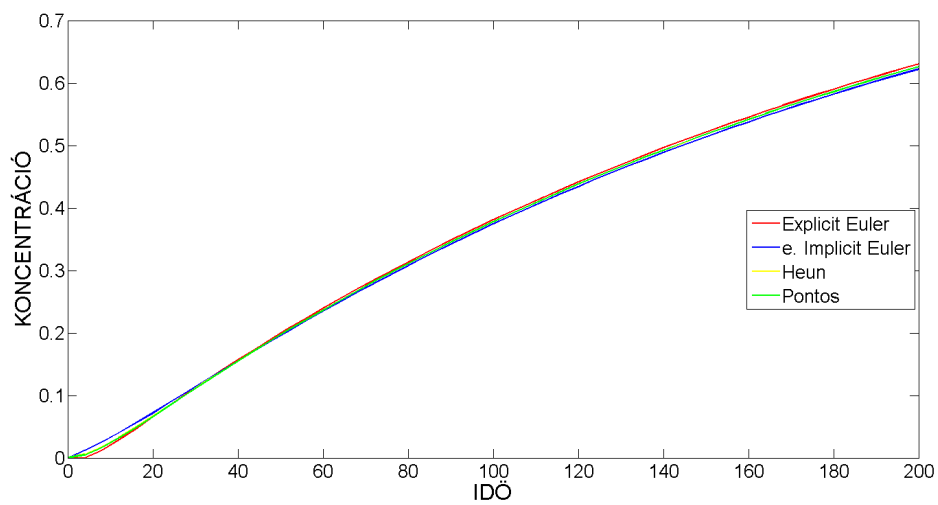
6.2. ábra. A pontos megoldás ábrázolása



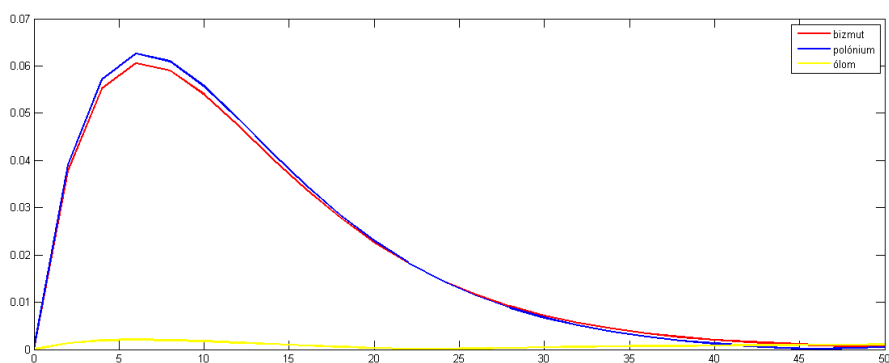
6.3. ábra. Az Explicit Euler módszerrel (piros), az explicitté tett Implicit Euler módszerrel (kék), a Heun módszerrel (sárga) számolt bizmutizotóp koncentráció értéke és a pontos (zöld) megoldás.



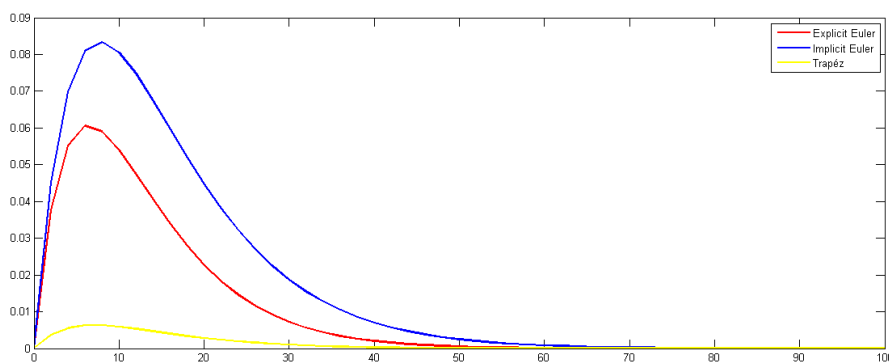
6.4. ábra. Az Explicit Euler módszerrel (piros), az explicitté tett Implicit Euler módszerrel (kék), a Heun módszerrel (sárga) számolt polónium koncentráció értéke és a pontos (kék) megoldás.



6.5. ábra. Az Explicit Euler módszerrel (piros), az explicitté tett Implicit Euler módszerrel (kék), a Heun módszerrel (sárga) számolt ólom koncentráció értéke és a pontos (kék) megoldás.



6.6. ábra. Az Explicit Euler módszerrel nyert közelítés és a pontos megoldás különbsége a három anyagfajta esetében, $h = 2$ lépésköz megválasztással.



6.7. ábra. Az Explicit Euler, explicitté tett Implicit Euler és a Heun módszerek hibája a bizmutizotóp koncentrációjának közelítésekor $h = 2$ lépésköz megválasztása esetén.

A következő táblázat a bizmutizotóp, polónium és az ólom koncentrációjának közelítésére használt Explicit Euler, explicitté tett Implicit Euler, Heun módszerek hibáját tartalmazza különböző lépésközök megválasztása esetén.

	Explicit			e. Implicit		
	Bi	Po	Pb	Bi	Po	Pb
$h = 4$	$3,1 \cdot 10^{-13}$	$3,9 \cdot 10^{-3}$	$3,9 \cdot 10^{-3}$	$8,3 \cdot 10^{-7}$	$4,02 \cdot 10^{-3}$	$4,02 \cdot 10^{-3}$
$h = 2$	$3,1 \cdot 10^{-13}$	$1,9 \cdot 10^{-3}$	$1,9 \cdot 10^{-3}$	$1,07 \cdot 10^{-10}$	$1,9 \cdot 10^{-3}$	$1,9 \cdot 10^{-3}$
$h = 1$	$2,7 \cdot 10^{-13}$	$9,7 \cdot 10^{-4}$	$9,7 \cdot 10^{-4}$	$3,4 \cdot 10^{-9}$	$9,8 \cdot 10^{-4}$	$9,8 \cdot 10^{-4}$

	Heun		
	Bi	Po	Pb
$h = 4$	$3,1 \cdot 10^{-12}$	$2,6 \cdot 10^{-5}$	$2,6 \cdot 10^{-5}$
$h = 2$	$1,9 \cdot 10^{-13}$	$6,6 \cdot 10^{-6}$	$6,6 \cdot 10^{-6}$
$h = 1$	$3,6 \cdot 10^{-14}$	$1,6 \cdot 10^{-6}$	$1,6 \cdot 10^{-6}$

A hibákat minden esetben $t = 200$ pontban számoltuk ki a közelítő módszerek és a pontos megoldás különbségének abszolút értékeként. A (6.2)-(6.7)-es ábrák és a fenti táblázatok alapján könnyen látható, hogy a legjobb közelítést a Heun módszerrel érhetjük el, mivel a lépésközök felezésével a hiba a negyedére csökkent, illetve a hibák értéke nagyságrendekkel kisebb mint a másik kettő módszer esetében. Az Explicit Euler módszernél megfigyelhető hogy a lépésközök csökkentésével a hibák feleződnek, akár csak az explicitté tett Implicit Euler módszer esetén.

7. fejezet

Összefoglalás

Ennek a szakdolgozatnak a célja, hogy numerikus megoldást találjunk differenciálegyenletek kezdetiérték-feladataira. Ennek érdekében számos egylépéses módszert ismertünk meg. Vizsgáltuk a numerikus módszerek konzisztenciáját, 0-stabilitását és konvergenciáját, illetve A-stabilitását. Néztünk példákat arra vonatkozóan, hogyan lehet egy implicit módszert explicitté tenni. Végezetül bemutattuk az enzimek folyamatokat gyorsító hatását leíró matematikai modellt, valamint ismertettük a modellt leíró nemlineáris differenciálegyenlet-rendszert. A differenciálegyenlet-rendszer megoldását negyedrendű Runge–Kutta módszerrel közelítettük. Egymást követő elemi reakciók során vizsgáltuk meg a radioaktív bizmutizotóp bomlásának koncentráció változását a közelítő módszereink segítségével, és hasonlítottuk össze az analitikus megoldás és a numerikus közelítések eltérését.

Irodalomjegyzék

- [1] *Differenciálegyenletek*, Scharnitzky Viktor, Budapest, Műszaki kiadó, 1979,.
- [2] *Numerikus modellezés és közönséges differenciálegyenletek numerikus megoldási módszerei*, Faragó István, 2013. (http://www.cs.elte.hu/~faragois/jegyzet_Szeged.pdf)
- [3] *Numerikus módszerek*, Faragó István–Horváth Róbert, Typotex, Budapest, 2003. (<http://tankonyvtar.ttk.bme.hu/pdf/30.pdf>)
- [4] *Numerikus módszerek*, Stoyan Gisbert, Takó Galina, Budapest, Typotex kiadó, 1997.
- [5] *Alkalmazott matematikai lapok*, Lente Gábor: A Michaelis–Menten-kinetika determinisztikus és sztochasztikus modelljei, 2016. (http://aml.math.bme.hu/wp-content/uploads/2017/03/33_Lente.pdf)
- [6] *Kémiai Kinetikai Számítási Módszerek*, Bittrich-Haberland-Just, Budapest, Műszaki könyvkiadó, 1984.
- [7] *Fizikai Kémia III. Változás*, P.W. Atkins, Budapest, Nemzeti Tankönyvkiadó, 1998.
- [8] *On a theorem of overshoot-undershoot kinetics*, *React. Kinet. Catal. Lett.* 1981.
- [9] *Közönséges differenciálegyenletek numerikus megoldása* Molnár Viktória, BSC szakdolgozat, 2010. (https://www.cs.elte.hu/blobs/diplomamunkak/bsc_alkmat/2010/molnar_viktoria.pdf)