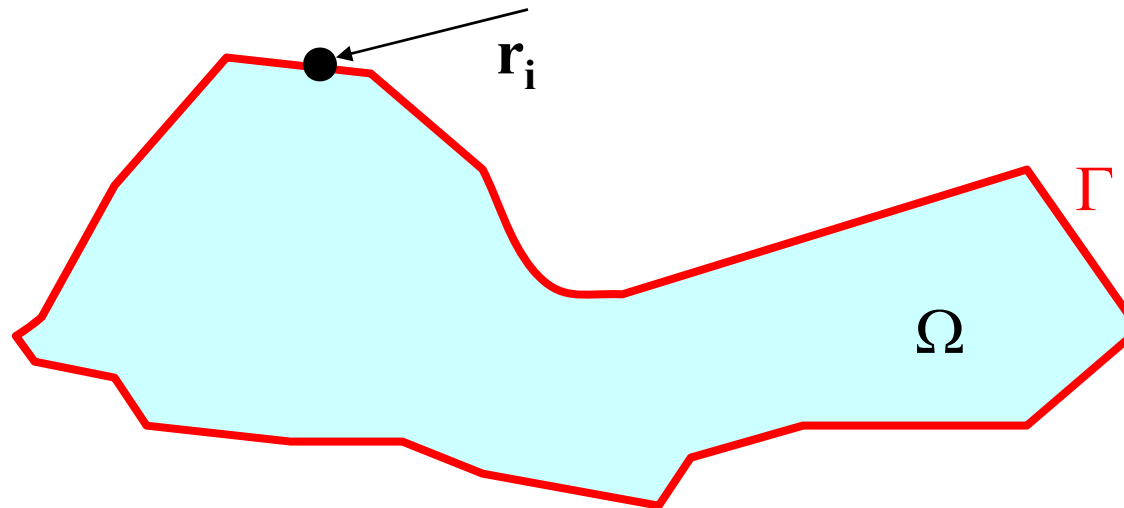


## numeryczne rozwiązywanie równań całkowych



metoda elementów brzegowych: punktem wyjściowym było rozwiązanie równania całkowego na brzegu obszaru całkowania

$$c_i u(\mathbf{r}_i) = \int_{\Gamma} (i u q - q u) d\Gamma + \int_{\Omega} i \rho(x) d\Omega$$

równanie: wygenerowane z równania różniczkowego  
scałkowanego ze swobodną funkcją Greena

## Typy równań całkowych w 1D:

Fredholma 1-go rodzaju

$$f(x) = \int_a^b K(x, t) \phi(t) dt$$

Fredholma 2-go rodzaju

$$\phi(x) = f(x) + \lambda \int_a^b K(x, t) \phi(t) dt$$

niewiadoma

jądro (*kernel*)

jeśli  $f(x)=0$   
jednorodne

Volterry 1-go rodzaju

$$f(x) = \int_a^x K(x, t) \phi(t) dt$$

Volterry 2-go rodzaju

$$\phi(x) = f(x) + \lambda \int_a^x K(x, t) \phi(t) dt$$

## Równania całkowe: skąd się biorą ?

Często: równanie całkowe : z różniczkowego z wstawionym warunkiem brzegowym (początkowym)

**Przykład 1:** problem początkowy dla oscylatora harmonicznego:

$$y(t)'' = -y(t)$$

$$y(t = 0) = 0$$

$$y'(t = 0) = 1$$

całkujemy równanie po czasie  
od  $t=0$  do chwili  $a$

$$\int_0^a y''(t) dt = - \int_0^a y(t) dt$$

$$\int_0^a y''(t)dt = - \int_0^a y(t)dt$$

$$y'(t)|_{t=0}^{t=a} = - \int_0^a y(t)dt$$

$$y'(a) = \underline{y'(0)} - \int_0^a y(t)dt$$

warunki początkowe  
włączane do równania  
[równanie całkowe  
= równanie różniczkowe  
+ warunkami brzegowe  
(początkowe)]

całkujemy jeszcze raz po  $a$  od 0 do  $b$

$$\int_0^b y'(a)da = by'(0) - \int_0^b \int_0^a y(t)dt da$$

$$y(b) = by'(0) - \int_0^b \int_0^a y(t)dt da + \underline{y(0)}$$

$$y(b) = by'(0) - \int_0^b \int_0^a y(t) dt da + y(0)$$

nasze warunki początkowe:

$$y(b) = b - \int_0^b \int_0^a y(t) dt da$$

tożsamość:  $\int_0^b \int_0^a y(t) dt da = \int_0^b (b-t)y(t) dt$

$$\int_0^b F(a) da$$

pochodna po b:

$$F(b) = \int_0^b y(t) dt$$

$$b \int_0^b y(t) dt - \int_0^b ty(t) dt$$

‘ po b

$$\int_0^b y(t) dt + by(b) - by(b)$$

dowód:  
zróżniczkować  
obustronnie

i sprawdzić,  
że dla b=0  
nie ma różnicy  
w równaniu przed  
różniczkowaniem

$$y(b) = b - \int_0^b \int_0^a y(t) dt da$$

$$\int_0^b \int_0^a y(t) dt da = \int_0^b (b - t) y(t) dt$$

$$y(b) = b - \int_0^b (b - t) y(t) dt$$

$b := x$

$$y(x) = x - \int_0^x (x - t) y(t) dt$$

rozpoznajemy:  
Volterra 2-go rodzaju,  
niejednorodne

$$\phi(x) = f(x) + \lambda \int_a^x K(x, t) \phi(t) dt$$

różniczkowe zagadnienie początkowe:  
produkuje całkowe równanie Volterra

**Przykład 2:** problem brzegowy dla równania oscylatora  
(normalne / własne drgania struny)

$$y(t)'' = -\omega^2 y(t)$$

$$y(t = 0) = 0$$

*t należy tutaj rozumieć jako położenie  
== równanie własne dla struny*

$$y(t = a) = 0$$

[uwaga, dla dowolnego  $\omega$  i dowolnego  $a$   
rozwiązanie wcale nie musi istnieć!] ( $\omega=1, a=2$ ) np.

---

*prawie te same wzory, dochodzimy do*

$$y(b) = by'(0) - \omega^2 \int_0^b \int_0^a y(t) dt da + y(0)$$

*korzystamy z  $y(0)=0$ , z tożsamości całkowej i przyjmujemy  $a=x, b=x$*

$$y(x) = xy'(0) - \omega^2 \int_0^x (x-t)y(t) dt \longrightarrow y'(0) = ?$$

$$y(x) = xy'(0) - \omega^2 \int_0^x (x-t)y(t)dt$$

$$y'(0) = ?$$

wstawiamy  $x=a$  i korzystamy z  $y(a)=0$

$$y'(0) = \frac{\omega^2}{a} \int_0^a (a-t)y(t)dt$$

Wstawić, dostaniemy:

Fredholma drugiego  
rodzaju

$$y(x) = \omega^2 \int_0^a K(x,t)y(t)dt$$

$$z \quad K(x,t) = \begin{cases} \frac{x}{a}(a-t) & \text{dla } t > x \\ \frac{t}{a}(a-x) & \text{dla } t < x \end{cases}$$

(funkcja Greena)

problem różniczkowy  
+ warunki brzegowe =  
równanie Fredholma



problem różniczkowy + warunki brzegowe = równanie Fredholma

problem różniczkowy + warunki początkowe = równanie Volterra

każde różniczkowe z warunkami daje się przekształcić do postaci całkowej  
ale czasem w sposób bezpowrotny  
(istnieją równania całkowe, których odpowiednik różniczkowy nie jest znany)

Numeryczne rozwiązywanie równania Fredholma drugiego rodzaju:

$$\phi(x) = f(x) + \lambda \int_a^b K(x, t)\phi(t)dt$$

**metoda Nystroma:**

$$\int_a^b y(t)dt = \sum_{j=1}^N w_j y(t_j)$$

kwadratura,  
dla ciągłych funkcji podcałkowych  
(ciągłych  $K$ )  
sprawdza się najlepiej metoda  
Gaussa.

$$\phi(x_i) = f(x_i) + \lambda \sum_{j=1}^N w_j K(x_i, t_j)\phi(t_j)$$

$$\phi(x_i) = f(x_i) + \lambda \sum_{j=1}^N w_j K(x_i, x_j)\phi(x_j)$$

$$\phi(x_i) = f(x_i) + \lambda \sum_{j=1}^N w_j K(x_i, x_j) \phi(x_j)$$

w postaci macierzowej:

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\phi} = \mathbf{f}$$

układ równań do rozwiązania

z:

$$A_{ij} = \delta_{i,j} - \lambda w_j K(x_i, x_j)$$

$$A_{ij} = \delta_{i,j} - \lambda \omega_j K(x_i, x_j)$$

$$A\phi=f$$

dla niejednorodnego równania Fredholma drugiego rodzaju

dla jednorodnego równania Fredholma drugiego rodzaju

$$y(t)'' = -\omega^2 y(t)$$

$$y(t=0) = 0$$

$$y(t=2) = 0$$

analitycznie  $\omega=(n\pi/2)$

$$y(x) = \omega^2 \int_0^a K(x, t) y(t) dt$$

$$K(x, t) = \begin{cases} \frac{x}{2}(2-t) & \text{dla } t > x \\ \frac{t}{2}(2-x) & \text{dla } t < x \end{cases}$$

zgodnie z wcześniejszymi wzorami:

$$Ay=0$$

takiego URL nie chcemy rozwiązywać:  
macierz musi być osobliwa aby istniało rozwiązanie  
niezerowe

równanie jednorodne:

$$A_{ij} = \delta_{i,j} - \lambda w_j K(x_i, x_j) \quad \lambda = \omega^2$$
$$y(x) = \omega^2 \int_0^a K(x, t) y(t) dt$$

$$\mathbf{A}\mathbf{y} = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{1}\mathbf{y} = \lambda \mathbf{B}\mathbf{y}$$

$$B_{ij} = w_j K(x_i, x_j)$$

$$\mathbf{B}\mathbf{y} = \sigma \mathbf{y} \quad \sigma = 1/\omega^2$$

---

W problemie modelowym: jądro symetryczne, ale  $\mathbf{B}$  symetryczna nie będzie bo wagi Gaussa do macierzy wprowadzane są w sposób niesymetryczny.

dla problemu modelowego dokładne wartości własne  $\sigma = (2/n\pi)^2$

Wyniki (numerycznie rozwiązanie jednorodnego równania Fredholma drugiego rodzaju = przykład, drgania własne struny)

$$B_{ij} = w_j K(x_i, x_j)$$

$$By = \sigma y$$

s [numer]  $(2/n\pi)^2$

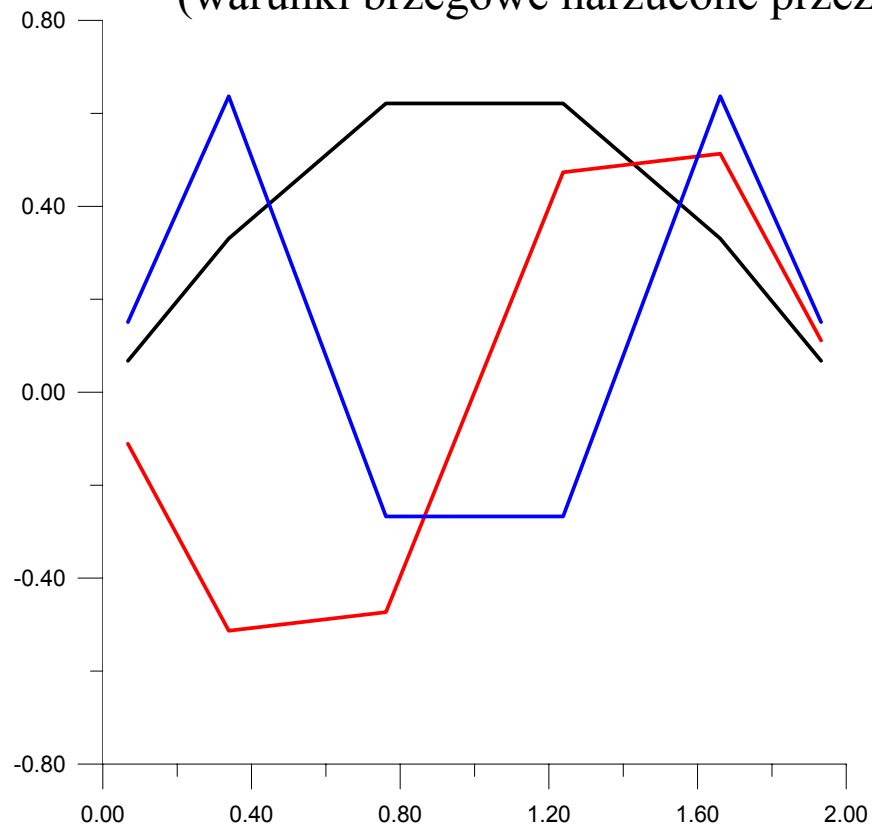
0.4225 0.4052

0.1173 0.1013

0.0584 0.0450

6 – punktowy Gauss:

(warunki brzegowe narzucone przez formę B)



Wyniki (numerycznie rozwiązanie jednorodnego równania Fredholma drugiego rodzaju = przykład, drgania własne struny)

$$B_{ij} = w_j K(x_i, x_j)$$

$$By = \sigma y$$

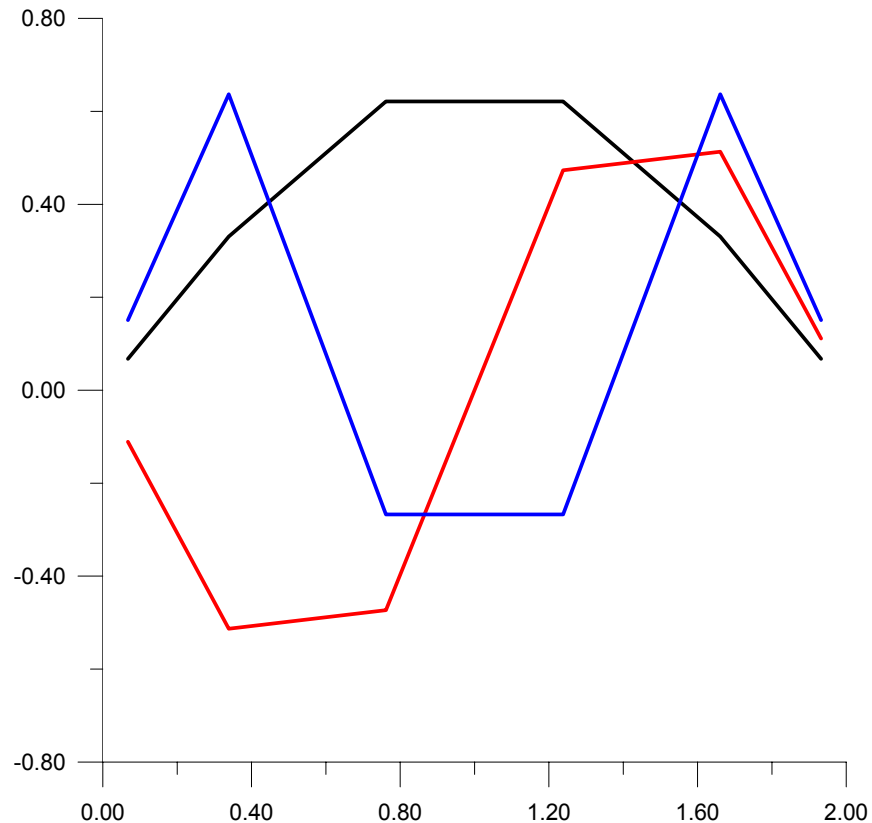
s [numer]  $(2/n\pi)^2$

0.4225 0.4052

0.1173 0.1013

0.0584 0.0450

6 – punktowy Gauss:



Wyniki (numerycznie rozwiązanie jednorodnego równania Fredholma drugiego rodzaju = przykład, drgania własne struny)

$$B_{ij} = w_j K(x_i, x_j)$$

$$By = \sigma y$$

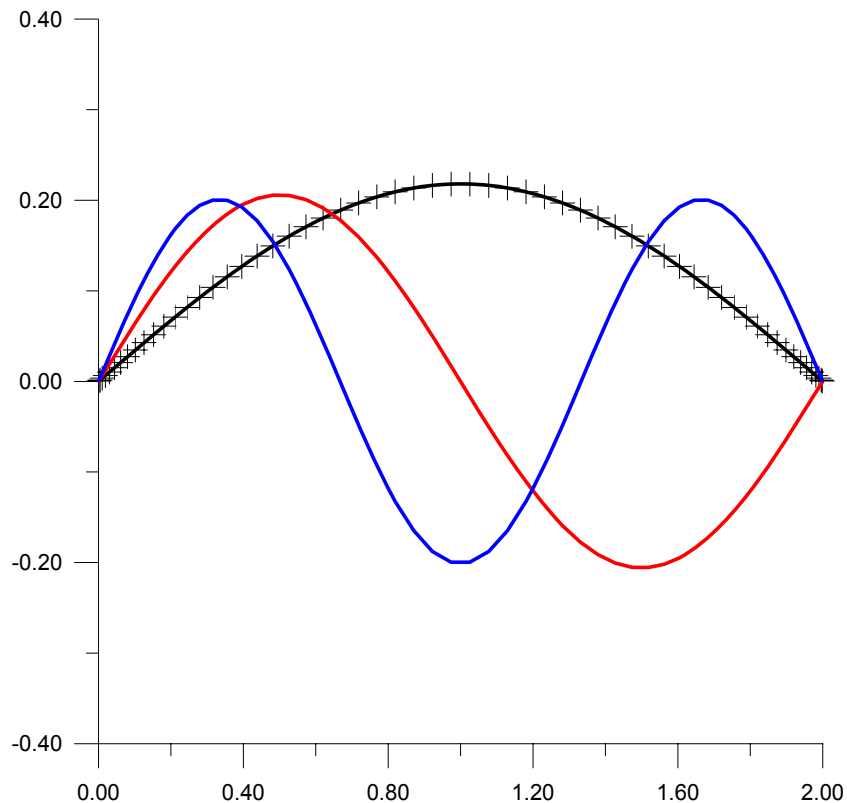
60 – punktowy Gauss:

s [numer]  $(2/n\pi)^2$

0.4054 0.4052

0.1015 0.1013

0.0451 0.0450





## równanie Fredholma drugiego rodzaju jednorodne i niejednorodne

niejednorodne

$$\phi(x) = f(x) + \lambda \int_a^b K(x, t)\phi(t)dt$$

$$\phi(x_i) = f(x_i) + \lambda \sum_{j=1} w_j K(x_i, x_j)\phi(x_j) \quad \text{tutaj lambda:}$$

*input*

$$A\phi=f$$

$$A_{ij} = \delta_{i,j} - \lambda w_j K(x_i, x_j)$$

jednorodne

$$\phi(x) = \cancel{f(x)} + \lambda \int_a^b K(x, t)\phi(t)dt$$

$$B_{ij} = w_j K(x_i, x_j)$$

$$By = \sigma y$$

tutaj lambda:  
*output*  
z równania własnego

Dla niejednorodnego:  
jeśli wstawić  $\lambda$  jako jedną z wartości  
własnych jednorodnego:

***A* osobliwa,**

***A\phi=f* nie ma jednoznacznego rozwiązania**

## Alternatywa Fredholma

$$\phi(x) = f(x) + \lambda \int_a^b K(x, t)\phi(t)dt \quad (1)$$

$$\phi(x) = \lambda_0 \int_a^b K(x, t)\phi(t)dt \quad (2)$$

równanie (1) ma jednoznaczne rozwiązanie jeśli  $\lambda$  nie jest jedną z  $\lambda_0$

dla numeryki: (1) zagrożone złym uwarunkowaniem  
gdy  $\lambda$  bliskie jednej z  $\lambda_0$

Dla niejednorodnego:  
jeśli wstawić  $\lambda$  jako jedną z wartości  
własnych jednorodnego:  
***A* osobliwa,**  
***A\phi=f* nie ma jednoznacznego rozwiązania**

Równania Fredholma pierwszego rodzaju: (transformaty całkowe)

Laplace'a:

$$\Psi(x) = \int_0^{\infty} \exp(-xt)\phi(t)dt$$

jądro eksponencjalne z rzeczywistym, urojonym argumentem

Fouriera

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ixt)\phi(t)dt$$

Uwaga!: zazwyczaj bardzo trudne do rozwiązania numerycznego  
stosuje się odwrotną transformatę Fouriera  
lub szuka się w tablicach odwrotnej Laplace'a

## Równanie Fredholma pierwszego rodzaju

$$f(x) = \int_a^b K(x, t)\phi(t)dt$$

spróbujemy podejść do problemu analogicznie do równań drugiego rodzaju:

$$f(x_i) = \sum_{j=1} w_j K(x_i, x_j)\phi(x_j)$$

$$A\phi=f$$

z

$$A_{ij} = w_j K(x_i, x_j)$$

Jeśli  $K$  ma odpowiednią formę, równanie może się udać rozwiązać.  
ale zazwyczaj należy liczyć się z poważnymi kłopotami

## Równanie Fredholma pierwszego rodzaju

$$f(x) = \int_a^b K(x, t)\phi(t)dt$$

spróbujmy analogicznie do równań drugiego rodzaju:

$$f(x_i) = \sum_{j=1} w_j K(x_i, x_j)\phi(x_j)$$

$$A\phi=f \quad z \quad A_{ij} = w_j K(x_i, x_j)$$

Weźmy skrajnie niemądry przykład, aby zilustrować trudność w rozwiązywaniu  
Równań tego typu  $K(x,t)=1, f = const$

$$f = \int_a^b \phi(t) dt$$

## Równanie Fredholma pierwszego rodzaju

$$f(x) = \int_a^b K(x, t)\phi(t)dt$$

spróbujmy analogicznie do równań drugiego rodzaju:

$$f(x_i) = \sum_{j=1} w_j K(x_i, x_j)\phi(x_j)$$

$$A\phi=f \quad z \quad A_{ij} = w_j K(x_i, x_j)$$

Weźmy skrajnie niemądry przykład, aby zilustrować trudność w rozwiązywaniu  
Równań tego typu  $K(x,t)=1, f = const$

$$f = \int_a^b \phi(t) dt$$

Problem jest taki: wiemy ile wynosi całka z funkcji.  
Pytanie: jaka to funkcja ?  
nieskończenie wiele rozwiązań.  
Macierz  $A_{ij}$  = osobliwa.

problem źle postawiony (rozwiązanie nie jest jednoznaczne)

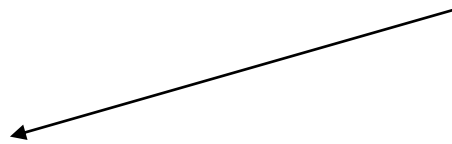
# Równania Volterra

Volterra 1-go rodzaju

$$f(x) = \int_a^x K(x, t)\phi(t)dt$$

Volterra 2-go rodzaju

$$\phi(x) = f(x) + \lambda \int_a^x K(x, t)\phi(t)dt$$



rozwiązujemy na siatce równomiernej, np. metodą trapezów

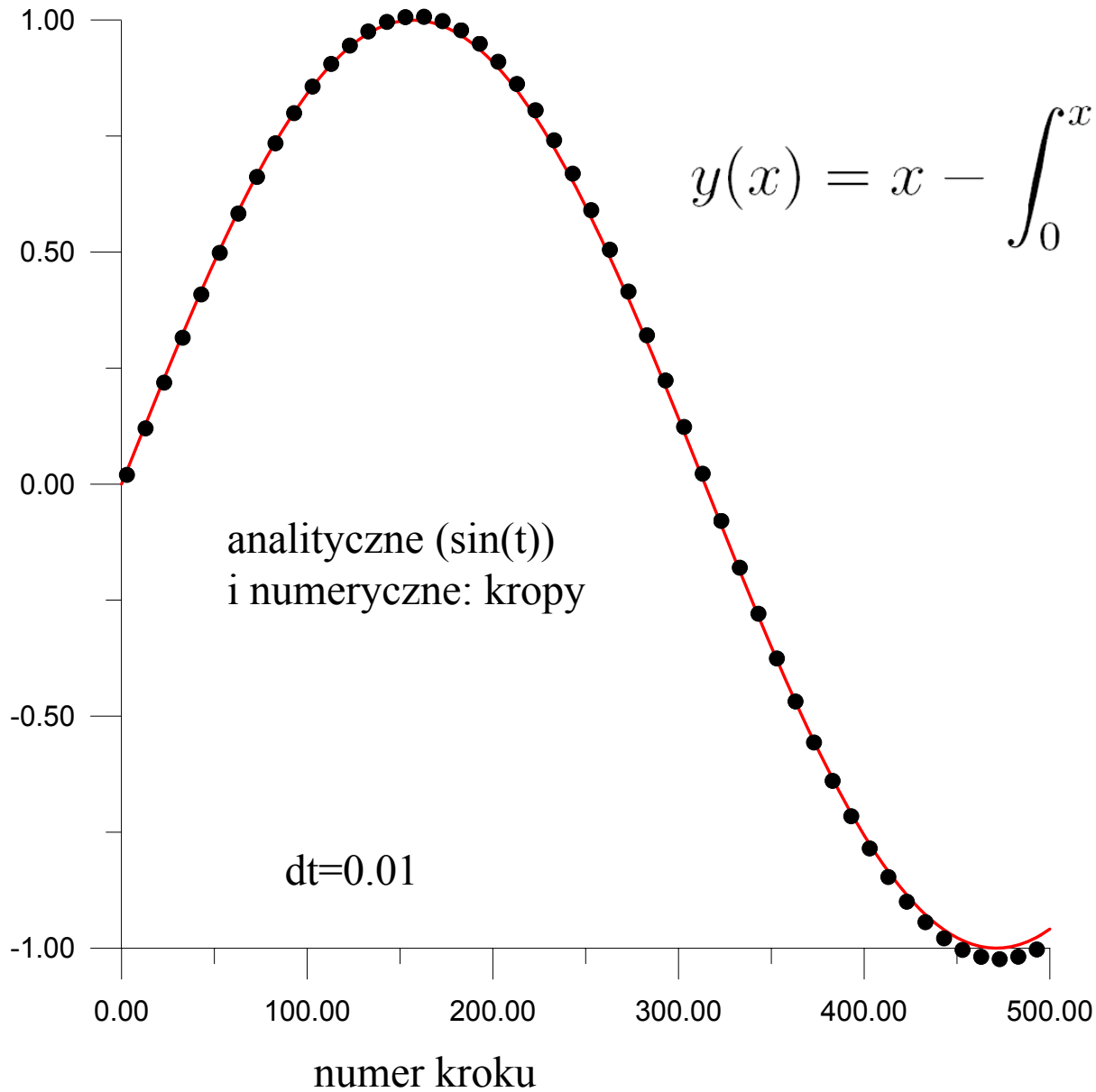
$$x_n = a + n\Delta x \quad \phi_n = \phi(x_n)$$

$$\phi_n = f_n + \lambda \sum_{j=1}^{n-1} \Delta x K(x_n, t_j)\phi_j + \lambda \frac{\Delta x}{2} (K(x_n, t_0)\phi_0 + K(x_n, t_n)\phi_n)$$

$$\phi_n = \left( f_n + \lambda \sum_{j=1}^{n-1} \Delta x K(x_n, t_j)\phi_j + \lambda \frac{\Delta x}{2} K(x_n, t_0)\phi_0 \right) / \left( 1 - \lambda \frac{\Delta x}{2} K(x_n, t_n) \right)$$

prosty schemat iteracyjny, nawet układu równań nie trzeba rozwiązywać  
dla 1-go rodzaju: zmienić znak  $f$ , skreślić jedynekę w mianowniku

Rachunek numeryczny dla Voltery drugiego typu  
ze wzorem trapezów





Metoda numeryczne dla równań całkowych:  
podsumowanie

Fredholma 1-go rodzaju

$$f(x) = \int_a^b K(x, t)\phi(t)dt$$

bywa bardzo trudne:  
problem z klasy odwrotnych

Fredholma 2-go rodzaju

$$\phi(x) = f(x) + \lambda \int_a^b K(x, t)\phi(t)dt$$

rekomendowana: metoda Nystroma  
z kwadraturą Gaussa  
produkuje układ równań (dla niejednorodnego)  
lub równanie własne (dla jednorodnego)

Volterry 1-go rodzaju

$$f(x) = \int_a^x K(x, t)\phi(t)dt$$

łatwe, pokrewne problemom początkowym  
rozwiązuje się kwadraturą o np. stałym kroku całkowania

Volterry 2-go rodzaju

$$\phi(x) = f(x) + \lambda \int_a^x K(x, t)\phi(t)dt$$

## Problemy zależne od czasu w metodzie elementów skończonych

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -v \frac{\partial u}{\partial x} \longrightarrow \text{np. równanie adwekcji}$$

$$u(x, t) = \sum_j u_j(t) \phi_j(x) \longleftarrow \begin{array}{l} \text{cała zależność czasowa} \\ \text{włożona do współczynników} \\ \text{rozwinienia w bazie funkcyjnej} \end{array}$$

$u_j(t)$  – wartość rozwiązania w węźle  $j$  w chwili  $t$

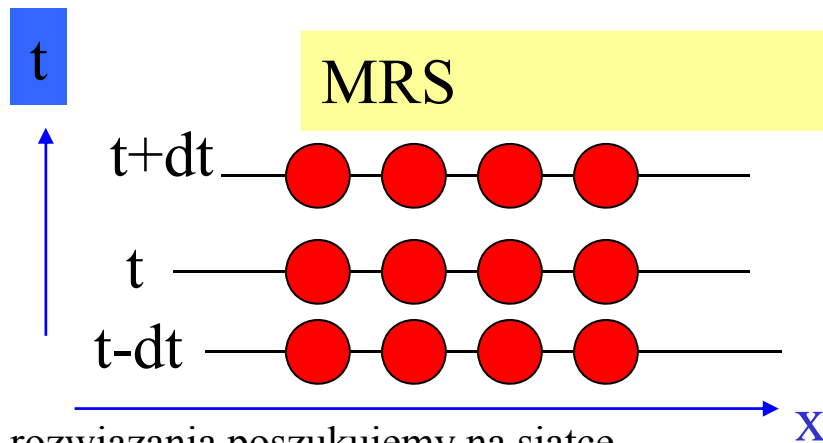
# Problemy zależne od czasu w metodzie elementów skończonych

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -v \frac{\partial u}{\partial x} \rightarrow \text{np. równanie adwekcji}$$

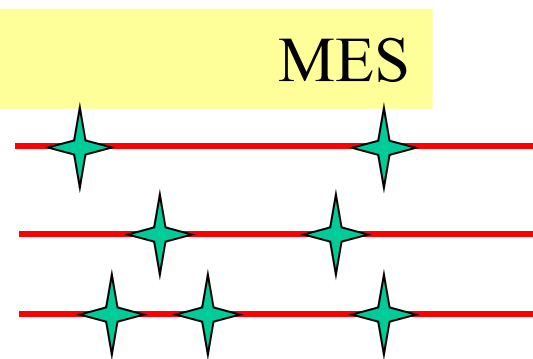
$$u(x, t) = \sum_j u_j(t) \phi_j(x) \leftarrow \begin{array}{l} \text{cała zależność czasowa} \\ \text{włożona do współczynników} \\ \text{rozwinienia w bazie funkcyjnej} \end{array}$$

$u_j(t)$  – wartość rozwiązania w węźle  $j$  w chwili  $t$

interesuje nas rozwiązanie w *dyskretnych* chwilach czasowych  
opis zmiennej położeniowej natomiast: ciągły



rozwiązania poszukujemy na siatce punktów dyskretnych w czasie i przestrzeni



rozwiązanie: dyskretne w  $t$ , ciągłe w  $x$   
węzły funkcji kształtu mogą się przesuwac w  $t$

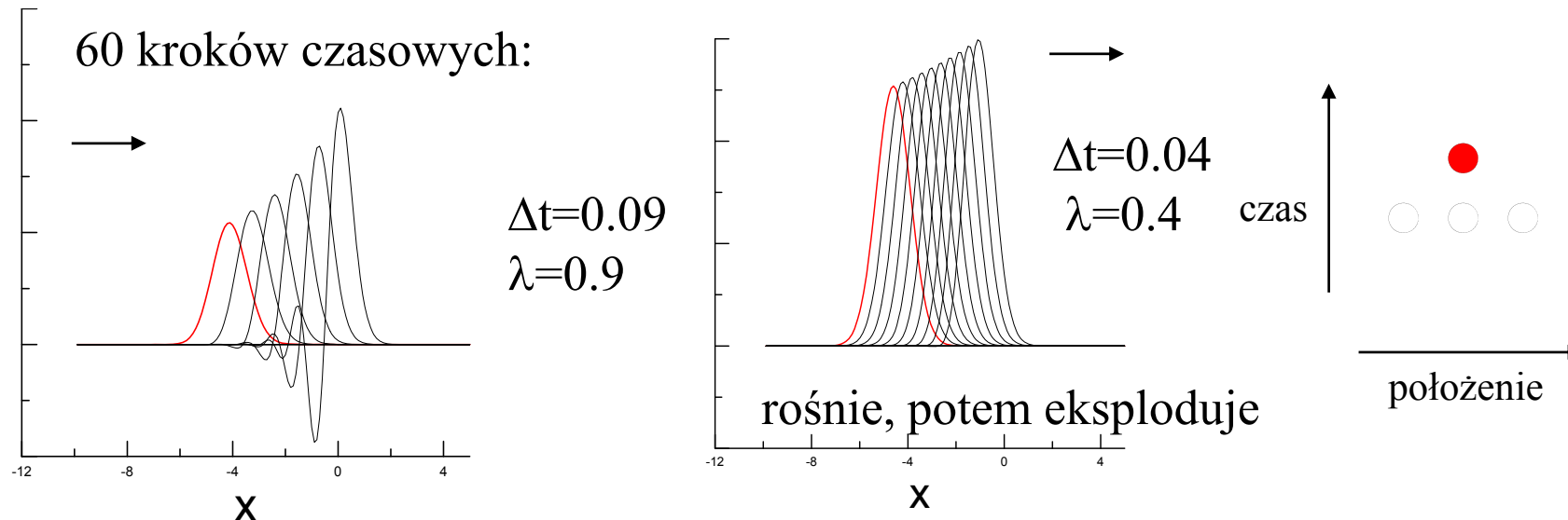
czas = będzie traktowany jak w metodzie różnic skończonych

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -v \frac{\partial u}{\partial x} \quad \text{równanie adwekcji}$$

Jawny schemat Eulera w metodzie różnic skończonych (niestabilny bezwzględnie)

$$\frac{u(j, n + 1) - u(j, n)}{\Delta t} = -v \frac{u(j + 1, n) - u(j - 1, n)}{2\Delta x} + O(\Delta t, \Delta x^2)$$

$$u(j, n + 1) = -v\Delta t \frac{u(j + 1, n) - u(j - 1, n)}{2\Delta x} + u(j, n) + O(\Delta t^2, \Delta x^2)$$



## MES: z czasem

$$u(x, t) = \sum_j u_j(t) \phi_j(x)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -v \frac{\partial u}{\partial x}$$

$$u(x, t + dt) = \sum_j u_j(t + dt) \phi_j(x)$$

---

## MES: z czasem

$$u(x, t) = \sum_j u_j(t) \phi_j(x) \qquad \frac{\partial u}{\partial t} = -v \frac{\partial u}{\partial x}$$

$$u(x, t + dt) = \sum_j u_j(t + dt) \phi_j(x)$$

---

w MRS: stabilny był schemat z jednostronnie liczoną pochodną przestrzenną (upwind)  
pochodna czasowa liczona była jak w jawnej metodzie Eulera

**O stabilności schematu decydował sposób liczenia pochodnych przestrzennych.**

teraz pochodne przestrzenne policzymy dokładnie (w wybranej bazie)

czy pomoże to ustabilizować schemat?

$$\frac{u(x, t + dt) - u(x, t)}{dt} = -v \frac{\partial u(x, t)}{\partial x}$$

$$u(x, t + dt) = -v dt \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} + u(x, t)$$

$$\sum_j u_j(t + dt) \phi_j(x) = -v dt \sum_j u_j(t) \phi_j'(x) + \sum_j u_j(t) \phi_j(x)$$

## MES: z czasem

$$\sum_j u_j(t + dt)\phi_j(x) = -vdt \sum_j u_j(t)\phi_j'(x) + \sum_j u_j(t)\phi_j(x)$$

układ równań na zależność od czasu wartości w węzłach  
wyprowadzamy jak w metodzie Galerkinia przez rzutowanie na elementy bazowe

$$\times \phi_k(x) \int dx$$

$$\sum_j u_j(t + dt)\phi_j(x) = -vdt \sum_j u_j(t)\phi_j'(x) + \sum_j u_j(t)\phi_j(x) \\ \times \phi_k(x) \int dx$$

---

dostajemy równanie macierzowe:

$$\sum_j O_{kj}u_j(t + dt) = -vdt \sum_j F_{kj}u_j(t) + \sum_j O_{kj}u_j(t)$$



$$\sum_j u_j(t + dt)\phi_j(x) = -vdt \sum_j u_j(t)\phi'_j(x) + \sum_j u_j(t)\phi_j(x) \\ \times \phi_k(x) \int dx$$


---

dostajemy równanie macierzowe:

$$\sum_j O_{kj}u_j(t + dt) = -vdt \sum_j F_{kj}u_j(t) + \sum_j O_{kj}u_j(t)$$

$$O_{kj} = \langle \phi_k | \phi_j \rangle \quad (\text{macierz przekrywania,} \\ \text{zwana również macierzą masy})$$

$$F_{kj} = \langle \phi_k | \phi'_j \rangle$$

$$\sum_j O_{kj}u_j(t + dt) = \sum_j P_{kj}u_j(t)$$

$$P_{kj} = -vdt F_{kj} + O_{kj}$$

równanie adwekcji MES z dyskretyzacją czasową typu Eulera

$$\sum_j O_{kj} u_j(t + dt) = \sum_j P_{kj} u_j(t)$$

$$P_{kj} = -v dt F_{kj} + O_{kj}$$

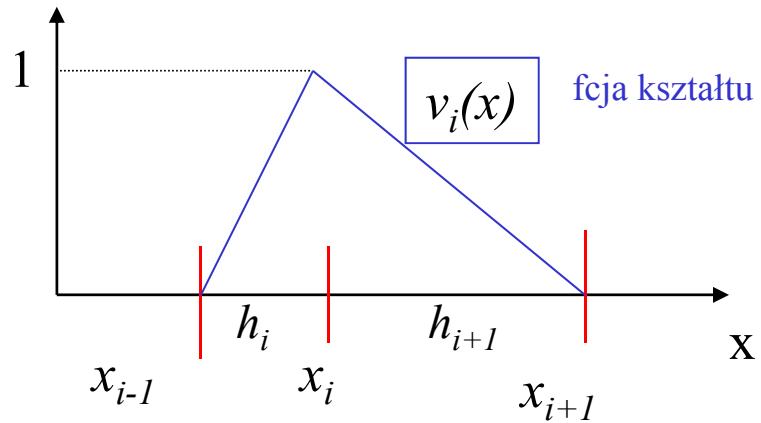
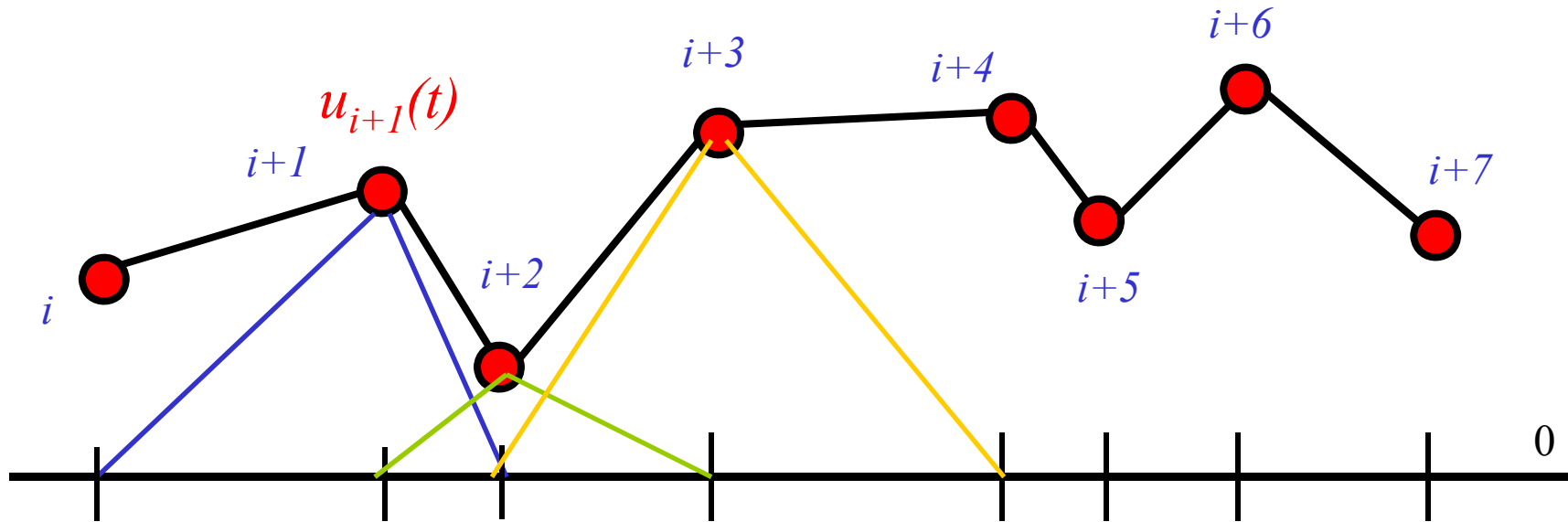
jeden krok wymaga rozwiązania układu równań:

$$\mathbf{O}\mathbf{u}(t+dt) = \mathbf{P}\mathbf{u}(t)$$

konkretna forma macierzowa problemu – zależy od wyboru funkcji kształtu

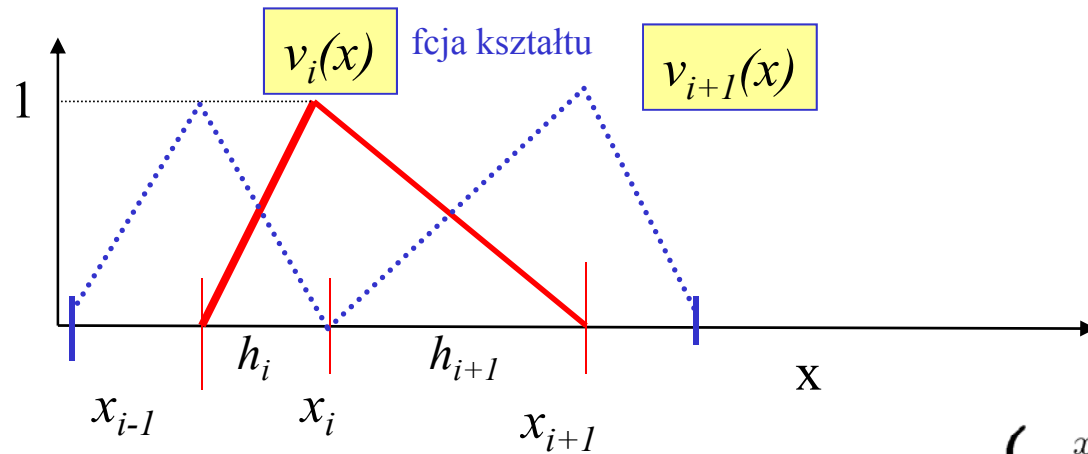
→ do aplikacji numerycznej  
musimy jakąś bazę wybrać  
weźmy MES z funkcjami odcinkami  
liniowymi

liniowe funkcje kształtu



$$v_i(x) = \begin{cases} \frac{x-x_{i-1}}{x_i-x_{i-1}} & x \in K_i \\ \frac{x_{i+1}-x}{x_{i+1}-x_i} & x \in K_{i+1} \\ 0 & x \notin K_i \cup K_{i+1} \end{cases}$$

$$O_{kj} = \langle v_k | v_j \rangle = \frac{1}{3} \left( \delta_{kj}(h_j + h_{j+1}) + \frac{1}{2}\delta_{(k+1,j)}h_j + \frac{1}{2}\delta_{(k-1,j)}h_{j+1} \right)$$



$$F_{kj} = \langle v_k | v'_j \rangle \quad v_i(x) = \begin{cases} \frac{x-x_{i-1}}{x_i-x_{i-1}} & x \in K_i \\ \frac{x_{i+1}-x}{x_{i+1}-x_i} & x \in K_{i+1} \\ 0 & x \notin K_i \cup K_{i+1} \end{cases}$$

$$v_i(x)v'_i(x) = \begin{cases} \frac{x-x_{i-1}}{(x_i-x_{i-1})^2} & x \in K_i \\ \frac{x-x_{i+1}}{(x_{i+1}-x_i)^2} & x \in K_{i+1} \\ 0 & x \notin K_i + K_{i+1} \end{cases}$$

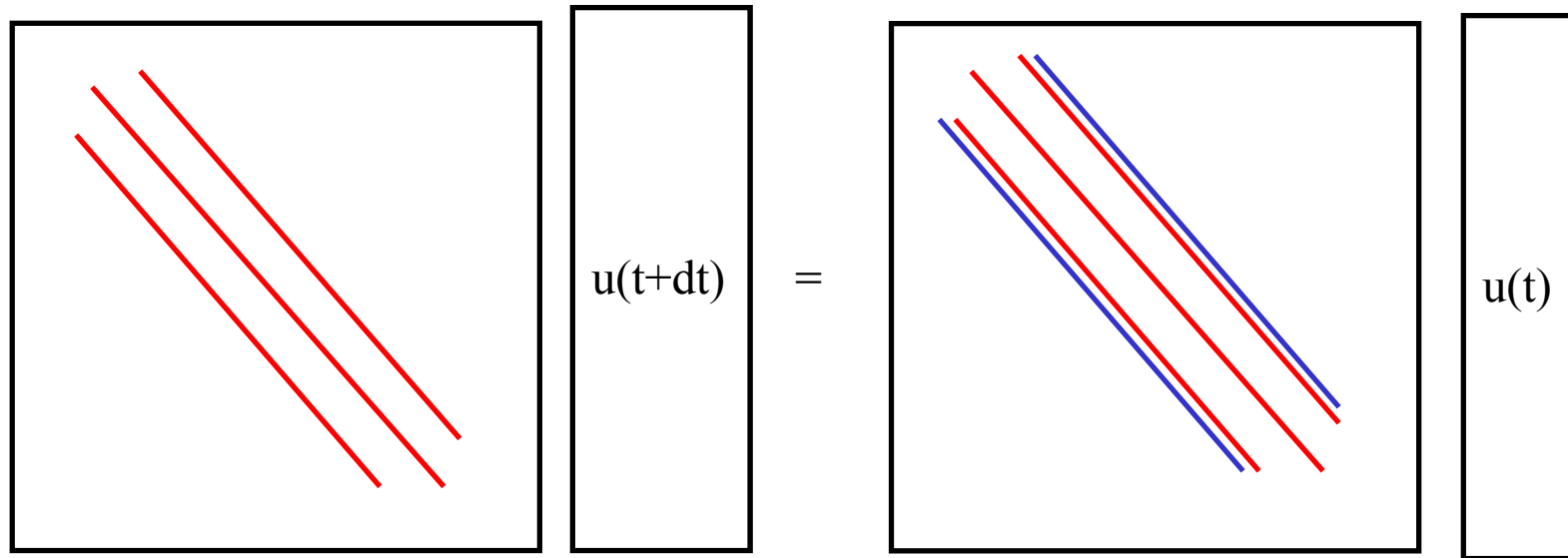
$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} v_i(x)v'_i(x)dx = \frac{1}{2} \quad \int_{x_i}^{x_{i+1}} v_i(x)v'_i(x)dx = -\frac{1}{2}$$

$$F_{ii} = 0, F_{i,i+1} = +1/2, F_{i,i-1} = -1/2$$

$$\sum_j O_{kj} u_j(t + dt) = \sum_j P_{kj} u_j(t)$$

$$P_{kj} = \underbrace{-vdt F_{kj}}_{\text{blue}} + \underbrace{O_{kj}}_{\text{red}}$$

forma macierzowa:  $\mathbf{O}u(t+dt) = \mathbf{P}u(t)$



dla siatki równomiernej  
 2/3 dx na diagonalu  
 1/6 nad i pod

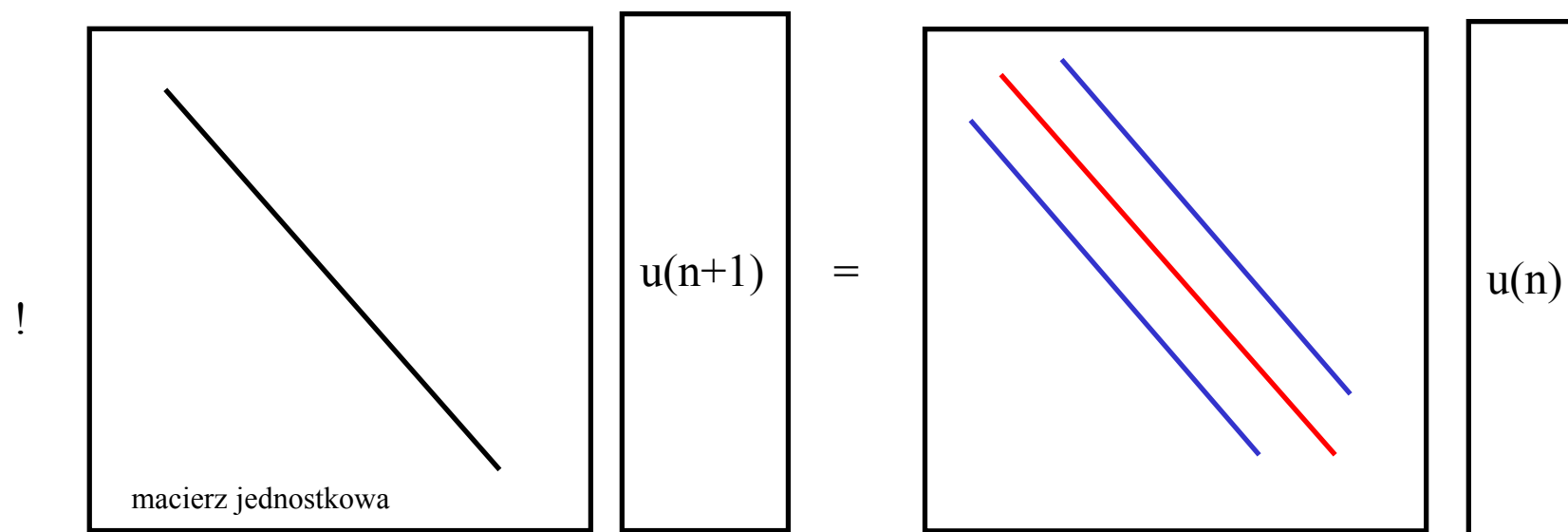
nad diagonalą +1/2 (-vdt)  
 pod diagonalą -1/2 (-vdt)

---

Euler dla MRS funkcjonował jak podstawienie. Teraz mamy rozwiązać układ równań.

Jak wygląda w MRS wygląda równanie schematu jawnego?

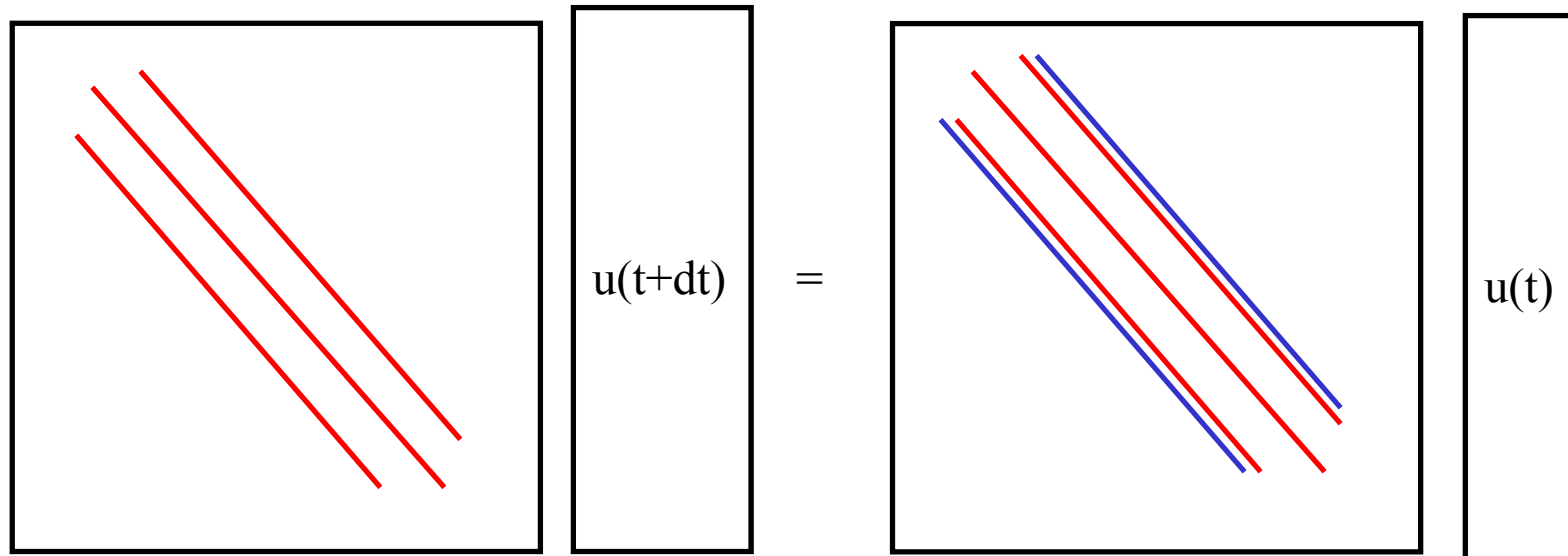
$$u(j, n + 1) = u(j, n) - v\Delta t \frac{u(j + 1, n) - u(j - 1, n)}{2\Delta x}$$



$$\sum_j O_{kj} u_j(t + dt) = \sum_j P_{kj} u_j(t)$$

$$P_{kj} = \underbrace{-v dt F_{kj}}_{\text{blue}} + \underbrace{O_{kj}}_{\text{red}}$$

forma macierzowa:



MES zbudowana na podstawie jawnego schematu Eulera:

nie działa jak podstawienie!

musimy a) odwrócić macierz O [będzie gęsta]

b) albo rozwiązać układ równań

metodą iteracyjną

odwrócić O:

```
A:=matrix(4,4,[2/3,1/6,0,0, 1/6,2/3,1/6,0 ,0,1/6,2/3,1/6, 0,0,1/6,2/3]);
```

$$A = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & 0 & 0 \\ \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} & 0 \\ 0 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \\ 0 & 0 & \frac{1}{6} & \frac{2}{3} \end{bmatrix}$$

```
inverse(A);
```

$$\begin{bmatrix} \frac{336}{209} & \frac{-90}{209} & \frac{24}{209} & \frac{-6}{209} \\ \frac{-90}{209} & \frac{360}{209} & \frac{-96}{209} & \frac{24}{209} \\ \frac{24}{209} & \frac{-96}{209} & \frac{360}{209} & \frac{-90}{209} \\ \frac{-6}{209} & \frac{24}{209} & \frac{-90}{209} & \frac{336}{209} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{u}(t+dt) := \mathbf{O}^{-1} \mathbf{P} \mathbf{u}(t)$$

wartość w węzle  $j$  w chwili  $t+dt$  zależy od wartości we wszystkich węzłach w chwili  $t$

- jak dla schematu niejawnego w MRS

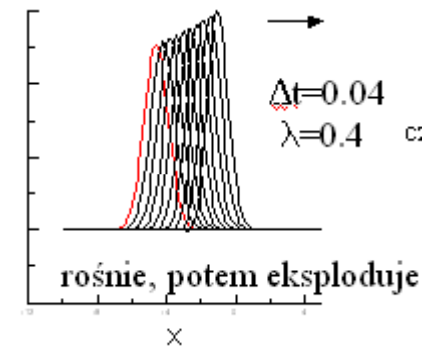
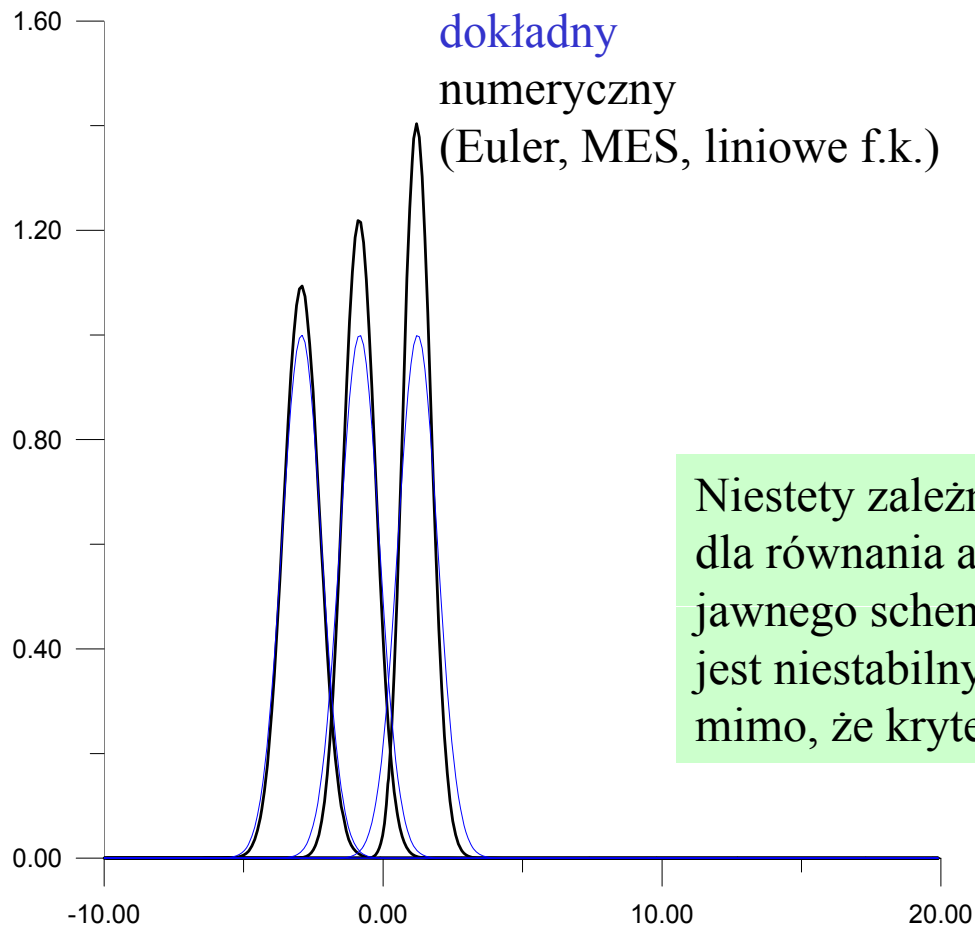
2) Przeszłość numeryczna dla  $u_j(t)$  : wszystkie punkty dla  $t_p \leq t$ , kryterium CFL spełnione zawsze (w przeciwieństwie do Eulera jawnego)



2) Przeszłość numeryczna dla  $u_j(t)$  : wszystkie punkty dla  $t_p \leq t$ , kryterium CFL spełnione zawsze (w przeciwieństwie do Eulera jawnego)

pomimo tego:

Wyniki MES:  
 $dx=0.1$   
 $dt=0.04$   
 $v=1$



Niestety zależny schemat MES zbudowany dla równania adwekcji na podstawie jawnego schematu Eulera, jest niestabilny (jak jawny Euler dla MRS) mimo, że kryterium CFL jest zawsze spełnione

W takim razie:

jeśli jawny Euler w MES nie daje metody podstawieniowej  
a zachowuje dokładność podobną dla MRS,  
spróbujmy skonstruować zależny od czasu schemat MES  
na podstawie niejawnego schematu Eulera  
(który jest stabilny bezwzględnie dla MRS)

## MES na podstawie niejawnego (wstecznego Eulera)

$$\frac{u(x, t + dt) - u(x, t)}{dt} = -v \frac{\partial u(x, t + dt)}{\partial x}$$

$$u(x, t + dt) + vdt \frac{\partial u(x, t + dt)}{\partial x} = u(x, t)$$

$$u(x, t) = \sum_j u_j(t) \phi_j(x)$$

$$u(x, t + dt) = \sum_j u_j(t + dt) \phi_j(x)$$

## MES na podstawie niejawnego (wstecznego Eulera)

$$\frac{u(x, t + dt) - u(x, t)}{dt} = -v \frac{\partial u(x, t + dt)}{\partial x}$$

$$u(x, t + dt) + vdt \frac{\partial u(x, t + dt)}{\partial x} = u(x, t)$$

$$u(x, t) = \sum_j u_j(t) \phi_j(x)$$

$$u(x, t + dt) = \sum_j u_j(t + dt) \phi_j(x)$$

$$\sum_j (O_{kj} + vdt F_{kj}) u_j(t + dt) = \sum_j O_{kj} u_j(t)$$

## MES na podstawie niejawnego (wstecznego Eulera)

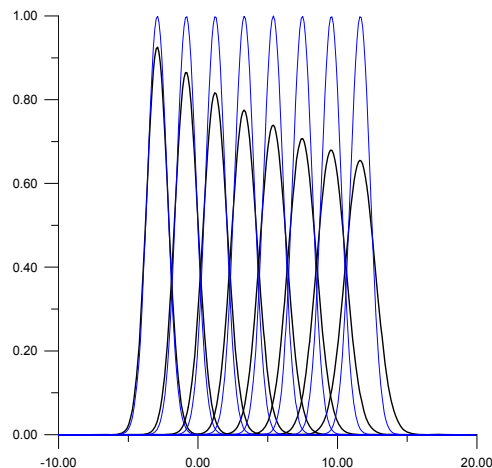
$$\frac{u(x, t + dt) - u(x, t)}{dt} = -v \frac{\partial u(x, t + dt)}{\partial x}$$

$$u(x, t + dt) + vdt \frac{\partial u(x, t + dt)}{\partial x} = u(x, t)$$

$$u(x, t) = \sum_j u_j(t) \phi_j(x)$$

$$u(x, t + dt) = \sum_j u_j(t + dt) \phi_j(x)$$

$$\sum_j (O_{kj} + vdt F_{kj}) u_j(t + dt) = \sum_j O_{kj} u_j(t)$$

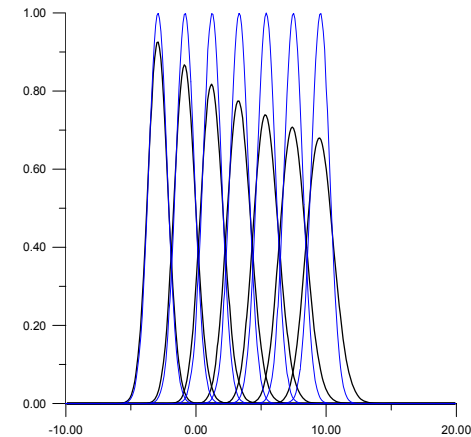


MES: stabilny, lecz podobnie jak w MRS obarczony dyspersją (można ją stłumić małymi krokami przestrzennym i czasowym)

Wyniki są prawie nierozróżnialne MES/MRS  
MES z wstecznym Eulerem równie dobry/zły jak MRS

$\Delta t = 0.04$

wsteczny Euler w MRS



$dx = 0.1$

weźmy przyzwoity schemat: Cranka - Nicolsona

$$\frac{u(x, t + dt) - u(x, t)}{dt} = \frac{1}{2} \left( -v \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} - v \frac{\partial u(x, t + dt)}{\partial x} \right)$$

$$u(x, t + dt) = u(x, t) + \frac{dt}{2} \left( -v \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} - v \frac{\partial u(x, t + dt)}{\partial x} \right)$$

wzór trapezów

weźmy przyzwoity schemat: Cranka - Nicolsona

$$\frac{u(x, t + dt) - u(x, t)}{dt} = \frac{1}{2} \left( -v \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} - v \frac{\partial u(x, t + dt)}{\partial x} \right)$$

$$u(x, t + dt) = u(x, t) + \frac{dt}{2} \left( -v \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} - v \frac{\partial u(x, t + dt)}{\partial x} \right)$$

wzór trapezów

$$u(x, t + dt) + \frac{vdt}{2} \frac{\partial u(x, t + dt)}{\partial x} = u(x, t) - \frac{vdt}{2} \frac{\partial u(x, t)}{\partial x}$$

weźmy przyzwoity schemat: Cranka - Nicolsona

$$\frac{u(x, t + dt) - u(x, t)}{dt} = \frac{1}{2} \left( -v \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} - v \frac{\partial u(x, t + dt)}{\partial x} \right)$$

$$u(x, t + dt) = u(x, t) + \frac{dt}{2} \left( -v \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} - v \frac{\partial u(x, t + dt)}{\partial x} \right)$$

wzór trapezów

$$u(x, t + dt) + \frac{vdt}{2} \frac{\partial u(x, t + dt)}{\partial x} = u(x, t) - \frac{vdt}{2} \frac{\partial u(x, t)}{\partial x}$$

$$u(x, t + dt) = \sum_j u_j(t + dt) \phi_j(x) \quad u(x, t) = \sum_j u_j(t) \phi_j(x)$$

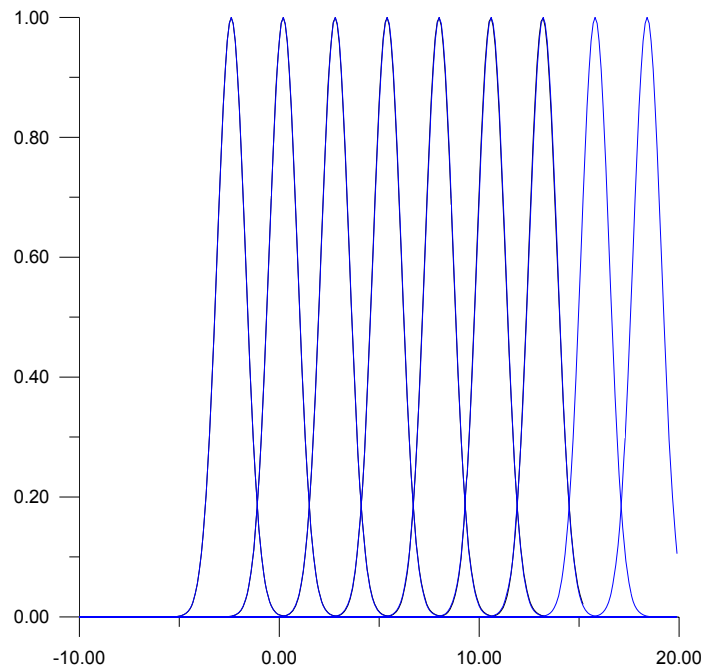
$$\sum_j \left( O_{kj} + \frac{vdt}{2} F_{kj} \right) u_j(t + dt) = \sum_j \left( O_{kj} - \frac{vdt}{2} F_{kj} \right) u_j(t)$$

$$F_{kj} = \langle \phi_k | \phi_j' \rangle \quad O_{kj} = \langle \phi_k | \phi_j \rangle$$

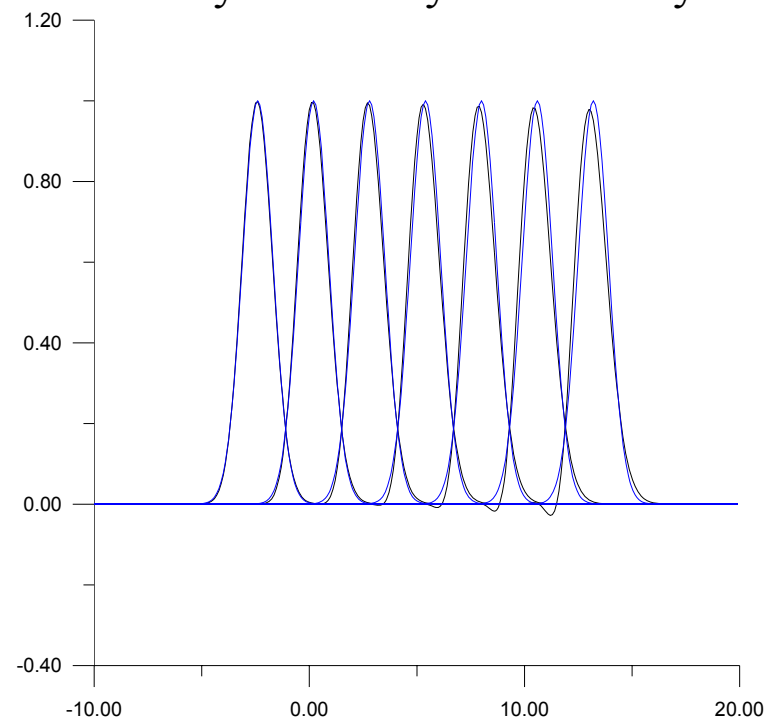


# Metoda CN: MES (liniowe funkcje kształtu) a MRS

MES CN,  $dx=0.1$ ,  $dt=0.05$   
2 krzywe: analityczna/numeryczna



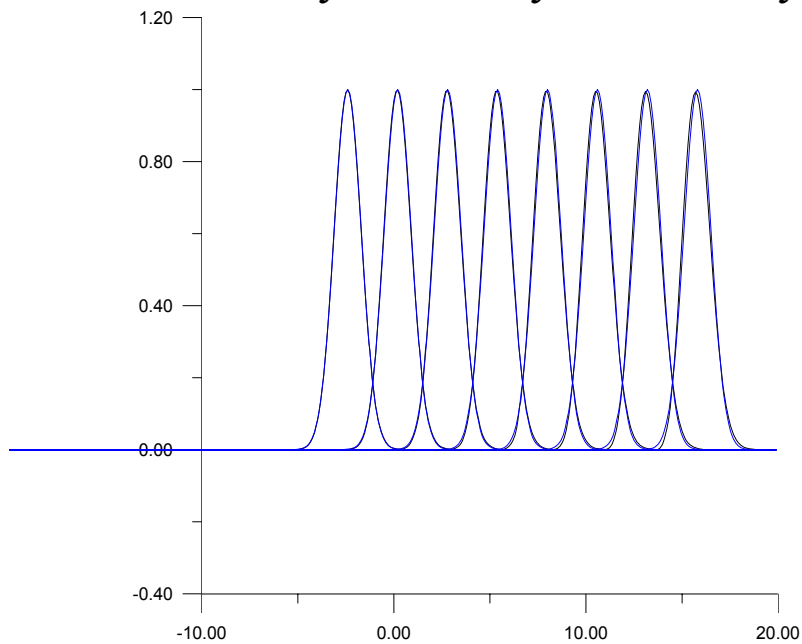
MRS CN,  $dx=0.1$ ,  $dt=0.05$   
2 krzywe: analityczna/numeryczna



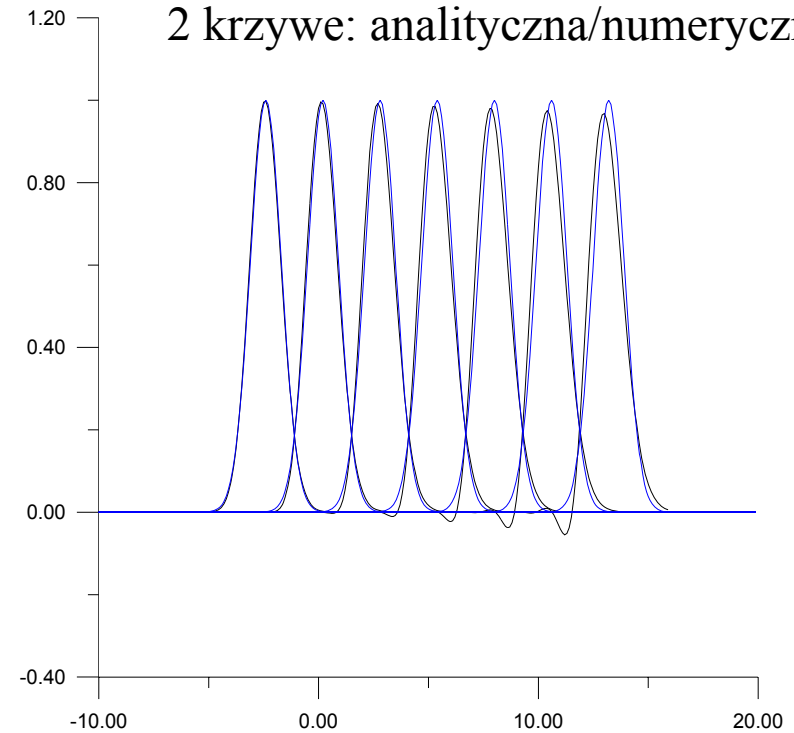
# Metoda CN: MES (liniowe funkcje kształtu) a MRS

krok krytyczny CFL  
 $v dt = dx$

MES CN,  $dx=0.1$ ,  $dt=0.1$   
2 krzywe: analityczna/numeryczna

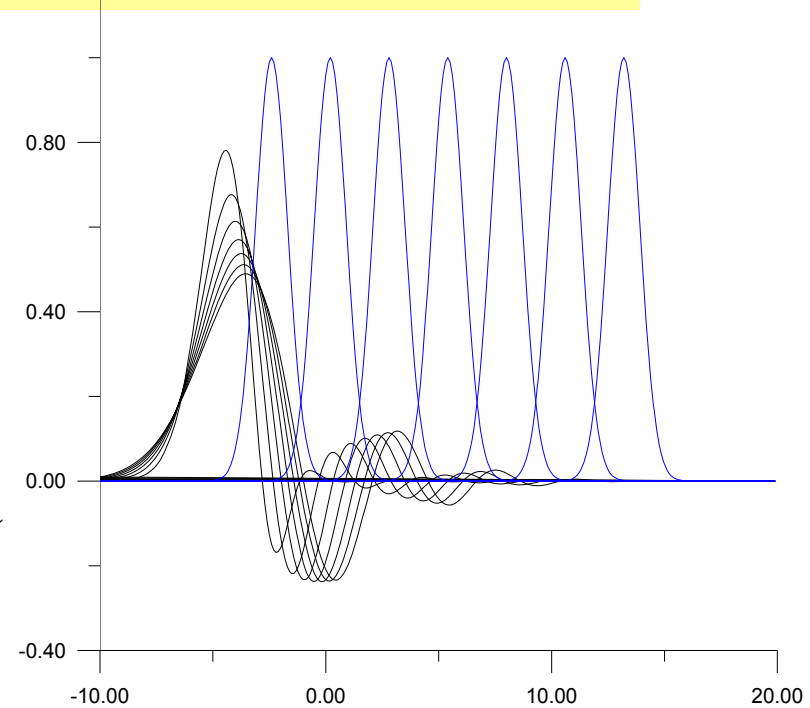
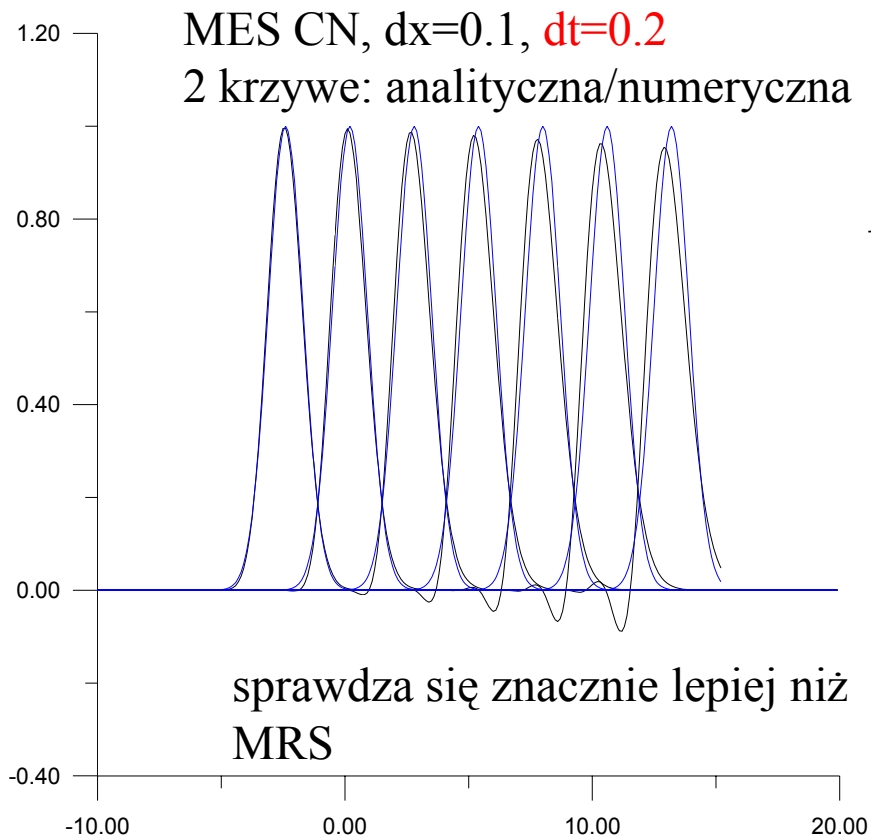


MRS CN,  $dx=0.1$ ,  $dt=0.1$   
2 krzywe: analityczna/numeryczna



# Metoda CN: MES (liniowe funkcje kształtu) a MRS

> CFL



MES już z liniowymi f.k. pozwala zwiększyć krok czasowy kilkukrotnie względem MRS

## Metoda CN: MES (liniowe funkcje kształtu) a MRS

Wniosek: dla schematów Eulera dominuje błąd z dyskretyzacji czasowej [lokalny  $O(\Delta t^2)$ ] a nie przestrzennej. Stąd jakość MRS i MES podobna.

Schemat CN – czasowy błąd lokalny  $O(\Delta t^3)$

MES zaczyna górować nad MRS ze względu na dokładniejszy opis współrzędnej przestrzennej

(dokładne pochodne przestrzenne dla wybranych funkcji kształtu)

## Analiza stabilności MES zależnych od czasu

w MRS analiza stabilności: prosta – von Neumanna, dla MES nieco trudniej  
w jednokrowych schematach– każdy krok czasowy można zapisać jako:

$$\mathbf{u} := \mathbf{A}\mathbf{u}$$

## Analiza stabilności MES zależnych od czasu

w MRS analiza stabilności: prosta – von Neumanna, dla MES nieco trudniej

w jednokrowowych schematach– każdy krok czasowy można zapisać jako:

$$\mathbf{u}:=\mathbf{A}\mathbf{u}$$

analiza stabilności: jeśli macierz iteracji  $\mathbf{A}$  ma wartości własne  $|\lambda|>1$

– metoda będzie niestabilna [rozwiązanie numeryczne eksploduje do nieskończoności]

## Analiza stabilności MES zależnych od czasu

w MRS analiza stabilności: prosta – von Neumanna, dla MES nieco trudniej  
w jednokrowych schematach– każdy krok czasowy można zapisać jako:

$$\mathbf{u}:=\mathbf{A}\mathbf{u}$$

analiza stabilności: jeśli macierz iteracji  $\mathbf{A}$  ma wartości własne  $|\lambda|>1$   
– metoda będzie niestabilna [rozwiązanie numeryczne eksploduje do nieskończoności]

Problem: formę  $\mathbf{A}$  w dla MES w 2D trudno przewidzieć, bo zależy od generacji siatki

## Analiza stabilności MES zależnych od czasu

w MRS analiza stabilności: prosta – von Neumanna, dla MES nieco trudniej  
w jednokrowowych schematach – każdy krok czasowy można zapisać jako:

$$\mathbf{u} := \mathbf{A}\mathbf{u}$$

analiza stabilności: jeśli macierz iteracji  $\mathbf{A}$  ma wartości własne  $|\lambda| > 1$   
– metoda będzie niestabilna [rozwiązanie numeryczne eksploduje do nieskończoności]

Problem: formę  $\mathbf{A}$  w dla MES w 2D trudno przewidzieć, bo zależy od generacji siatki

Analiza wykonalna dzięki twierdzeniu **Ironsa/Treharne'a**  
wartości własne macierzy iteracji  $\mathbf{A}$  są ograniczone wartościami  
własnymi odpowiednika  *$\mathbf{A}$  dla pojedynczych elementów ( $\mathbf{A}_I$ )*

(zamiast analizować macierz globalną – analizować będziemy lokalne)



## Analiza stabilności MES zależnych od czasu

w MRS analiza stabilności: prosta – von Neumanna, dla MES nieco trudniej  
w jednokrokowych schematach– każdy krok czasowy można zapisać jako:

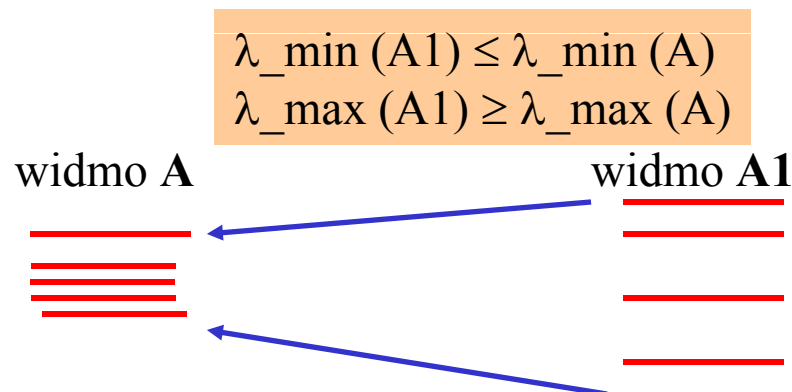
$$\mathbf{u} := \mathbf{A}\mathbf{u}$$

analiza stabilności: jeśli macierz iteracji  $\mathbf{A}$  ma wartości własne  $|\lambda| > 1$   
– metoda będzie niestabilna [rozwiązanie numeryczne eksploduje do nieskończoności]  
(przypomnienie: *dla zbieżności iteracyjnych metod rozwiązywania układów równań liniowych:  $|\lambda| < 1$* )

Problem: formę  $\mathbf{A}$  w dla MES w 2D trudno przewidzieć, bo zależy od generacji siatki

Analiza wykonalna dzięki twierdzeniu **Ironsa/Treharne'a**  
wartości własne macierzy iteracji  $\mathbf{A}$  są ograniczone wartościami  
własnymi odpowiednika  $\mathbf{A1}$  *dla pojedynczych elementów (A1)*

(zamiast analizować macierz globalną – analizować będziemy lokalne)



jeśli widmo  $A1$  zmieści się co do modułu poniżej jedynki  
metoda jest na pewno stabilna.

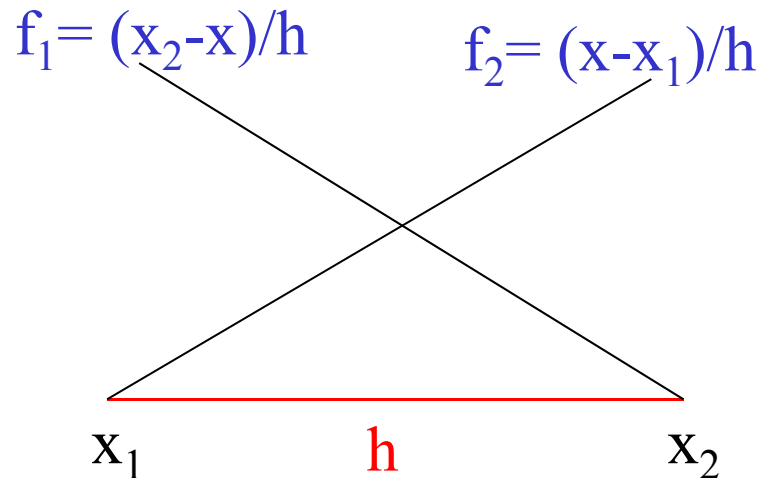
tw. Ironsa: przydatne w udowadnianiu stabilności,  
zobaczmy,  
że oszacowania Ironsa bardzo bliskie dokładnym granicom  
stabilności

Przykład zastosowania tw. Ironsa:

analiza stabilności dla równania adwekcji MES: CN + liniowe funkcje kształtu

$$\sum_j \left( O_{kj} + \frac{v dt}{2} F_{kj} \right) u_j(t + dt) = \sum_j \left( O_{kj} - \frac{v dt}{2} F_{kj} \right) u_j(t)$$

lokalne macierze O i F liczymy wg:



$$\begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix}$$

$$O_{kl} = \langle f_k | f_l \rangle$$

$$F_{kl} = \langle f_k | f_l' \rangle$$

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

do tw. Ironsa stosujemy macierze lokalne **bez składania** globalnej

złożyć musimy za to macierz jednego kroku czasowego aby uzyskać przepis w formie  $\mathbf{u} := \mathbf{A}\mathbf{u}$

Przykład zastosowania tw. Ironsa:

analiza stabilności dla równania adwekcji MES: CN + liniowe funkcje kształtu

$$\sum_j \left( O_{kj} + \frac{v dt}{2} F_{kj} \right) u_j(t + dt) = \sum_j \left( O_{kj} - \frac{v dt}{2} F_{kj} \right) u_j(t)$$

Przykład zastosowania tw. Ironsa:

analiza stabilności dla równania adwekcji MES: CN + liniowe funkcje kształtu

$$\sum_j \left( O_{kj} + \frac{vdt}{2} F_{kj} \right) u_j(t + dt) = \sum_j \left( O_{kj} - \frac{vdt}{2} F_{kj} \right) u_j(t)$$

$$\alpha = vdt$$

$$\left[ \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} + \frac{\alpha}{2} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \right] \mathbf{u} := \left[ \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} - \frac{\alpha}{2} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}$$

potrzebna forma w postaci:

$$\mathbf{u} := \mathbf{A}\mathbf{u}$$

$$[\text{znaczy } \mathbf{u}(t+dt) = \mathbf{A}\mathbf{u}(t)]$$

Przykład zastosowania tw. Ironsa:

analiza stabilności dla równania adwekcji MES: CN + liniowe funkcje kształtu

$$\sum_j \left( O_{kj} + \frac{vdt}{2} F_{kj} \right) u_j(t + dt) = \sum_j \left( O_{kj} - \frac{vdt}{2} F_{kj} \right) u_j(t)$$

$$\alpha = vdt$$

$$\left[ \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} + \frac{\alpha}{2} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \right] \mathbf{u} := \left[ \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} - \frac{\alpha}{2} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}$$

mnożymy prawą stronę z lewej strony przez odwrotność lewej strony

$$\mathbf{u} := \begin{pmatrix} 1 + \frac{\alpha}{h} & -\frac{\alpha}{h} \\ \frac{\alpha}{h} & 1 - \frac{\alpha}{h} \end{pmatrix} \mathbf{u}$$

macierz ma niezależnie od wartości kroku czasowego ( $\alpha$ )

podwójną wartość własną: 1

$\|\mathbf{u}\|$  pozostanie skończone dla dowolnej liczby iteracji, przy dowolnym kroku czasowym

## Analiza stabilności dla równania dyfuzji MES: jawny Euler+ liniowe funkcje kształtu

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Dla równania adwekcji schematy były stabilne lub nie niezależnie od kroku czasowego, dla dyfuzji jest inaczej: jawny s. Eulera można ustabilizować małym krokiem czasowym

Euler  $u(t + dt) = u(t) + dt D u(t)''$

$$\sum_j (\phi_k, \phi_j) u_j(t + dt) = \sum_j ((\phi_k, \phi_j) + D dt (\phi_k, \phi_j'')) u_j(t)$$

dla analizy stabilności:

↑

w macierzy **globalnej**  
 $-1/(h_j+h_{j+1})$  na diagonalu  
 $1/h_{i+1}$  na prawo od diagonalu

iteracja dla pojedynczego elementu:

$$\begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u} := \left[ \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} + D dt \begin{pmatrix} -\frac{1}{h} & \frac{1}{h} \\ \frac{1}{h} & -\frac{1}{h} \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}$$

znana forma

$$\begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u} := \left[ \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} + Ddt \begin{pmatrix} -\frac{1}{h} & \frac{1}{h} \\ \frac{1}{h} & -\frac{1}{h} \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}$$

$$\mathbf{u} := \left[ \mathbf{1} + \frac{Ddt}{h} \begin{pmatrix} 4 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{1}{h} & \frac{1}{h} \\ \frac{1}{h} & -\frac{1}{h} \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}$$

$$\mathbf{u} := \left[ \mathbf{1} + \frac{Ddt}{h^2} \begin{pmatrix} -6 & 6 \\ 6 & -6 \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u} := \left[ \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} + Ddt \begin{pmatrix} -\frac{1}{h} & \frac{1}{h} \\ \frac{1}{h} & -\frac{1}{h} \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}$$

$$\mathbf{u} := \left[ \mathbf{1} + \frac{Ddt}{h} \begin{pmatrix} 4 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{1}{h} & \frac{1}{h} \\ \frac{1}{h} & -\frac{1}{h} \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}$$

$$\mathbf{u} := \left[ \mathbf{1} + \frac{Ddt}{h^2} \begin{pmatrix} -6 & 6 \\ 6 & -6 \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}$$

$$\beta = Ddt/h^2$$

$$\begin{vmatrix} 1 - 6\beta - \lambda & 6\beta \\ 6\beta & 1 - 6\beta - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad 1 - 6\beta - \lambda = \pm 6\beta$$



$$\lambda = 1 - 12\beta \quad \text{lub} \quad \lambda = 1$$

$$1 \geq 1 - 12\beta \geq -1$$



$$1/6 \geq \beta$$



$$dt \leq h^2/6D$$



dostaliśmy gwarancje, że jeśli

$$\Delta t \leq \Delta x^2 / 6D$$

to MES z liniowymi funkcjami kształtu stabilne

---

dostaliśmy gwarancje, że jeśli

$$\Delta t \leq \Delta x^2 / 6D$$

to MES z liniowymi funkcjami kształtu stabilne

a dla MRS mieliśmy:

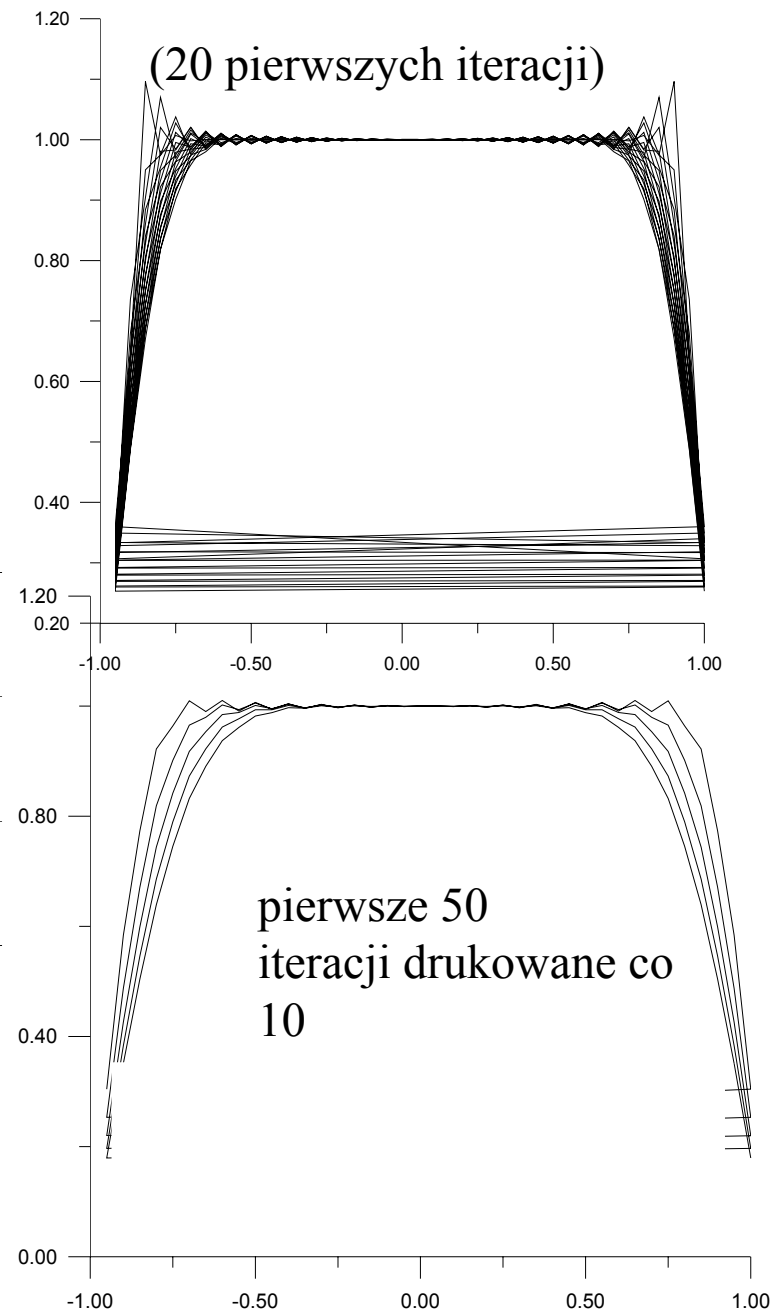
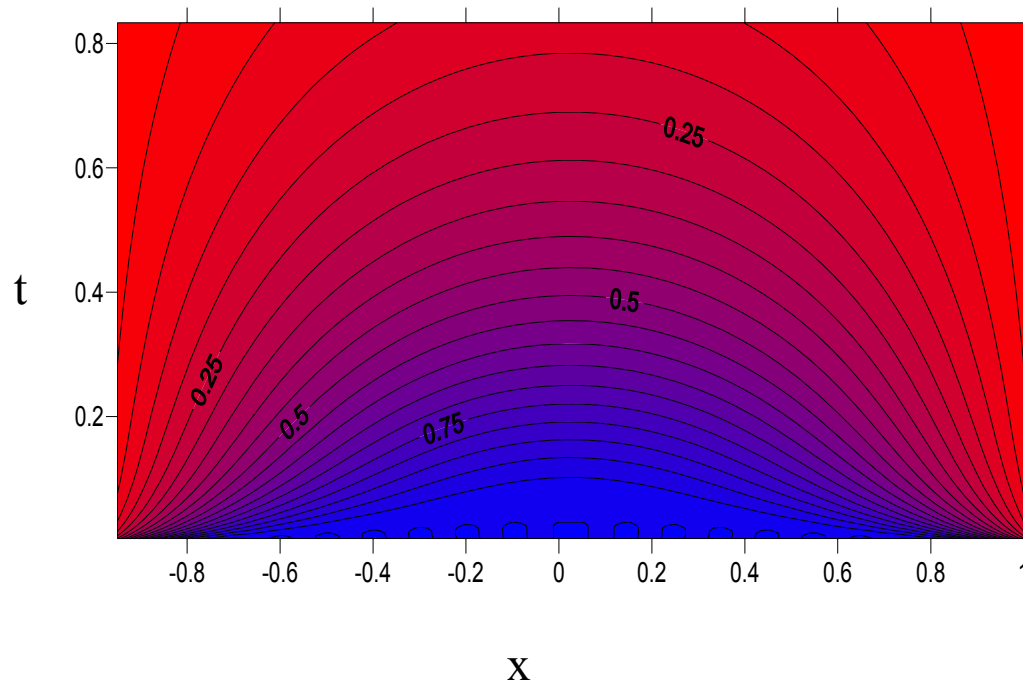
$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2D}$$

---

Czyżby krok czasowy w MES miałby być naprawdę mniejszy niż w MRS?  
(oszacowanie dostaliśmy z tw. Ironsa-Treharna – może jego wynik jest zbyt pesymistyczny)  
Sprawdźmy numerycznie:

40 węzłów, D=1

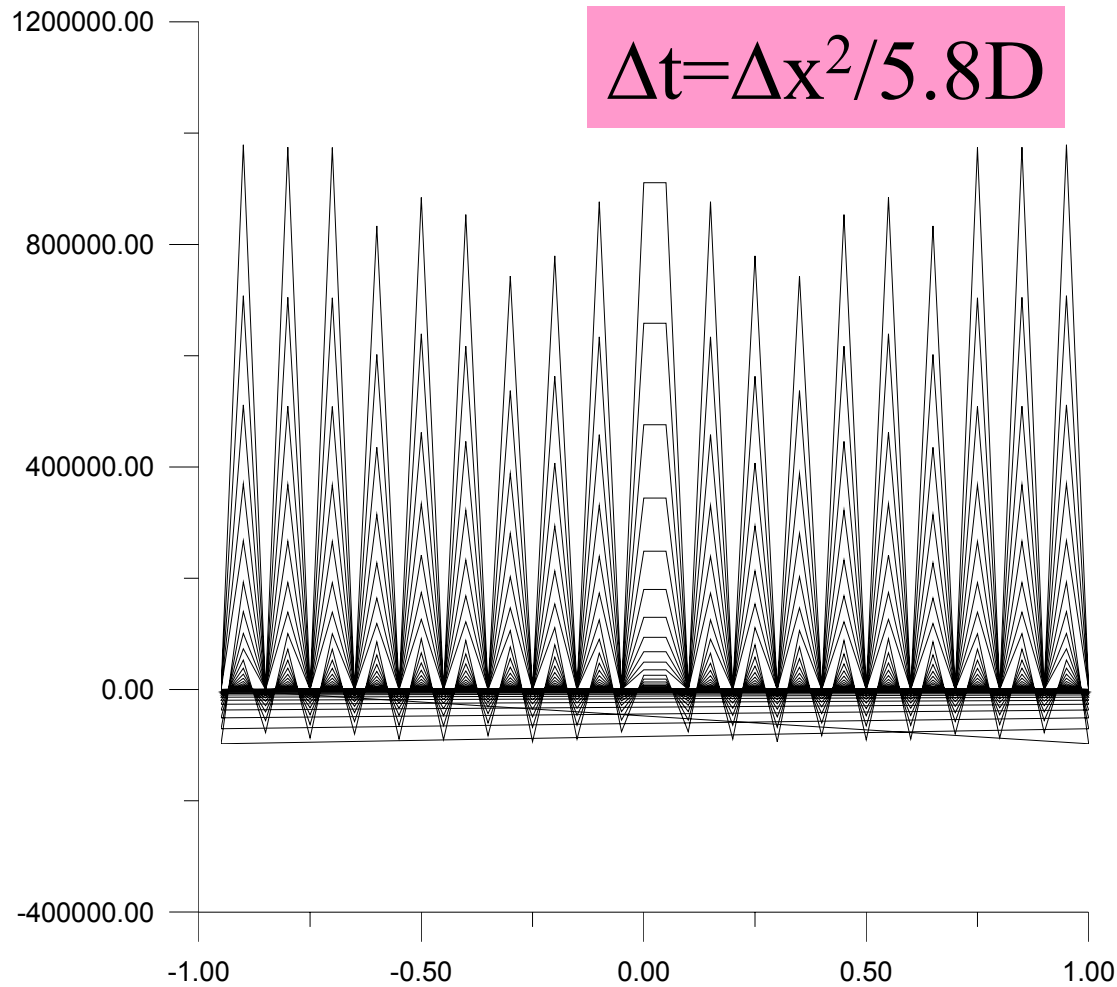
$$\Delta t = \Delta x^2 / 6D$$



oszacowanie stabilnego kroku  
czasowego wg tw. Ironsa

$$\Delta t \leq \Delta x^2 / 6D$$

wyniki numeryczne dla:



niestety

Irons nie kłamie

W tym przypadku  
(dyfuzji i dyskretyzacji  
przestrzennej wg. metody  
Eulera):

MES z liniowymi funkcjami  
kształtu wymaga mniejszego  
kroku czasowego niż  
MRS!

Ograniczenie na krok czasowy związane z krokiem przestrzennym  
takie jak:

$$\Delta t \leq \Delta x^2 / 6D$$

to katastrofa dla MES.

Siła MES – swoboda w wyborze siatki

można ją dopasować do problemu, zagęścić tam gdzie trzeba

jeśli o kroku czasowym zdecyduje

rozmiar najmniejszego elementu (minimalne  $\Delta x$ )

niczego nie policzymy w rozsądnym czasie.

Potrzebny inny schemat (lub może inne funkcje kształtu?)

Euler z MES wymaga większego kroku czasowego niż dla MRS !  
czy winna „kanciastość” rozwiązania rozwiniętego w bazie liniowych funkcji kształtu?

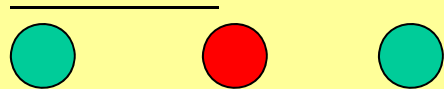
Sprawdźmy kwadratowe funkcje kształtu.

Euler

$$\sum_j (\phi_k, \phi_j) u_j(t + dt) = \sum_j \left( (\phi_k, \phi_j) + Ddt (\phi_k, \phi_j'') \right) u_j(t)$$

kwadratowe  
funkcje kształtu

$\Delta x$  (odległość między sąsiednimi węzłami)

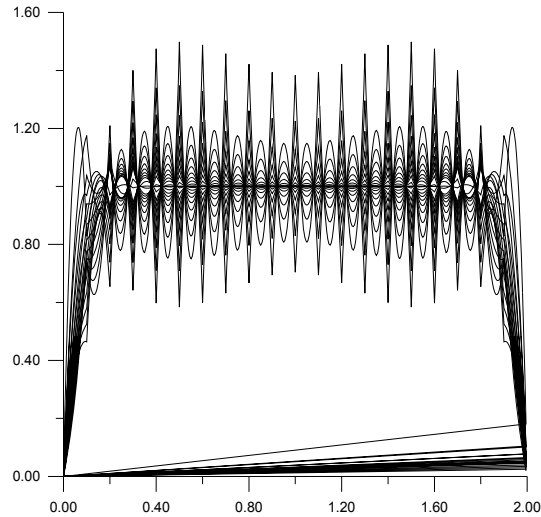


element o długości  $h = 2\Delta x$

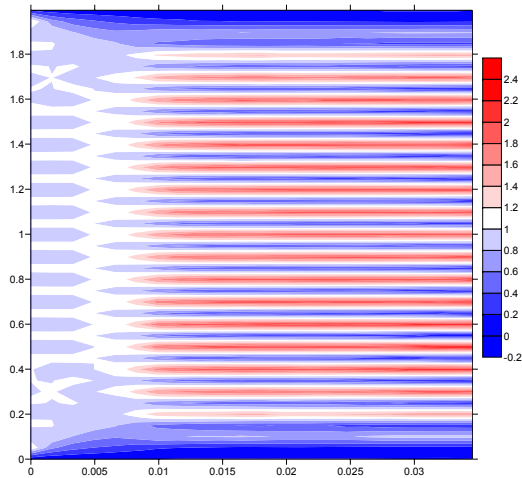
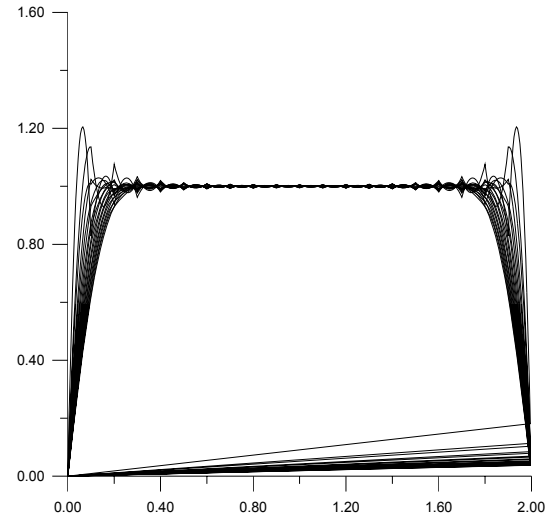
# Euler z kwadratowymi funkcjami kształtu 20 elementów

$1/6 = .1666$

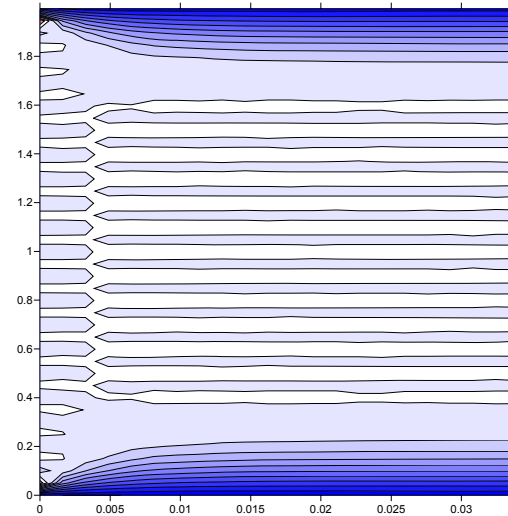
$dt = dx^2 * .15$



$dt = dx^2 * .1333 = dx^2 * 2/15$



powyżej  $T > 1$ :  
czerwony kolor  
(generuje niestabilność)



dla liniowych funkcji kształtu Euler stabilny dla  $dt = dx^2 * .1666$

Euler MES z funkcjami kwadratowymi nie tylko nie pozwala na mniejszy krok czasowy, ale wręcz wymaga nieco mniejszego!

przeanalizujemy stabilność metody:

$$\sum_j (\phi_k, \phi_j) u_j(t + dt) = \sum_j \left( (\phi_k, \phi_j) + Ddt (\phi_k, \phi_j'') \right) u_j(t)$$

---

$$\frac{h}{30} \begin{pmatrix} 4 & 2 & -1 \\ 2 & 16 & 2 \\ -1 & 2 & 4 \end{pmatrix} \mathbf{u} := \left[ \frac{h}{30} \begin{pmatrix} 4 & 2 & -1 \\ 2 & 16 & 2 \\ -1 & 2 & 4 \end{pmatrix} + \frac{Ddt}{3h} \begin{pmatrix} -7 & 8 & -1 \\ 8 & -16 & 8 \\ -1 & 8 & -7 \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}$$

$$\mathbf{u} := \left[ \mathbf{1} + \frac{10Ddt}{h^2} \begin{pmatrix} 4 & 2 & -1 \\ 2 & 16 & 2 \\ -1 & 2 & 4 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} -7 & 8 & -1 \\ 8 & -16 & 8 \\ -1 & 8 & -7 \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}$$



$$\mathbf{u} := \left[ \mathbf{1} + \frac{10Ddt}{h^2} \begin{pmatrix} 4 & 2 & -1 \\ 2 & 16 & 2 \\ -1 & 2 & 4 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} -7 & 8 & -1 \\ 8 & -16 & 8 \\ -1 & 8 & -7 \end{pmatrix} \right] \mathbf{u} \quad \alpha = 10Ddt/h^2$$

> `A:=matrix(3,3,[4,2,-1,2,16,2,-1,2,4]);`

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 2 & -1 \\ 2 & 16 & 2 \\ -1 & 2 & 4 \end{bmatrix}$$

> `inverse(A);`

$$\begin{bmatrix} \frac{3}{10} & -\frac{1}{20} & \frac{1}{10} \\ -\frac{1}{20} & \frac{3}{40} & -\frac{1}{20} \\ \frac{1}{10} & -\frac{1}{20} & \frac{3}{10} \end{bmatrix}$$

> `B:=matrix(3,3,[-7,8,-1,8,-16,8,-1,8,-7]);`

$$B = \begin{bmatrix} -7 & 8 & -1 \\ 8 & -16 & 8 \\ -1 & 8 & -7 \end{bmatrix}$$

> `il:=multiply(inverse(A),alpha*B);`

$$il = \begin{bmatrix} -\frac{13}{5}\alpha & 4\alpha & -\frac{7}{5}\alpha \\ \alpha & -2\alpha & \alpha \\ -\frac{7}{5}\alpha & 4\alpha & -\frac{13}{5}\alpha \end{bmatrix}$$

> `w:=matrix(3,3,[1,0,0,0,1,0,0,0,1]);`

$$w = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

> `wynik:=matadd(w,il);`

$$\text{wynik} = \begin{bmatrix} 1 - \frac{13}{5}\alpha & 4\alpha & -\frac{7}{5}\alpha \\ \alpha & 1 - 2\alpha & \alpha \\ -\frac{7}{5}\alpha & 4\alpha & 1 - \frac{13}{5}\alpha \end{bmatrix}$$

> `eigenvalues(wynik);`

$$1, -\frac{6}{5}\alpha + 1, -6\alpha + 1$$

$$\mathbf{u} := \left[ \mathbf{1} + \frac{10Ddt}{h^2} \begin{pmatrix} 4 & 2 & -1 \\ 2 & 16 & 2 \\ -1 & 2 & 4 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} -7 & 8 & -1 \\ 8 & -16 & 8 \\ -1 & 8 & -7 \end{pmatrix} \right] \mathbf{u} \quad \alpha = 10Ddt/h^2$$

> `A:=matrix(3,3,[4,2,-1,2,16,2,-1,2,4]);`

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 2 & -1 \\ 2 & 16 & 2 \\ -1 & 2 & 4 \end{bmatrix}$$

> `inverse(A);`

$$\begin{bmatrix} \frac{3}{10} & -\frac{1}{20} & \frac{1}{10} \\ -\frac{1}{20} & \frac{3}{40} & -\frac{1}{20} \\ \frac{1}{10} & -\frac{1}{20} & \frac{3}{10} \end{bmatrix}$$

> `B:=matrix(3,3,[-7,8,-1,8,-16,8,-1,8,-7]);`

$$B = \begin{bmatrix} -7 & 8 & -1 \\ 8 & -16 & 8 \\ -1 & 8 & -7 \end{bmatrix}$$

> `il:=multiply(inverse(A),alpha*B);`

$$il = \begin{bmatrix} -\frac{13}{5}\alpha & 4\alpha & -\frac{7}{5}\alpha \\ \alpha & -2\alpha & \alpha \\ -\frac{7}{5}\alpha & 4\alpha & -\frac{13}{5}\alpha \end{bmatrix}$$

> `w:=matrix(3,3,[1,0,0,0,1,0,0,0,1]);`

$$w = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

> `wynik:=matadd(w,il);`

$$\text{wynik} = \begin{bmatrix} 1 - \frac{13}{5}\alpha & 4\alpha & -\frac{7}{5}\alpha \\ \alpha & 1 - 2\alpha & \alpha \\ -\frac{7}{5}\alpha & 4\alpha & 1 - \frac{13}{5}\alpha \end{bmatrix}$$

> `eigenvalues(wynik);`

$$1, -\frac{6}{5}\alpha + 1, -6\alpha + 1$$

$$\begin{aligned} -1 &\leq 1 - 6/5\alpha \leq 1 \\ -1 &\leq 1 - 6\alpha \leq 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \alpha &\leq 5/3 \\ \alpha &\leq 1/3 \end{aligned}$$

$$10Ddt/h^2 \leq 1/3$$

$$dt \leq h^2/30D$$

$$dt \leq 4dx^2/30D$$

mamy:  $dt \leq .1333 dx^2/D$

CN: szansa na schemat bez ograniczenia na krok czasowy

Schemat Cranka Nicholsona dla równania dyfuzji z elementami kwadratowymi

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$\frac{u(t + dt) - u(t)}{dt} = D \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, t + dt)}{\partial x^2} \right)$$

$$u(t + dt) - D \frac{dt}{2} \frac{\partial^2 u(x, t + dt)}{\partial x^2} = u(t) + D \frac{dt}{2} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}$$

$$\sum_j \left( (\phi_k, \phi_j) - \frac{Ddt}{2} (\phi_k, \phi_j'') \right) u_j(t + dt) = \sum_j \left( (\phi_k, \phi_j) + \frac{Ddt}{2} (\phi_k, \phi_j'') \right) u_j(t)$$

Analiza stabilności dla pojedynczego elementu:

CN:

$$\sum_j \left( (\phi_k, \phi_j) - \frac{Ddt}{2} (\phi_k, \phi_j'') \right) u_j(t + dt) = \sum_j \left( (\phi_k, \phi_j) + \frac{Ddt}{2} (\phi_k, \phi_j'') \right) u_j(t)$$

elementy macierzowe znamy z analizy jawnego Eulera:

$$\sum_j (\phi_k, \phi_j) u_j(t + dt) = \sum_j \left( (\phi_k, \phi_j) + Ddt (\phi_k, \phi_j'') \right) u_j(t)$$

$$\frac{h}{30} \begin{pmatrix} 4 & 2 & -1 \\ 2 & 16 & 2 \\ -1 & 2 & 4 \end{pmatrix} \mathbf{u} := \left[ \frac{h}{30} \begin{pmatrix} 4 & 2 & -1 \\ 2 & 16 & 2 \\ -1 & 2 & 4 \end{pmatrix} + \frac{Ddt}{3h} \begin{pmatrix} -7 & 8 & -1 \\ 8 & -16 & 8 \\ -1 & 8 & -7 \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}$$

**A** **B**

$$\sum_j \left( \underset{\mathbf{A}}{(\phi_k, \phi_j)} - \frac{Ddt}{2} \underset{\mathbf{B}}{(\phi_k, \phi_j'')} \right) u_j(t + dt) = \sum_j \left( (\phi_k, \phi_j) + \frac{Ddt}{2} (\phi_k, \phi_j'') \right) u_j(t)$$

Analiza Ironsa:

`A:=1/30*matrix(3,3,[4,2,-1,2,16,2,-1,2,4]);`

$$A = \frac{1}{30} h \begin{bmatrix} 4 & 2 & -1 \\ 2 & 16 & 2 \\ -1 & 2 & 4 \end{bmatrix}$$

`B:=1/3/h*matrix(3,3,[-7,8,-1,8,-16,8,-1,8,-7]);`

$$B = \frac{1}{3} \frac{1}{h} \begin{bmatrix} -7 & 8 & -1 \\ 8 & -16 & 8 \\ -1 & 8 & -7 \end{bmatrix}$$

`A1:=A-D*dt/2*B;`

$$A1 = \frac{1}{30} h \begin{bmatrix} 4 & 2 & -1 \\ 2 & 16 & 2 \\ -1 & 2 & 4 \end{bmatrix} - \frac{1}{6} \frac{D dt}{h} \begin{bmatrix} -7 & 8 & -1 \\ 8 & -16 & 8 \\ -1 & 8 & -7 \end{bmatrix}$$

`A2:=A+D*dt/2*B;`

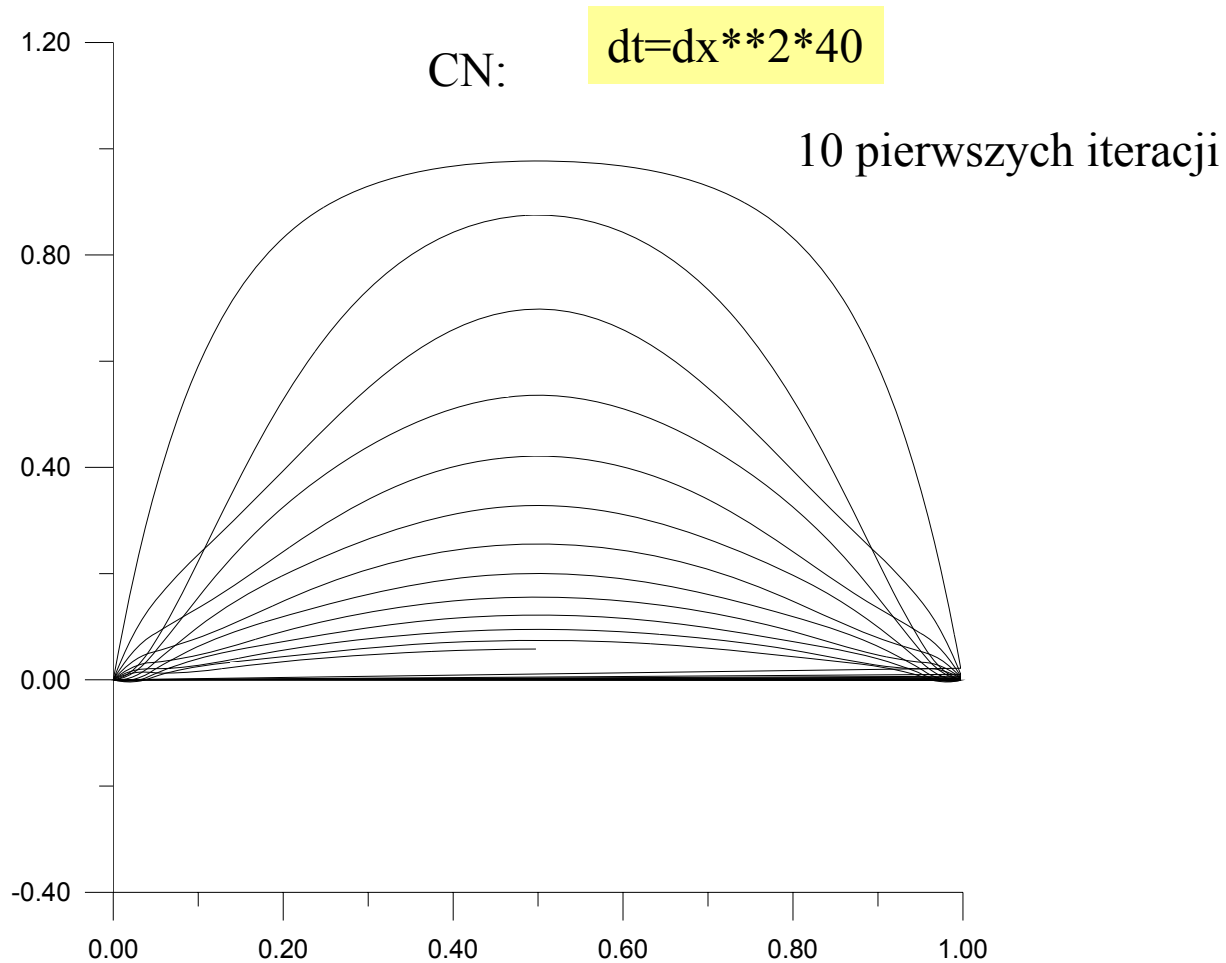
$$A2 = \frac{1}{30} h \begin{bmatrix} 4 & 2 & -1 \\ 2 & 16 & 2 \\ -1 & 2 & 4 \end{bmatrix} + \frac{1}{6} \frac{D dt}{h} \begin{bmatrix} -7 & 8 & -1 \\ 8 & -16 & 8 \\ -1 & 8 & -7 \end{bmatrix}$$

`C:=multiply(inverse(A1),A2);`

`eigenvalues(C);`

$$1, -\frac{30 D dt - h^2}{30 D dt + h^2}, -\frac{6 D dt - h^2}{h^2 + 6 D dt}$$

wszystkie ww nie większe od 1: CN jest bezwarunkowo stabilny  
nie ma ograniczenia na krok czasowy!



CN: pozwoli na rachunki również dla lokalnie drobnej siatki  
bo rozmiar elementów nie nakłada ograniczenia  
na stabilność metody ES

równanie dynamiczne (falowe)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{u(t + dt) + u(t - dt) - 2u(t)}{dt^2}$$

$$u(t + dt) = dt^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2u(t) - u(t - dt) \quad \text{schemat Verleta}$$

## równanie dynamiczne (falowe)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{u(t + dt) + u(t - dt) - 2u(t)}{dt^2}$$

$$u(t + dt) = dt^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2u(t) - u(t - dt) \quad \text{schemat Verleta}$$

$$u(t) = \sum_j c_j(t) \phi_j(x)$$

$$\sum_j c_j(t + dt) \phi_j(x) = \sum_j c_j(t) (dt^2 \phi_j''(x) + 2\phi_j(x)) - \sum_j c_j(t - dt) \phi_j(x)$$

$$\sum_j (\phi_k, \phi_j) c_j(t + dt) = \sum_j (dt^2 (\phi_k, \phi_j'') + 2(\phi_k, \phi_j)) c_j(t) - \sum_j (\phi_k, \phi_j) c_j(t - dt)$$

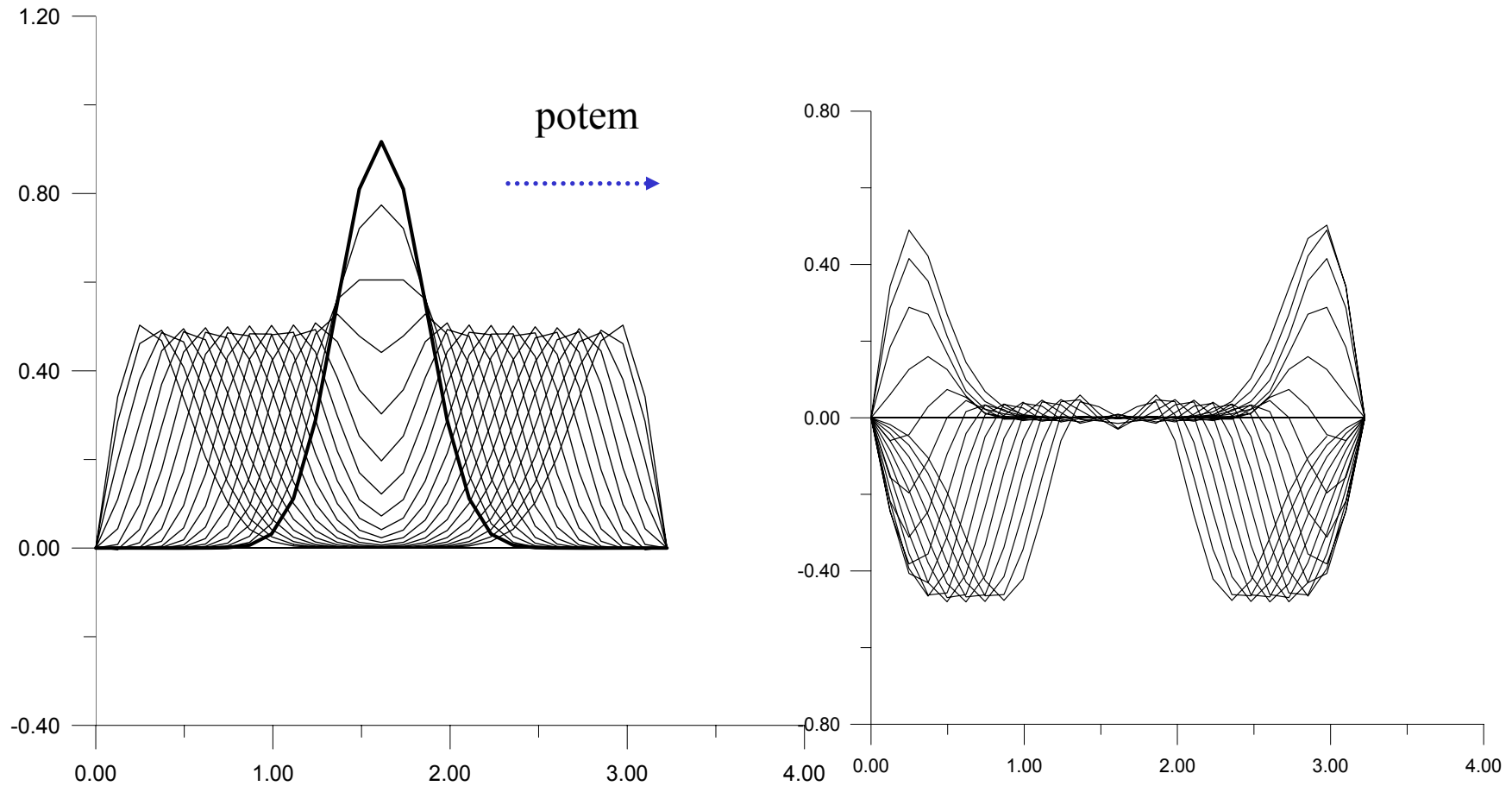
Schemat jest dwukrokowy jak w MRS



Aplikacja: struna z zamocowanymi na sztywno końcami  
Linijowe funkcje kształtu

27 węzłów

prędkość początkowa 0



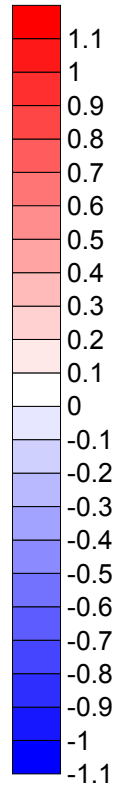
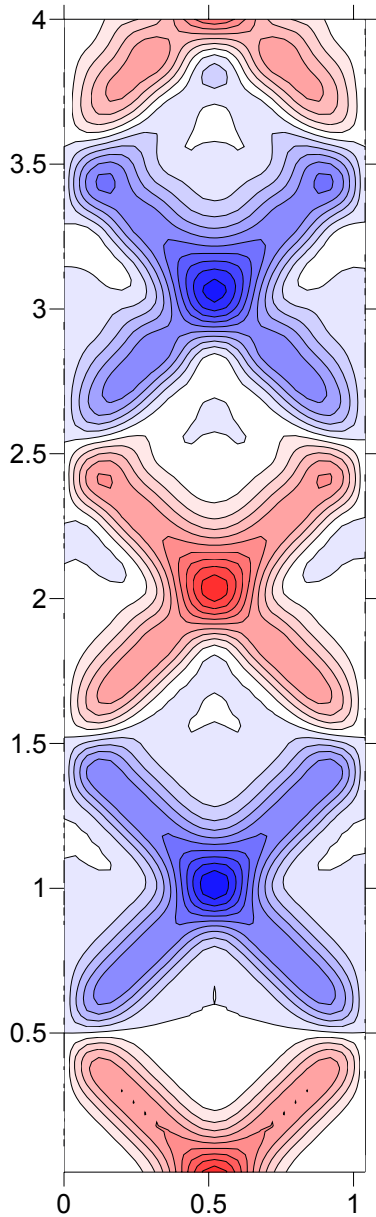
wyniki dla  $dt=dx/2$  Uwaga dla  $dt=dx$  (krok CFL) niestabilność (a Verlet w MRS był stabilny !)  
niestabilność nawet dla 300 elementów

# 27 węzłów

$dt=dx/2$

MES

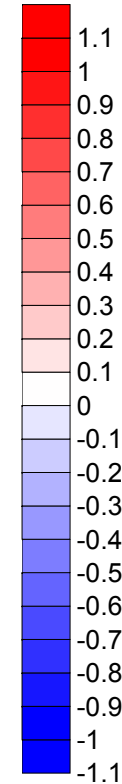
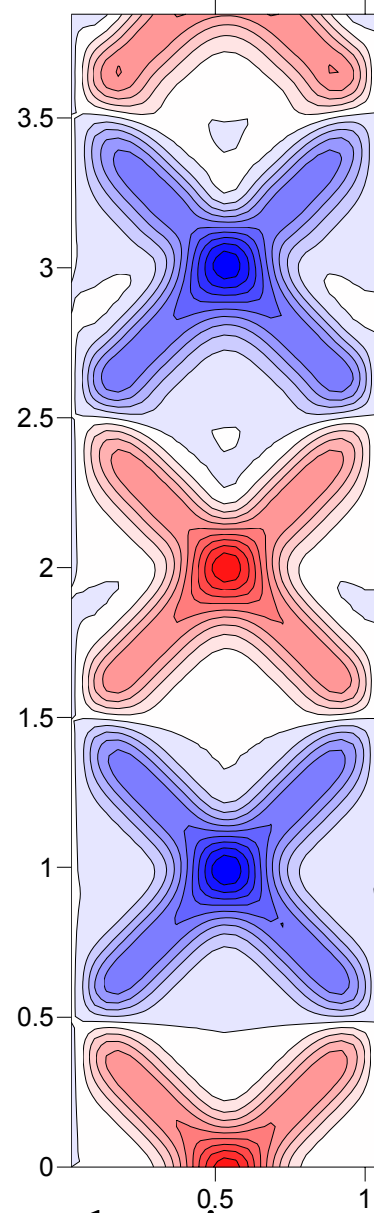
funkcje liniowe  
nie trzyma kształtu  
i nieokresowy



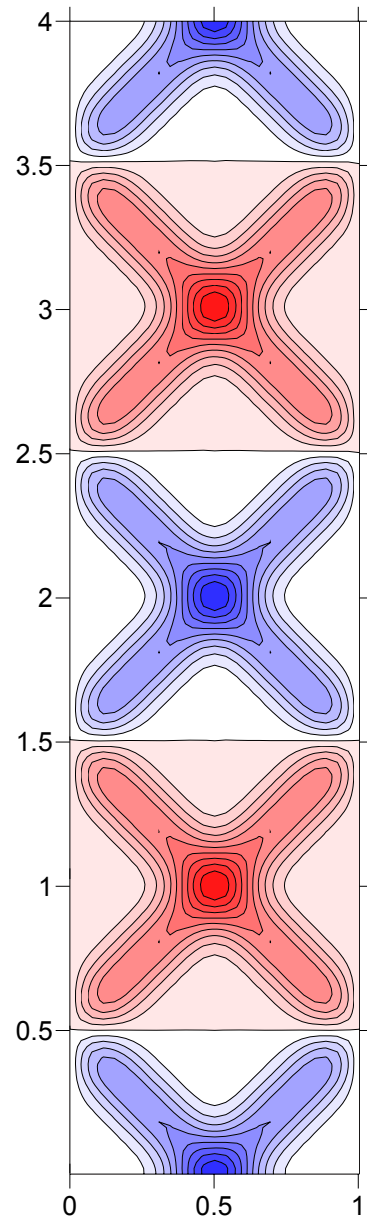
$dt=dx/2$

MRS

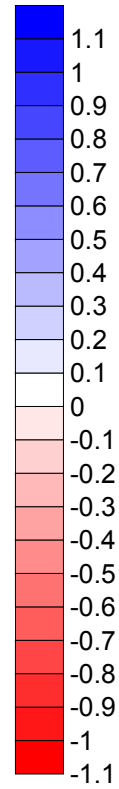
podobne błędy  
ale nieco lepiej!



Verlet w MES sprawdza się gorzej niż w MRS ☹



$dt=dx/2$   
MES, 250 węzłów



MES jest przynajmniej zbieżny

Czy musi być tak źle?

Analiza stabilności dla metod dwukrokowych, równanie falowe, liniowe funkcje kształtu.

$$\sum_j (\phi_k, \phi_j) c_j(t + dt) = \sum_j (dt^2 (\phi_k, \phi_j'') + 2(\phi_k, \phi_j)) c_j(t) - \sum_j (\phi_k, \phi_j) c_j(t - dt)$$

równanie dla pojedynczego elementu (funkcje liniowe)

$$\begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u}(t + dt) := \left[ dt^2 \begin{pmatrix} \frac{-1}{h} & \frac{1}{h} \\ \frac{1}{h} & \frac{-1}{h} \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}(t) - \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u}(t - dt)$$

Czy musi być tak źle?

Analiza stabilności dla metod dwukrokowych, równanie falowe, liniowe funkcje kształtu.

$$\sum_j (\phi_k, \phi_j) c_j(t + dt) = \sum_j (dt^2 (\phi_k, \phi_j'') + 2(\phi_k, \phi_j)) c_j(t) - \sum_j (\phi_k, \phi_j) c_j(t - dt)$$

równanie dla pojedynczego elementu (funkcje liniowe)

$$\begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u}(t + dt) := \left[ dt^2 \begin{pmatrix} \frac{-1}{h} & \frac{1}{h} \\ \frac{1}{h} & \frac{-1}{h} \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}(t) - \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u}(t - dt)$$

wg tego co wiemy, powinniśmy skonstruować macierz iteracji

$\mathbf{u} := \mathbf{A}\mathbf{u}$

dla metod jednokrokowych nie było problemu

jak skonstruować macierz  $\mathbf{A}$  teraz?

nawet jeśli się da, łatwiej jest problem ominąć

wektory własne macierzy  $\mathbf{A}$  = baza w przestrzeni wektorów 2D

Każdy z wektorów da się przedstawić jako kombinację liniową wektorów własnych

wynik działania  $\mathbf{A}$  na  $\mathbf{u}$ :  $\mathbf{A}\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}$

czyli:

wystarczy jeśli zbadamy  $u(t) = \lambda u(t-dt)$

$$u(t+dt) = \lambda^2 u(t-dt)$$



$$\begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u}(t+dt) := \left[ dt^2 \begin{pmatrix} \frac{-1}{h} & \frac{1}{h} \\ \frac{1}{h} & \frac{-1}{h} \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}(t) - \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u}(t-dt)$$

czyli:

wystarczy jeśli zbadamy  $u(t) = \lambda u(t-dt)$

$$u(t+dt) = \lambda^2 u(t-dt)$$



$$\begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u}(t+dt) := \left[ dt^2 \begin{pmatrix} \frac{-1}{h} & \frac{1}{h} \\ \frac{1}{h} & \frac{-1}{h} \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}(t) - \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u}(t-dt)$$

dojdziemy do jednorodnego URL

$$\begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \lambda^2 \mathbf{u}(t-dt) = \left[ dt^2 \begin{pmatrix} \frac{-1}{h} & \frac{1}{h} \\ \frac{1}{h} & \frac{-1}{h} \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \right] \lambda \mathbf{u}(t-dt) - \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u}(t-dt)$$

$$\begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \lambda^2 \mathbf{u}(t-dt) = \left[ dt^2 \begin{pmatrix} \frac{-1}{h} & \frac{1}{h} \\ \frac{1}{h} & \frac{-1}{h} \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \right] \lambda \mathbf{u}(t-dt) - \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u}(t-dt)$$

jednorodny układ równań

$$\mathbf{B}u(t-dt)=0$$

$$\mathbf{B}_{11} = \mathbf{B}_{22} = \lambda^2 \frac{h}{3} + \frac{\lambda dt^2}{h} - \frac{2\lambda h}{3} + \frac{h}{3}$$

$$\mathbf{B}_{12} = \mathbf{B}_{21} = \lambda^2 \frac{h}{6} - dt^2 \frac{\lambda}{h} - \frac{\lambda h}{3} + \frac{h}{6}$$

żeby UR miał rozwiązanie inne poza  $u=0$  trzeba aby  $\det(\mathbf{B})=0$ .

warunek zerowania wyznacznika da nam wartości własne macierzy iteracji



$$\det \mathbf{B}=0$$

$$B_{11}B_{22}-B_{12}B_{21}=0$$

$$B_{11} = B_{22} = \lambda^2 \frac{h}{3} + \frac{\lambda dt^2}{h} - \frac{2\lambda h}{3} + \frac{h}{3}$$

$$B_{12} = B_{21} = \lambda^2 \frac{h}{6} - dt^2 \frac{\lambda}{h} - \frac{\lambda h}{3} + \frac{h}{6}$$

$$B_{11} = \pm B_{12}$$

weźmy minus : wyraz z  $dt^2$  ulegnie skróceniu, przemnożymy obustronnie przez 6 i

$$2\lambda^2 h - 4\lambda h + 2h = -\lambda^2 h + 2\lambda h - h$$

$$3\lambda^2 h - 6\lambda h + 3h = 0$$

$$3h(\lambda^2 - 2\lambda + 1) = 0$$

$$\lambda=1$$

$$\mathbf{B}_{11} = \mathbf{B}_{22} = \lambda^2 \frac{h}{3} + \frac{\lambda dt^2}{h} - \frac{2\lambda h}{3} + \frac{h}{3}$$

$$\mathbf{B}_{12} = \mathbf{B}_{21} = \lambda^2 \frac{h}{6} - dt^2 \frac{\lambda}{h} - \frac{\lambda h}{3} + \frac{h}{6}$$

$$\mathbf{B}_{11} = + \mathbf{B}_{12}$$

przemnożymy obustronnie przez  $6h$

$$2\lambda^2 h^2 + 6\lambda dt^2 - 4\lambda h^2 + 2h^2 = \lambda^2 h^2 - dt^2 6\lambda - 2\lambda h^2 + h^2$$

$$\lambda^2 h^2 + 12\lambda dt^2 - 2\lambda h^2 + h^2 = 0$$

$$\Delta = (12dt^2 - 2h^2)^2 - 4h^4 = 12^2 dt^4 - 48h^2 dt^2 + 4h^4 - 4h^4 = 16(9dt^4 - 3h^2 dt^2)$$

$$\lambda = \frac{2h^2 - 12dt^2 \pm 4\sqrt{9dt^4 - 3h^2 dt^2}}{2h^2}$$

$$\lambda = \frac{2h^2 - 12dt^2 \pm 4\sqrt{9dt^4 - 3h^2dt^2}}{2h^2}$$

wartość pod pierwiastkiem: czy jesteśmy powyżej czy poniżej zera?

$$\lambda = \frac{2h^2 - 12dt^2 \pm 4\sqrt{9dt^4 - 3h^2dt^2}}{2h^2}$$

wartość pod pierwiastkiem: czy jesteśmy powyżej czy poniżej zera.

z rachunków numerycznych dostaliśmy stabilne wyniki dla  $dt=h/2$

wtedy  $9h^4/16 - 12h^4/16 < 0$ ,

gdy  $dt$  będzie niżej pod pierwiastkiem stać będzie wartość bardziej ujemna

$$\lambda = \frac{2h^2 - 12dt^2 \pm 4\sqrt{9dt^4 - 3h^2dt^2}}{2h^2}$$

wartość pod pierwiastkiem: czy jesteśmy powyżej czy poniżej zera.

z rachunków numerycznych dostaliśmy stabilne wyniki dla  $dt=h/2$

wtedy  $9h^4/16 - 12h^4/16 < 0$ ,

gdy  $dt$  będzie niżej pod pierwiastkiem stać będzie wartość bardziej ujemna

pierwiastek jest urojony, wtedy moduł  $|\lambda|^2$

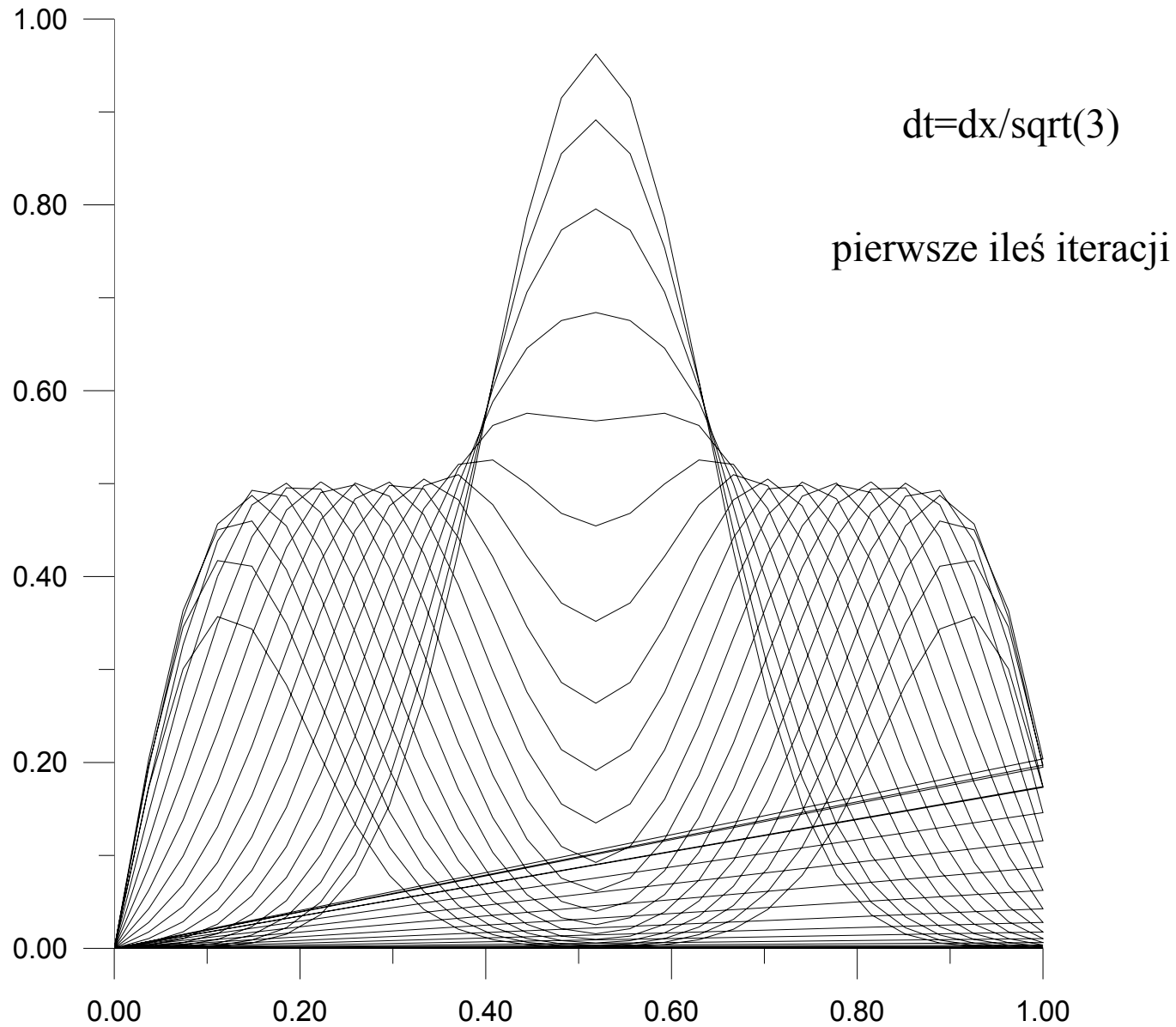
dla stabilności  
wystarczy

$$\frac{(-12dt^2 + 2h^2)^2 + 16(9dt^4 - 3dt^2h^2)}{4h^4} \leq 1$$

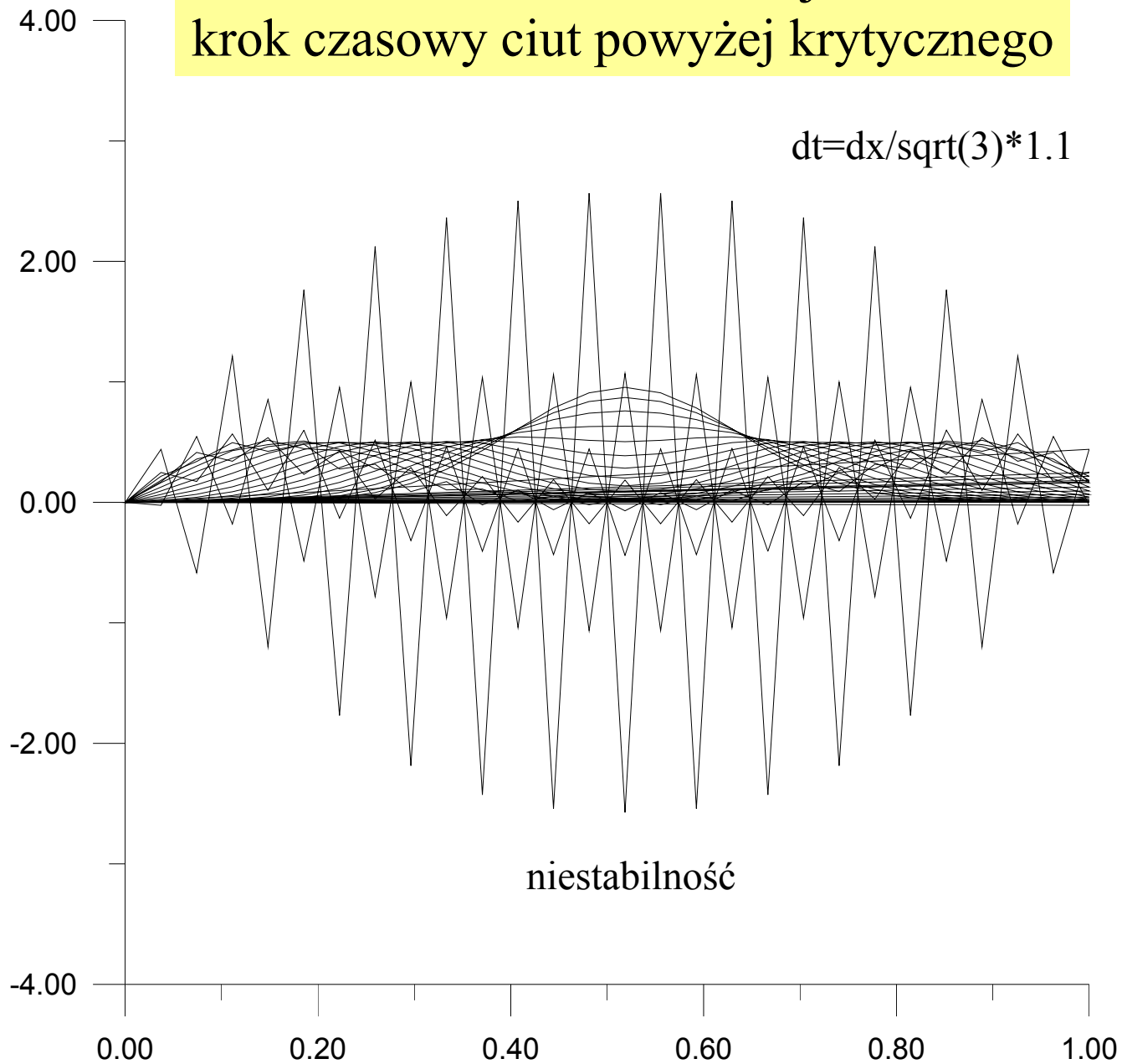
$$144 dt^4 - 48dt^2h^2 + 144dt^4 - 48dt^2h^2 \leq 0 \quad \longrightarrow \quad 3dt^2 \leq h^2 \quad \longrightarrow \quad dt \leq h/\sqrt{3} = 0.577 h$$

dostaliśmy graniczną wartość  $dt$ , dla której delta równania kwadratowego=0,  
dla większych  $dt$  – pierwiastek z delta rzeczywisty, jedna z wartości  
własnych staje się większa, a druga mniejsza od jedynki

Verlet w MES liniowe funkcje kształtu  
krytyczny dla stabilności krok czasowy



Verlet w MES liniowe funkcje kształtu  
krok czasowy ciut powyżej krytycznego



dla równania falowego

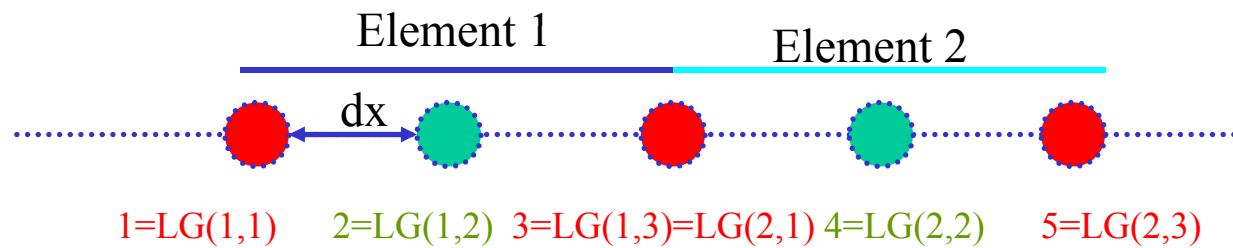
Verlet w MES z funkcjami linowymi stabilny dla  $c\Delta t \leq dx/\sqrt{3}$

podczas gdy Verlet w MRS  $c\Delta t \leq dx$

czy pomogą lepsze funkcje kształtu?



MES, równanie falowe  
kwadratowe funkcje kształtu, składanie macierzy



$$\begin{aligned} \phi_1 &= \xi(\xi - 1)/2 \\ \phi_2 &= -(\xi - 1)(\xi + 1) \\ \phi_3 &= \xi(\xi + 1)/2 \end{aligned}$$

struna podzielona na elementy, zbudowana tablica nadająca numer globalny dla danego numeru elementu i numeru węzła

$$\sum_j (\phi_k, \phi_j) c_j(t + dt) = \sum_j (dt^2 (\phi_k, \phi_j'') + 2(\phi_k, \phi_j)) c_j(t) - \sum_j (\phi_k, \phi_j) c_j(t - dt)$$

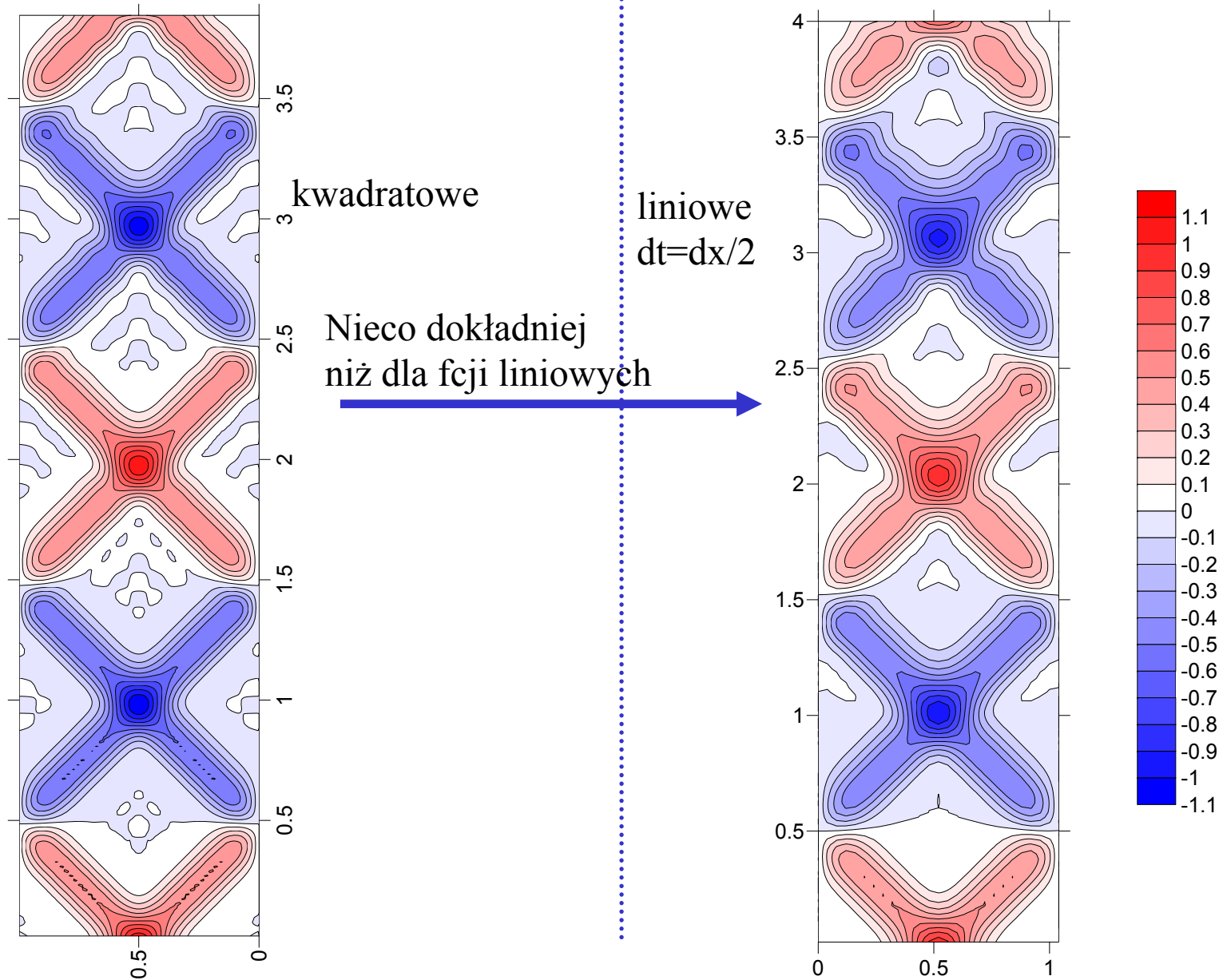
do rozwiązania będzie to samo równanie  
macierze wygodniej już składać, tak jak w problemach niezależnych od czasu

$$O_{ij}^m = (\phi_i^m, \phi_j^m) = \frac{h_m}{30} \begin{pmatrix} 4 & 2 & -1 \\ 2 & 16 & 2 \\ -1 & 2 & 4 \end{pmatrix} \quad E_{ij}^m = (\phi_i^m, (\phi_j^m)'') = \frac{1}{3h_m} \begin{pmatrix} -7 & 8 & -1 \\ 8 & -16 & 8 \\ -1 & 8 & -7 \end{pmatrix}$$

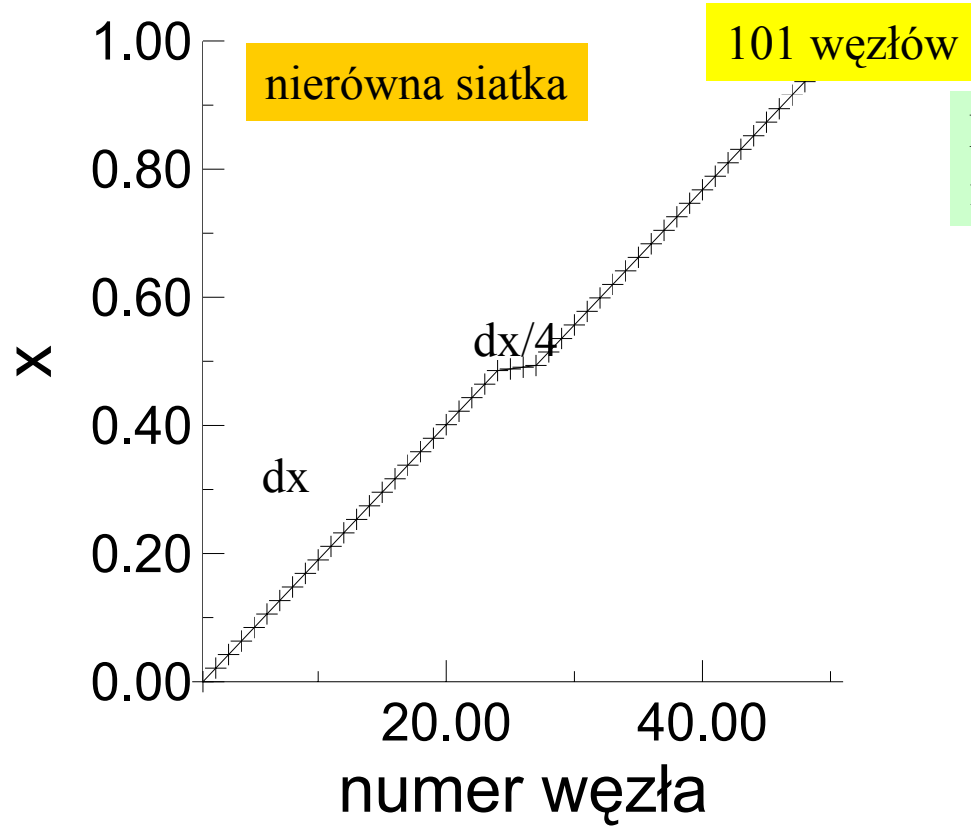
globalne macierze składane podobnie jak w metodzie niezależnej od czasu

27 węzłów (13 elementów)  $dt=dx/2$   
(wciąż niestabilne dla  $dt=dx$ )

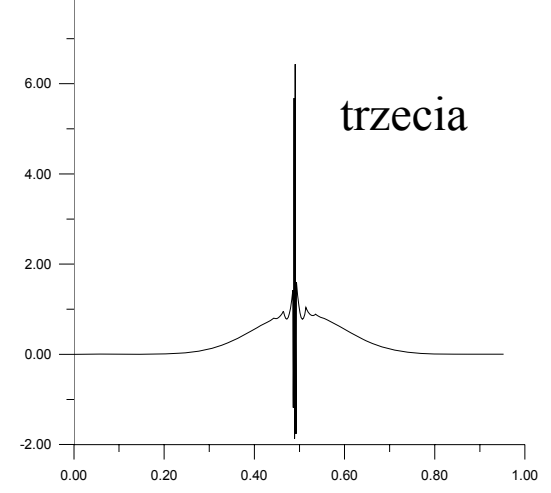
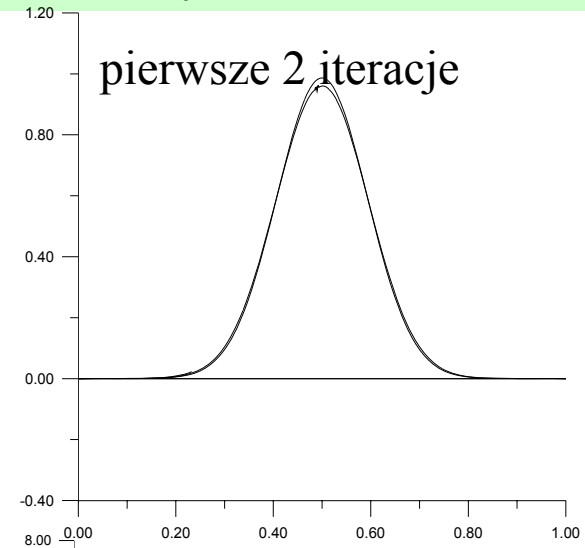
Analiza Ironsa dla kwadratowych fk: również  $dx/\sqrt{3}$  na krok krytyczny



stabilność a nierównomierna (zaadaptowana) siatka

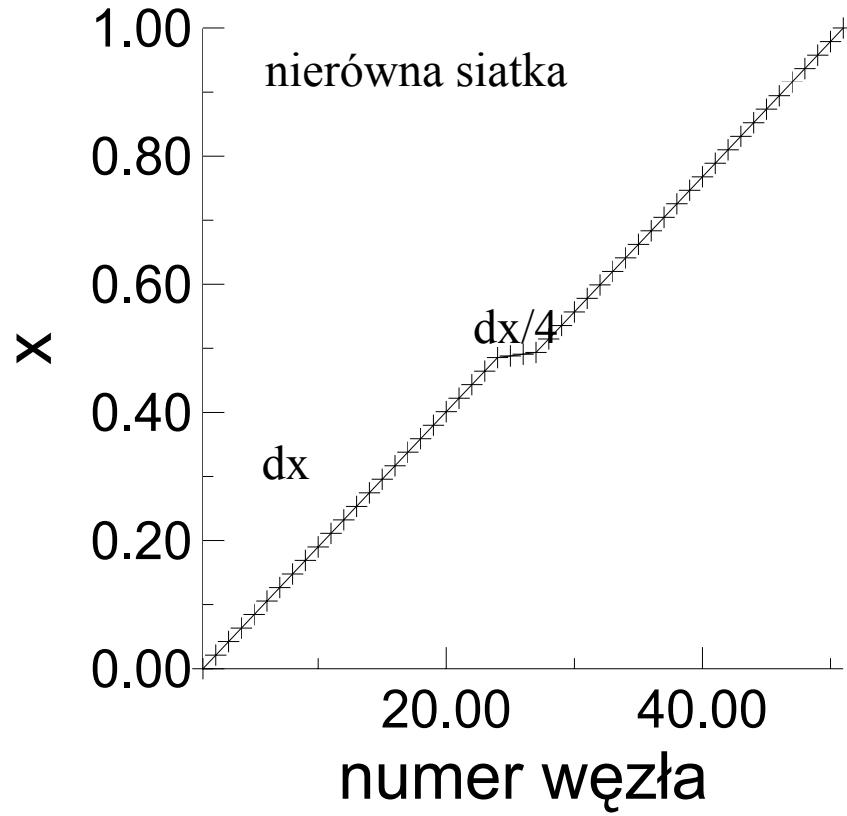


FEM ze schematem Verleta  $dt=dx/\sqrt{3}$   
i kwadratowymi FK

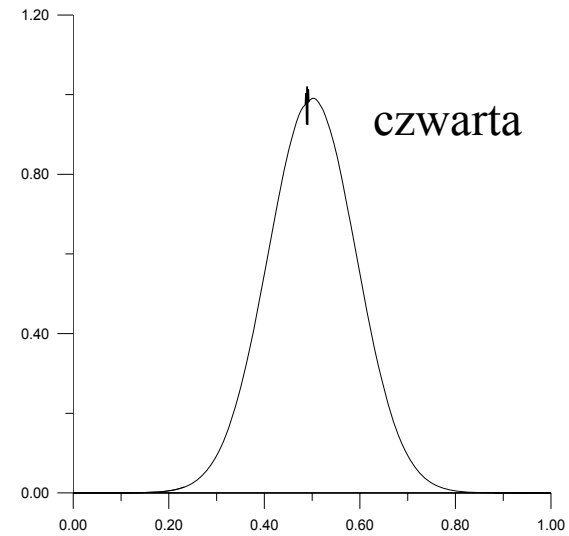
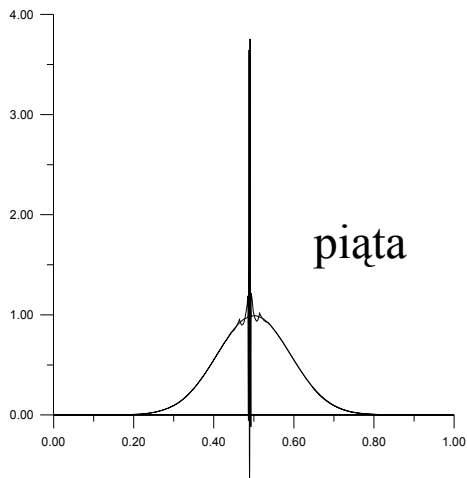
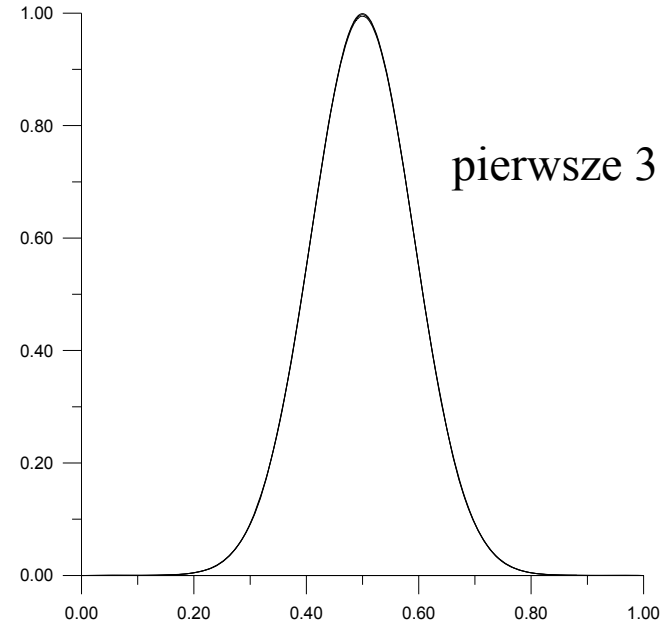


W środku pudła 4 elementy  
o długości  $dx/4$

101 węzłów

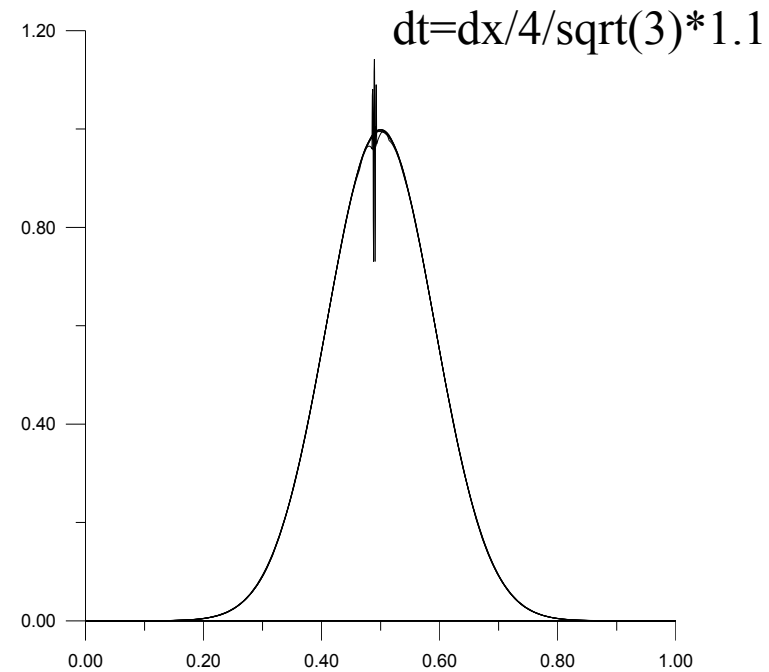
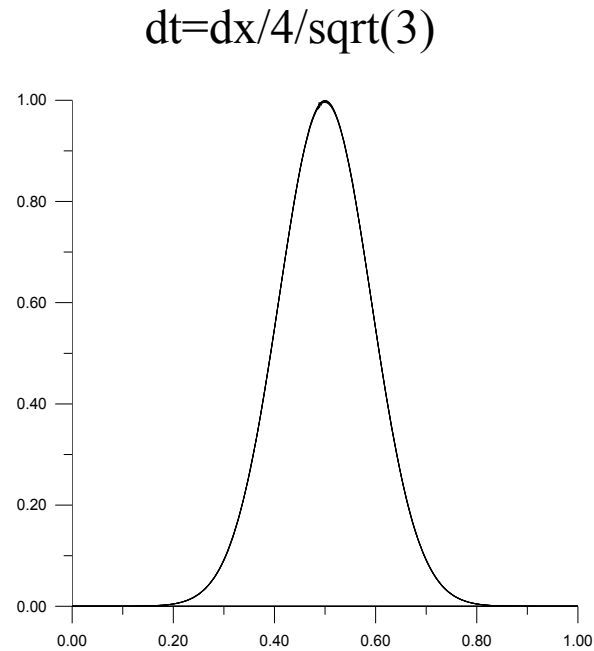


FEM ze schematem Verleta  $dt=dx/(\sqrt{3})3.9$



# FEM ze schematem Verleta i kwadratowymi FK

101 węzłów



Twierdzenie Ironsa: odczytane ponownie = o stabilności decyduje najmniejszy z elementów ustawia  $dt$  czytaj: *sztywność*

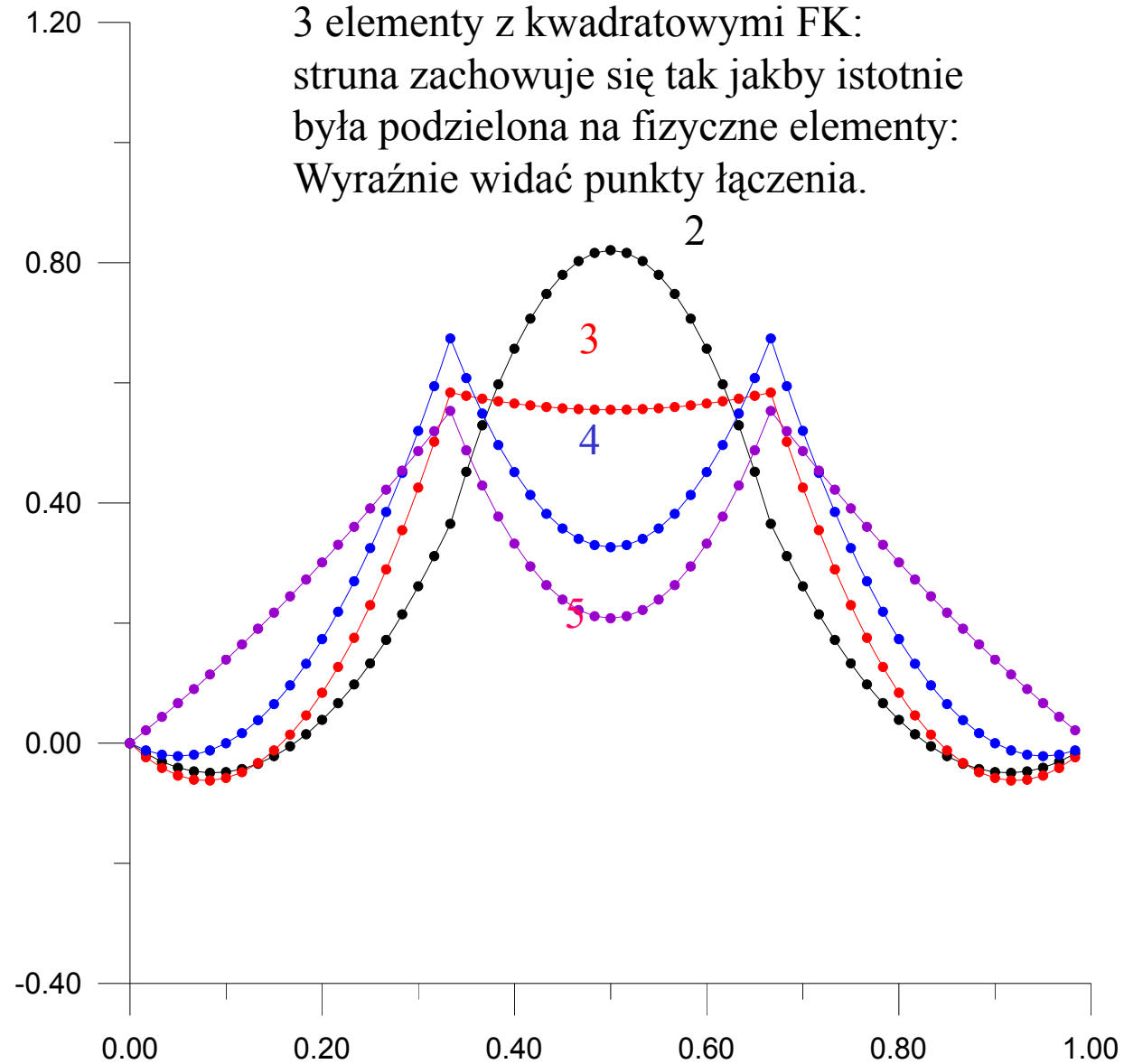
najmniejszy element (minimalny  $h$ ) narzucają na  $dt$   
najsilniejsze: ograniczenie  $dt < dx/4/\sqrt{3}$  [tw. Ironsa]

równanie falowe:

3 elementy z kwadratowymi FK:

struna zachowuje się tak jakby istotnie  
była podzielona na fizyczne elementy:

Wyraźnie widać punkty łączenia.



w MES „bezwładność” posiadają elementy na całej ich długości  
w MRS bezwładność sprowadzona jest do punktów (węzłów)

Technika (*manipulacja*) *mass lumping* (*lump*=brykiet) = masa (bezwładność) elementu sprowadzona do węzłów



w MES „bezwładność” posiadają elementy na całej ich długości  
w MRS bezwładność sprowadzona jest do punktów (węzłów)

Technika (*manipulacja*) *mass lumping* (*lump*=brykiet) = masa (bezwładność) elementu sprowadzona do węzłów

technika upodabniająca MES do MRS w celu  
zwiększenia dopuszczalnego kroku czasowego  
w **macierzy masy**  $\mathbf{O}(\phi_k \phi_\varphi)$  na diagonalu wstawiamy sumę  
elementów z danego wiersza, resztę zerujemy

dla elementów o równej długości i liniowych funkcjach  
kształtu MES + *mass lumping* = MRS

w MES „bezwładność” posiadają elementy na całej ich długości  
w MRS bezwładność sprowadzona jest do punktów (węzłów)

Technika (*manipulacja*) *mass lumping* (*lump*=brykiet) = masa (bezwładność) elementu sprowadzona do węzłów

technika upodabniająca MES do MRS w celu  
zwiększenia dopuszczalnego kroku czasowego  
w **macierzy masy**  $\mathbf{O}(\phi_k, \phi_j)$  na diagonalu wstawiamy sumę  
elementów z danego wiersza, resztę zerujemy

dla elementów o równej długości i liniowych funkcjach  
kształtu MES + *mass lumping* = MRS

*równanie falowe:*

$$\sum_j (\phi_k, \phi_j) c_j(t + dt) = \sum_j (dt^2 (\phi_k, \phi_j'') + 2(\phi_k, \phi_j)) c_j(t) - \sum_j (\phi_k, \phi_j) c_j(t - dt)$$

dla pojedynczego elementu:

$$\begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u}(t + dt) := \left[ dt^2 \begin{pmatrix} \frac{-1}{h} & \frac{1}{h} \\ \frac{1}{h} & \frac{-1}{h} \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}(t) - \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u}(t - dt)$$

$$\sum_j (\phi_k, \phi_j) c_j(t + dt) = \sum_j (dt^2 (\phi_k, \phi_j'') + 2(\phi_k, \phi_j)) c_j(t) - \sum_j (\phi_k, \phi_j) c_j(t - dt)$$

dla pojedynczego elementu:

$$\begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u}(t + dt) := \left[ dt^2 \begin{pmatrix} \frac{-1}{h} & \frac{1}{h} \\ \frac{1}{h} & \frac{-1}{h} \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}(t) - \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u}(t - dt)$$

po złożeniu (4 elementy):

$$M := \frac{h}{3} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 2 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 2 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 2 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}$$

$$\sum_j (\phi_k, \phi_j) c_j(t + dt) = \sum_j (dt^2 (\phi_k, \phi_j'') + 2(\phi_k, \phi_j)) c_j(t) - \sum_j (\phi_k, \phi_j) c_j(t - dt)$$

dla pojedynczego elementu:

$$\begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u}(t + dt) := \left[ dt^2 \begin{pmatrix} \frac{-1}{h} & \frac{1}{h} \\ \frac{1}{h} & \frac{-1}{h} \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}(t) - \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u}(t - dt)$$

po złożeniu (4 elementy):

$$M := \frac{h}{3} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 2 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 2 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 2 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}$$

po zbrykietowaniu masy:

$$M := h \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$\sum_j (\phi_k, \phi_j) c_j(t + dt) = \sum_j (dt^2 (\phi_k, \phi_j'') + 2(\phi_k, \phi_j)) c_j(t) - \sum_j (\phi_k, \phi_j) c_j(t - dt)$$

dla pojedynczego elementu:

$$\begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u}(t + dt) := \left[ dt^2 \begin{pmatrix} \frac{-1}{h} & \frac{1}{h} \\ \frac{1}{h} & \frac{-1}{h} \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}(t) - \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u}(t - dt)$$

po złożeniu (4 elementy):

$$M := \frac{h}{3} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 2 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 2 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 2 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix} \quad \text{po zbrykietowaniu masy:} \quad M := h \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

dla węzłów (poza brzegowymi):

$$h c_k(t+dt) = dt^2 [-2/h c_k(t) + 1/h c_{k-1}(t) + 1/h c_{k+1}(t)] + 2h c_k(t) - h c_k(t-dt)$$

$$[c_k(t+dt) - 2c_k(t) + c_k(t-dt)] / dt^2 = 1/h [-2/h c_k(t) + 1/h c_{k-1}(t) + 1/h c_{k+1}(t)]$$

$$\sum_j (\phi_k, \phi_j) c_j(t + dt) = \sum_j (dt^2 (\phi_k, \phi_j'') + 2(\phi_k, \phi_j)) c_j(t) - \sum_j (\phi_k, \phi_j) c_j(t - dt)$$

dla pojedynczego elementu:

$$\begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u}(t + dt) := \left[ dt^2 \begin{pmatrix} \frac{-1}{h} & \frac{1}{h} \\ \frac{1}{h} & \frac{-1}{h} \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \right] \mathbf{u}(t) - \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \mathbf{u}(t - dt)$$

po złożeniu (4 elementy):

$$M := \frac{h}{3} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 2 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 2 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 2 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix} \quad \text{po zbrykietowaniu masy:} \quad M := h \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

dla węzłów (poza brzegowymi):

$$h c_k(t+dt) = dt^2 [-2/h c_k(t) + 1/h c_{k-1}(t) + 1/h c_{k+1}(t)] + 2h c_k(t) - h c_k(t-dt)$$

$$[c_k(t+dt) - 2c_k(t) + c_k(t-dt)] / dt^2 = 1/h [-2/h c_k(t) + 1/h c_{k-1}(t) + 1/h c_{k+1}(t)]$$

$c''_{tt} = c''_{xx}$  w MRS (Verlet) z centralnymi ilorazami różnicowymi  
z ograniczeniem na krok czasowy jak dla MRS - Verleta

Działanie przeciwne do brykietowania masy:  
Uciąglenie pochodnej na granicy elementów

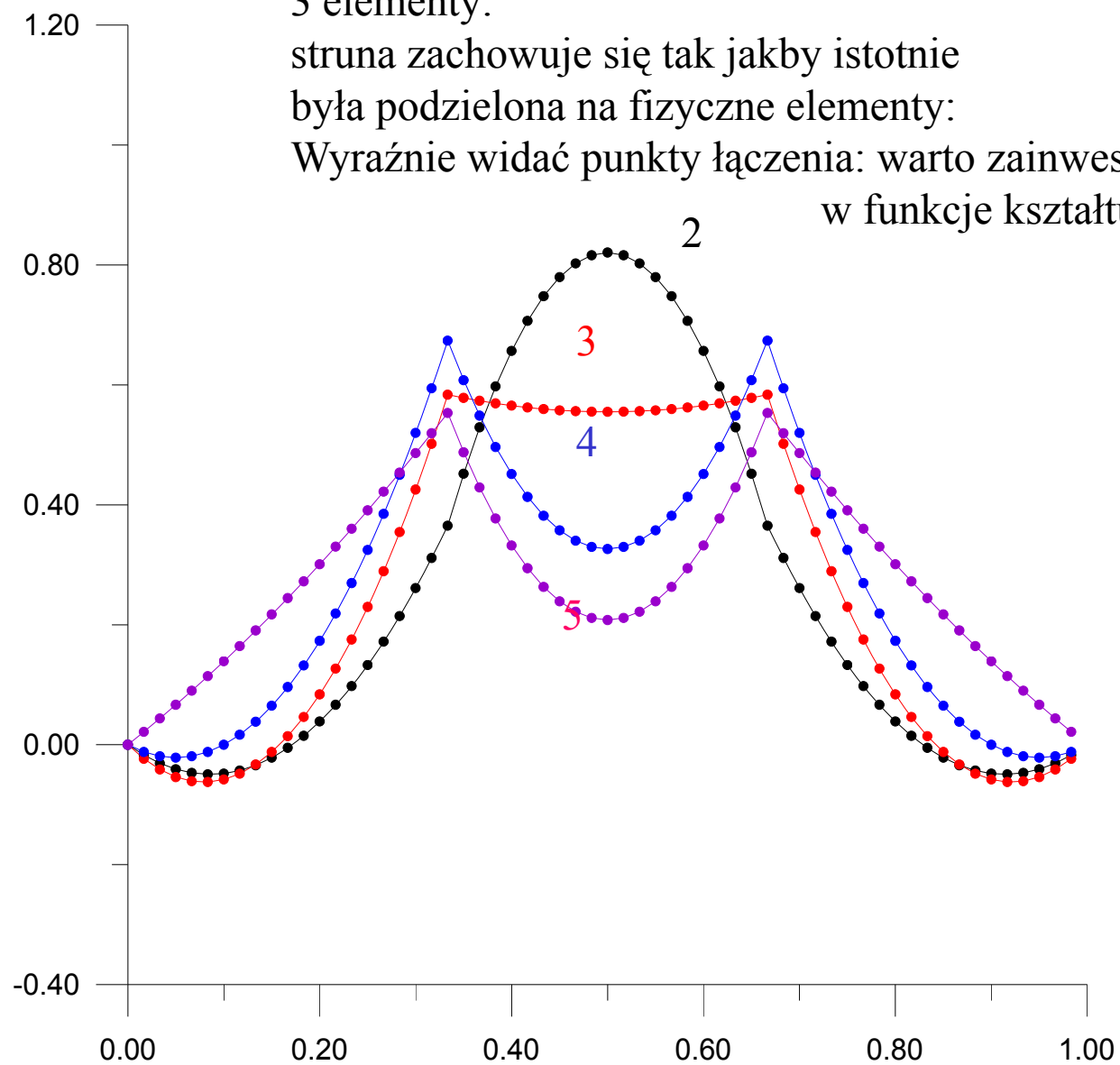
3 elementy:

struna zachowuje się tak jakby istotnie

była podzielona na fizyczne elementy:

Wyraźnie widać punkty łączenia: warto zainwestować

w funkcje kształtu Hermita



równanie falowe

$$\sum_j (\phi_k, \phi_j) c_j(t + dt) = \sum_j (dt^2 (\phi_k, \phi_j'') + 2(\phi_k, \phi_j)) c_j(t) - \sum_j (\phi_k, \phi_j) c_j(t - dt)$$

---

$$u(\xi) = u_1^0 \phi_1^0(\xi) + u_1^1 \phi_1^1(\xi) + u_2^0 \phi_2^0(\xi) + u_2^1 \phi_2^1(\xi)$$

$$\phi_1^0 = \frac{1}{2} - \frac{3}{4}\xi + \frac{1}{4}\xi^3$$

$$\phi_1^1 = \frac{J_m}{4} (1 - \xi - \xi^2 + \xi^3)$$

$$\phi_2^0 = \frac{1}{2} + \frac{3}{4}\xi - \frac{1}{4}\xi^3$$

$$\phi_2^1 = \frac{J_m}{4} (-1 - \xi + \xi^2 + \xi^3)$$

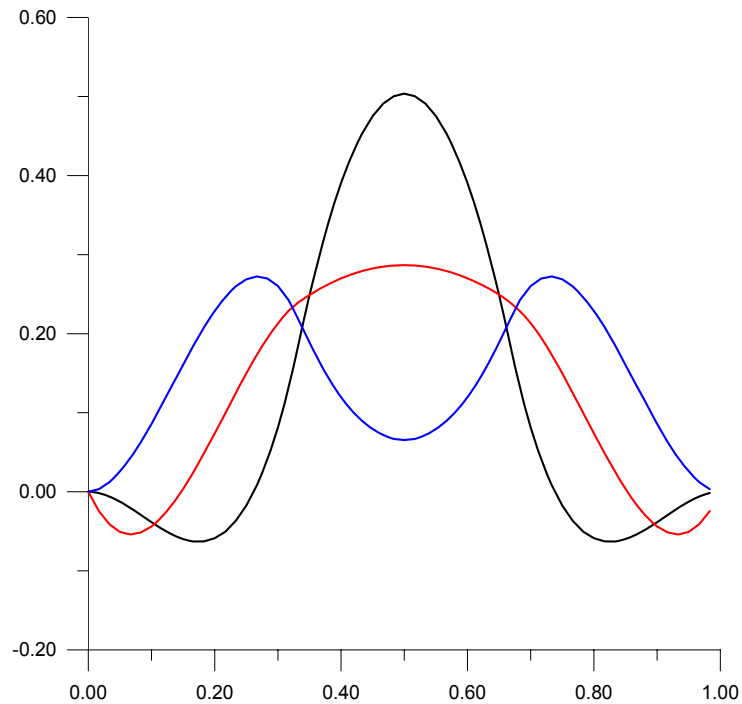


$$E_{ij}^m = \frac{1}{30J_m} \begin{pmatrix} -18 & -3J_m & 18 & -3J_m \\ -3J_m & -8J_m^2 & 3J_m & 2J_m^2 \\ 18 & 3J_m & -18 & 3J_m \\ -3J_m & 2J_m^2 & 3J_m & -8J_m^2 \end{pmatrix} \quad (\phi_i \phi_j'')$$

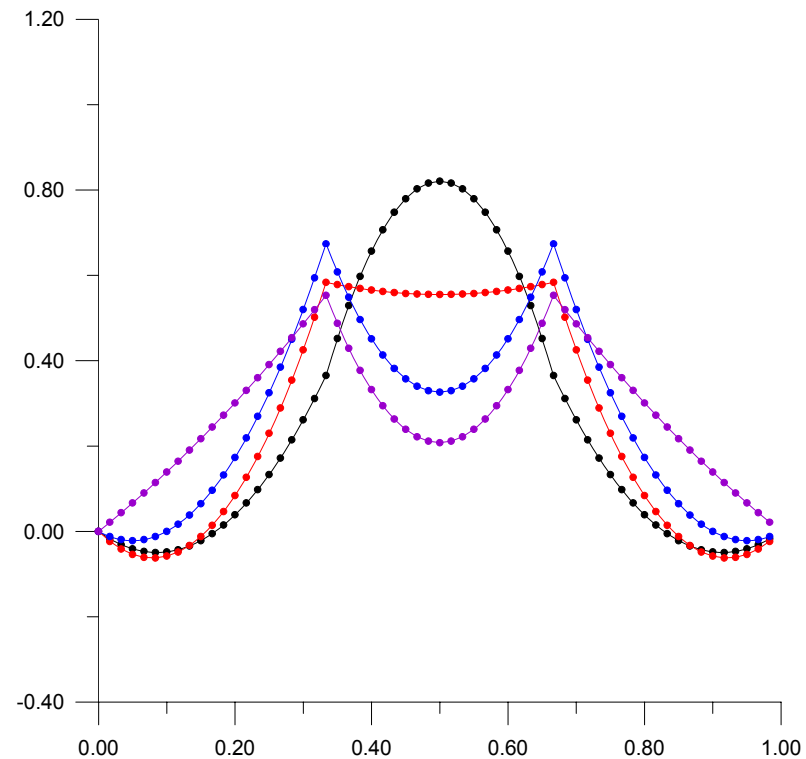
$$O_{ij}^m = \frac{J_m}{105} \begin{pmatrix} 78 & 22J_m & 27J_m & -13J_m \\ 22J_m & 8J_m^2 & 13J_m & -6J_m^2 \\ 27 & 13J_m & 78 & -22J_m \\ -13J_m & -6J_m^2 & -27J_m & 8J_m^2 \end{pmatrix}$$

# drżania złożonej z 3 elementów struny dla różnych funkcji kształtu (zdjęcia z kolejnych chwil czasowych)

3 elementy, struna, funkcje Hermitea

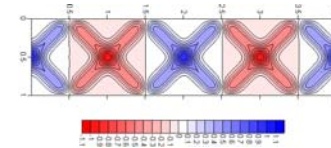


3 elementy, struna  
funkcje Lagrange

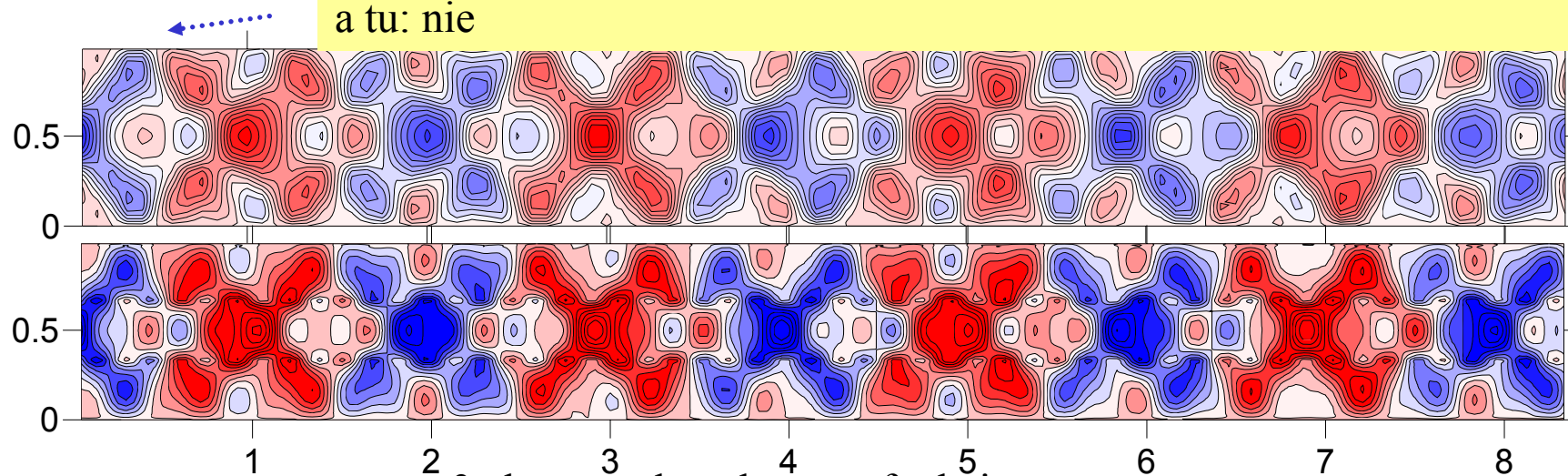


drgania złożonej z 3 elementów struny  
dla różnych funkcji kształtu (zdjęcia z kolejnych chwil czasowych)

3 elementy kubiczne sklejki Hermitea



w rozwiązaniu dokładnym granica: niebieskie / czerwone jest jak nożem uciał  
a tu: nie



3 elementy kwadratowe funkcje  
kształtu Lagrange'a

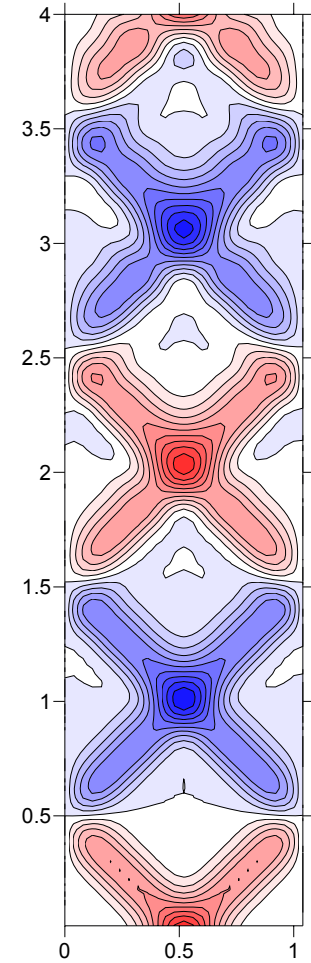
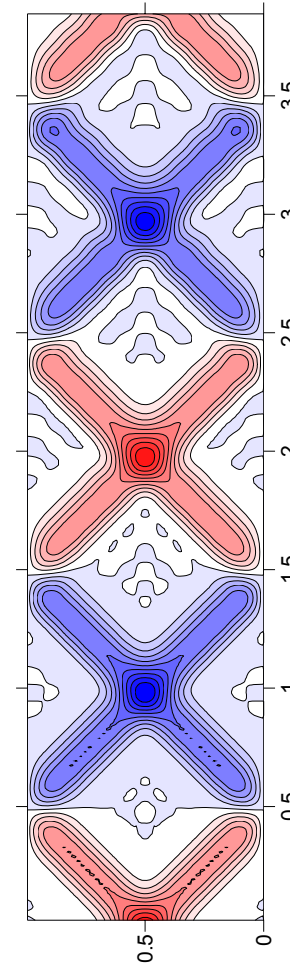
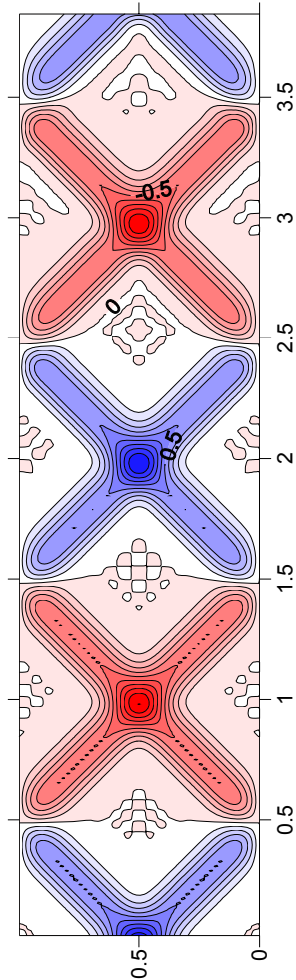
Ten sam krok czasowy, tyle samo parametrów węzłowych

**ALE:Hermit:** stabilny dopiero dla  $dt=dx/4!$   
13 elementów, 28 parametrów węzłowych  
tutaj  $dx$  2 razy większe niż obok

27 węzłów (13 elementów)  $dt=dx/2$   
(wciąż niestabilne dla  $dt=dx$ )

kwadratowe Lagrangea

liniowe  
(przy tym samym  
rozkładzie węzłów)



Wiedza jaką nabyliśmy do tej pory na podstawie rachunków dla równania adwekcji, dyfuzji i falowego:

MES zależne od czasu buduje się na podstawie schematów dla MRS.

Schematy jawne MRS generują schematy MES, które nie działają jak podstawienie.  
Ponadto: uzyskane schematy są stabilne z  
ostrzejszym ograniczeniem na krok czasowy niż w MRS.

Ograniczenie na krok czasowy dane przez krok przestrzenny jest bardzo złą informacją dla MES bo nie pozwala na efektywne rachunki przy zoptymalizowanej (lokalnie zagęszczonej) siatce.

Budowa schematów MES na jawnych MRS nie ma sensu.  
Bazować należy na niejawnym schematach MRS, które przeniesione do MES działają bez ograniczenia na krok czasowy.

Odpowiednik CN dla równania falowego:  
schemat Newmarka

$$u(t+dt) = 2u(t) - u(t-dt) + dt^2 [\beta a(t+dt) + (1/2 - 2\beta + \gamma)a(t) + (-\gamma + \beta + 1/2)a(t-dt)]$$

$\gamma, \beta$  – parametry metody

$a$  : przyspieszenie

Verlet  $\gamma=1/2, \beta=0$  ograniczony  
przez CFL  $cdt \leq dx$

w MRS widzieliśmy, że  
Newmark z  $\gamma=1/2$  i  $\beta=1/4$  – stabilny dla  
dowolnego  $dt$ .

[Pamiętamy, że dla Newmarka: im mniejsze  
beta tym lepiej: beta wprowadzało sztuczna  
dyssypacje (przydatną bo stabilizującą  
schemat)]

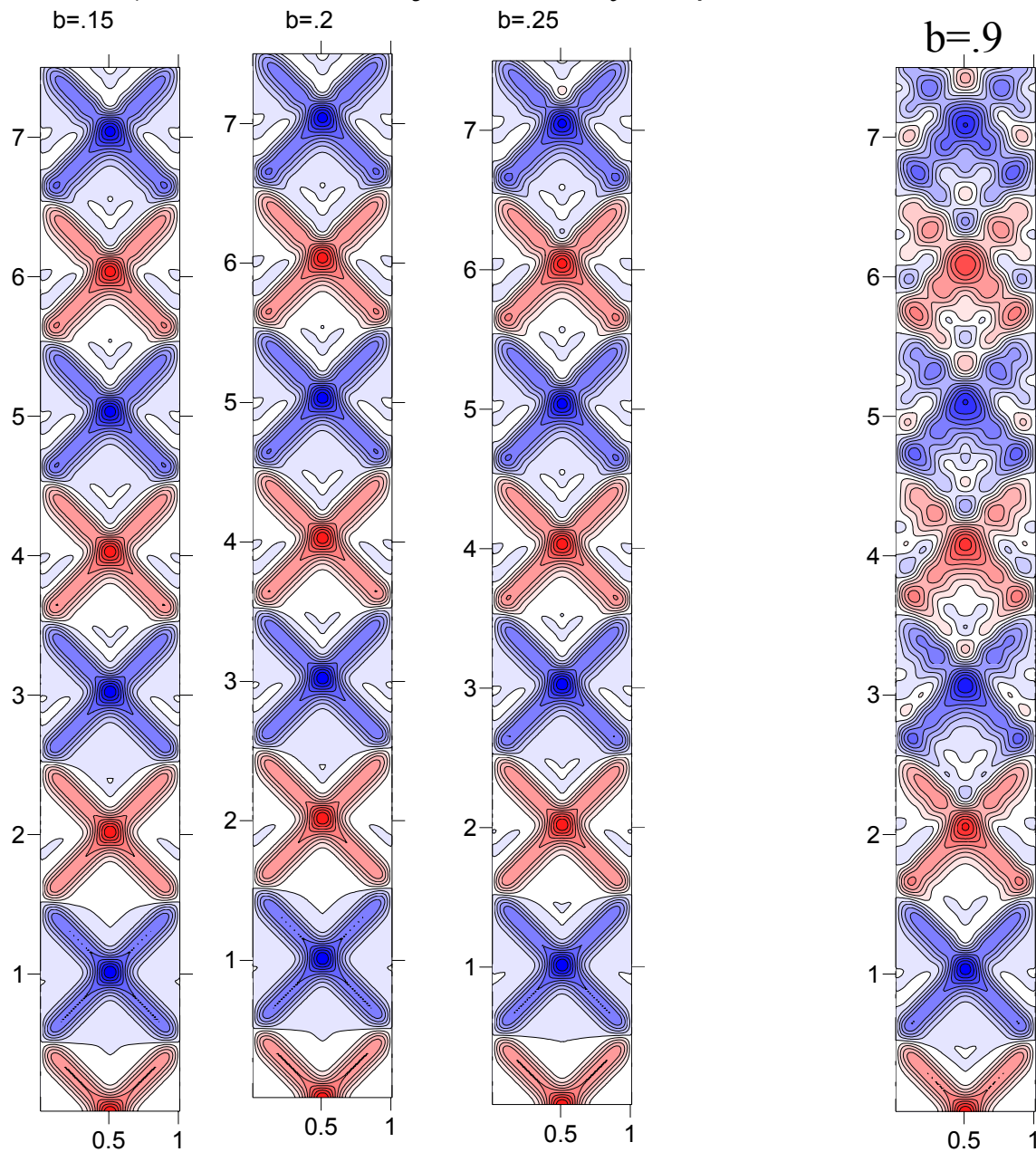
dla falowego:  
 $a = c^2 u_{xx}$  [ $c=1$ ]

poza CFL:  $dt > cdx$

$dt=1.5dx$ ,

$\gamma=0.5$ , schemat staje się stabilny dla  $\beta > 0.15$

101 węzłów MRS



przypomnienie

rosnące  $\beta$  generuje  
wyższe częstotliwości  
wniosek:  
najlepszy minimalne  
 $\beta$  przy którym  
schemat jeszcze stabilny

## MES, równanie falowe, schemat Newmarka

$$u(t+dt) = 2u(t) - u(t-dt) + dt^2 [\beta a(t+dt) + (1/2 - 2\beta + \gamma)a(t) + (-\gamma + \beta + 1/2)a(t-dt)]$$

Verlet = stabilność MES dla  $cdt < dx/\sqrt{3}$

pytanie: Jak duże beta, żeby FEM był stabilny dla  $cdt = dx$  ?

$\gamma = 1/2$  (fiksujemy)

$$u(t+dt) = 2u(t) - u(t-dt) + dt^2 [\beta a(t+dt) + (1 - 2\beta)a(t) + \beta a(t-dt)]$$

$$u(t+dt) - dt^2 \beta a(t+dt) = 2u(t) - u(t-dt) + dt^2 [(1 - 2\beta)a(t) + \beta a(t-dt)]$$

$$a(x,t) = c^2 u_{xx}(x,t)$$

$$\sum_j ((\phi_k, \phi_j) - dt^2 \beta (\phi_k, \phi_j'')) u_j(t + dt) =$$

$$\sum_j (2(\phi_k, \phi_j) + dt^2 (1 - 2\beta) (\phi_k, \phi_j'')) u_j(t) + \sum_j (-(\phi_k, \phi_j) + dt^2 \beta (\phi_k, \phi_j'')) u_j(t - dt)$$

dla jednego elementu, z  $u$  = wektorem własnym macierzy iteracji  $u(t+dt) = \lambda^2 u(t-dt)$ ,

$$u(t) = \lambda u(t-dt)$$



$$\sum_j ((\phi_k, \phi_j) - dt^2 \beta (\phi_k, \phi_j'')) u_j(t + dt) =$$

$$\sum_j (2(\phi_k, \phi_j) + dt^2 (1 - 2\beta) (\phi_k, \phi_j'')) u_j(t) + \sum_j (-(\phi_k, \phi_j) + dt^2 \beta (\phi_k, \phi_j'')) u_j(t - dt)$$

$$(A - dt^2 \beta B) \lambda^2 u = \lambda (2A + dt^2 (1 - 2\beta) B) u + (-A + dt^2 \beta B) u$$

liniowe funkcje kształtu:

$$A = \begin{pmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} \\ \frac{h}{6} & \frac{h}{3} \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} \frac{-1}{h} & \frac{1}{h} \\ \frac{1}{h} & \frac{-1}{h} \end{pmatrix}$$

*weźmy  $cdt=h$  (przypominamy, że  $c=1$ )*

$$(A - dt^2\beta B)\lambda^2 u = \lambda(2A + dt^2(1 - 2\beta)B)u + (-A + dt^2\beta B)u$$

> C:=lambda\*\*2\*matadd(A,-beta\*h\*\*2\*B);

$$C = \lambda^2 \begin{bmatrix} \frac{1}{3}h + h\beta & \frac{1}{6}h - h\beta \\ \frac{1}{6}h - h\beta & \frac{1}{3}h + h\beta \end{bmatrix}$$

> DD:=lambda\*matadd(2\*A,h\*\*2\*(1-2\*beta)\*B);

$$DD = \lambda \begin{bmatrix} \frac{2}{3}h - h(1-2\beta) & \frac{1}{3}h + h(1-2\beta) \\ \frac{1}{3}h + h(1-2\beta) & \frac{2}{3}h - h(1-2\beta) \end{bmatrix}$$

> EE:=matadd(-A,h\*\*2\*(beta)\*B);

$$EE = \begin{bmatrix} -\frac{1}{3}h - h\beta & -\frac{1}{6}h + h\beta \\ -\frac{1}{6}h + h\beta & -\frac{1}{3}h - h\beta \end{bmatrix}$$

> W:=matadd(C,-DD);

$$W = \begin{bmatrix} \lambda^2 \left( \frac{1}{3}h + h\beta \right) - \lambda \left( \frac{2}{3}h - h(1-2\beta) \right) & \lambda^2 \left( \frac{1}{6}h - h\beta \right) - \lambda \left( \frac{1}{3}h + h(1-2\beta) \right) \\ \lambda^2 \left( \frac{1}{6}h - h\beta \right) - \lambda \left( \frac{1}{3}h + h(1-2\beta) \right) & \lambda^2 \left( \frac{1}{3}h + h\beta \right) - \lambda \left( \frac{2}{3}h - h(1-2\beta) \right) \end{bmatrix}$$

> WW:=matadd(W,-EE);

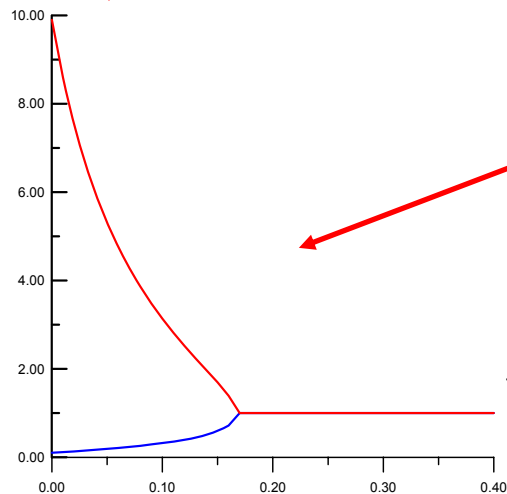
$$WW = \begin{bmatrix} \lambda^2 \left( \frac{1}{3}h + h\beta \right) - \lambda \left( \frac{2}{3}h - h(1-2\beta) \right) + \frac{1}{3}h + h\beta & \lambda^2 \left( \frac{1}{6}h - h\beta \right) - \lambda \left( \frac{1}{3}h + h(1-2\beta) \right) + \frac{1}{6}h - h\beta \\ \lambda^2 \left( \frac{1}{6}h - h\beta \right) - \lambda \left( \frac{1}{3}h + h(1-2\beta) \right) + \frac{1}{6}h - h\beta & \lambda^2 \left( \frac{1}{3}h + h\beta \right) - \lambda \left( \frac{2}{3}h - h(1-2\beta) \right) + \frac{1}{3}h + h\beta \end{bmatrix}$$

> det("");

$$h^2\beta + 6\lambda^2 h^2\beta - 4\lambda h^2\beta - 4\lambda^3 h^2\beta + \lambda^4 h^2\beta + \frac{1}{12}h^2 - \frac{3}{2}\lambda^2 h^2 + \frac{2}{3}\lambda h^2 + \frac{2}{3}\lambda^3 h^2 + \frac{1}{12}\lambda^4 h^2$$

> solve("",lambda);

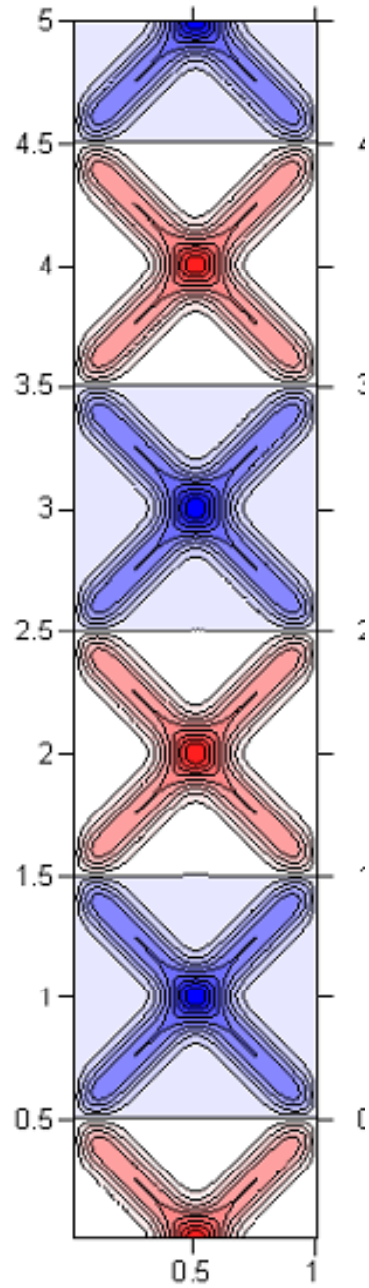
$$1, 1, \frac{1}{2} \frac{24\beta - 10 + 4\sqrt{-36\beta + 6}}{12\beta + 1}, \frac{1}{2} \frac{24\beta - 10 - 4\sqrt{-36\beta + 6}}{12\beta + 1}$$



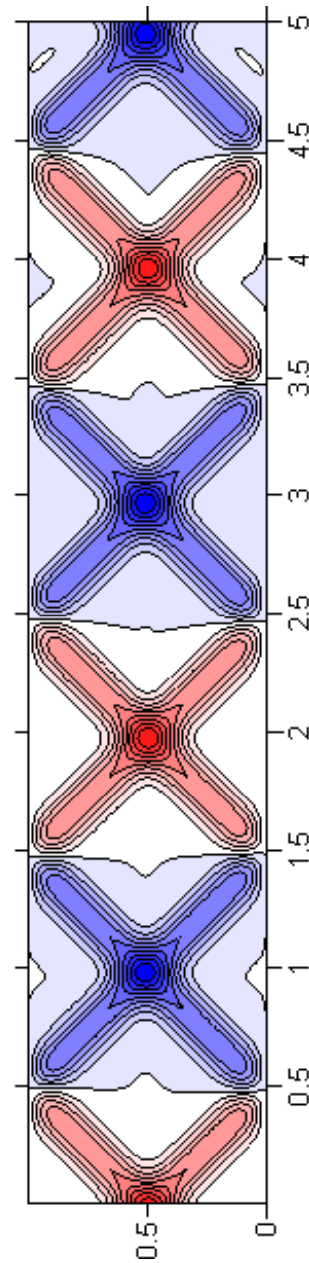
moduły 2 pierwiastków, stają się równe 1 dla  $\beta \geq 1/6 = .16666$   
 mamy odpowiedź: aby Newmark z MES  
 jest stabilny dla  $cdt=dx$ , jeśli  $\beta \geq 1/6$

**udało nam się dogonić Verleta w MRS**

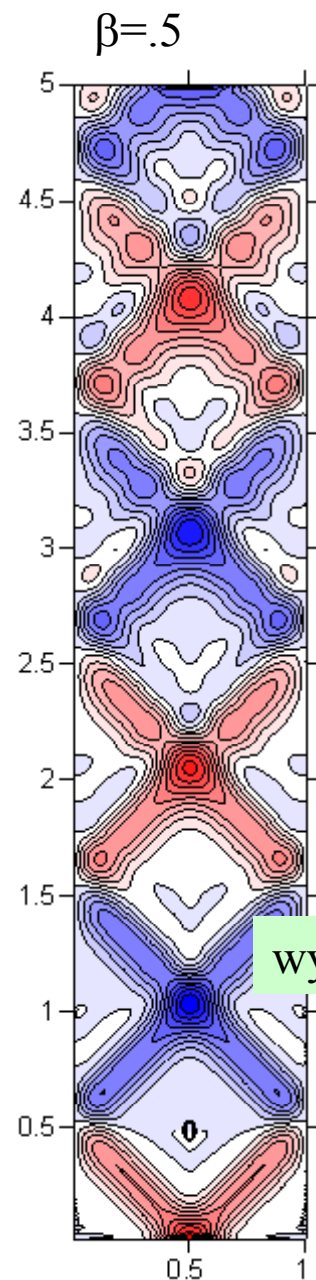
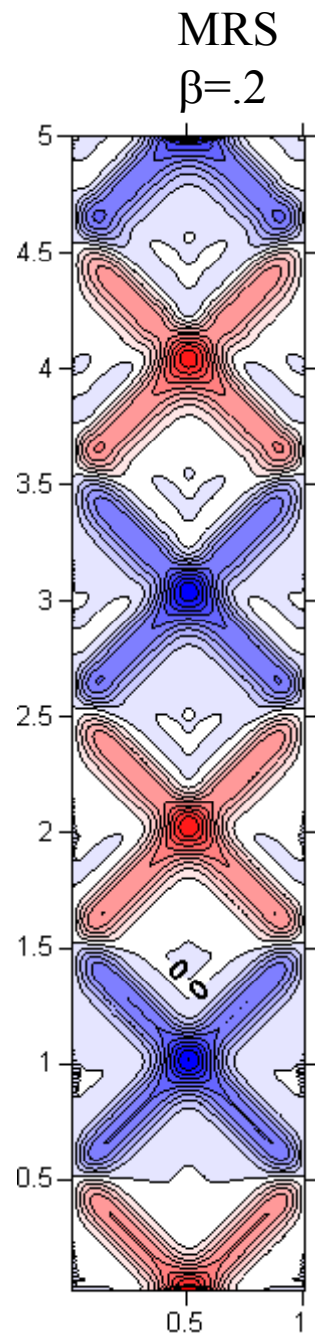
MRS, dt=dx, Verlet



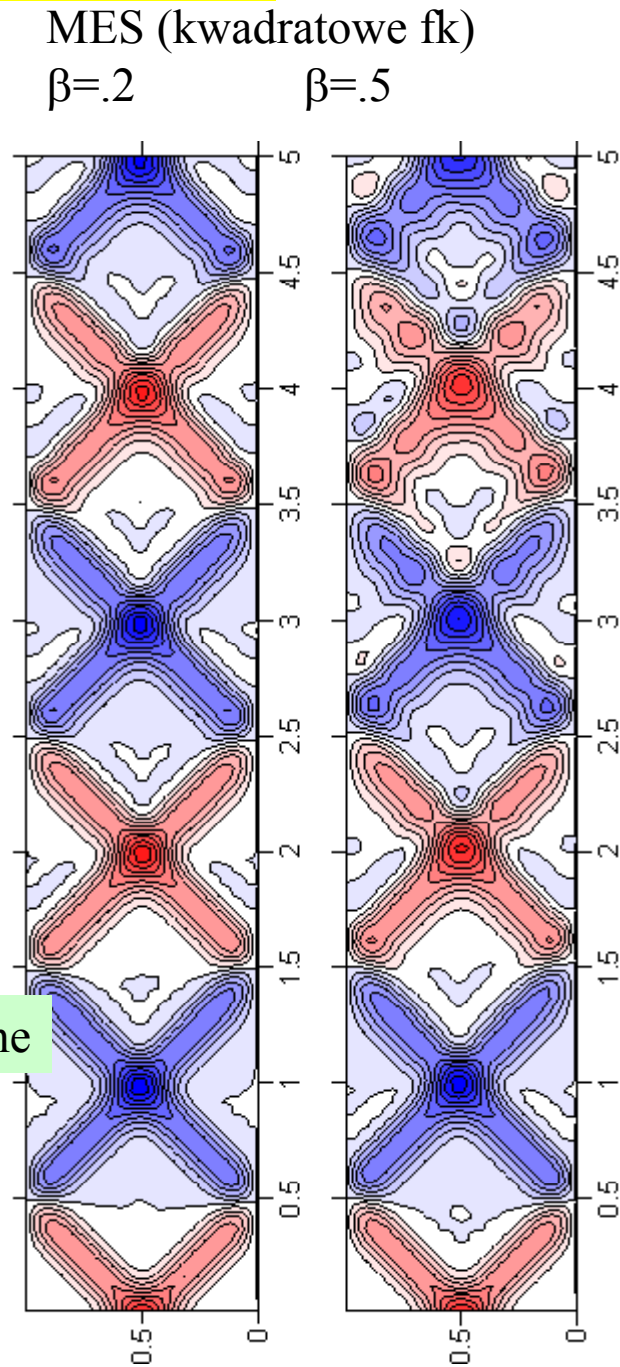
MES, dt=dx, **kwadratowe** fk  $\beta=0.25$



wydlużmy krok czasowy  $dt=2dx$ , Newmark w MRS i MES

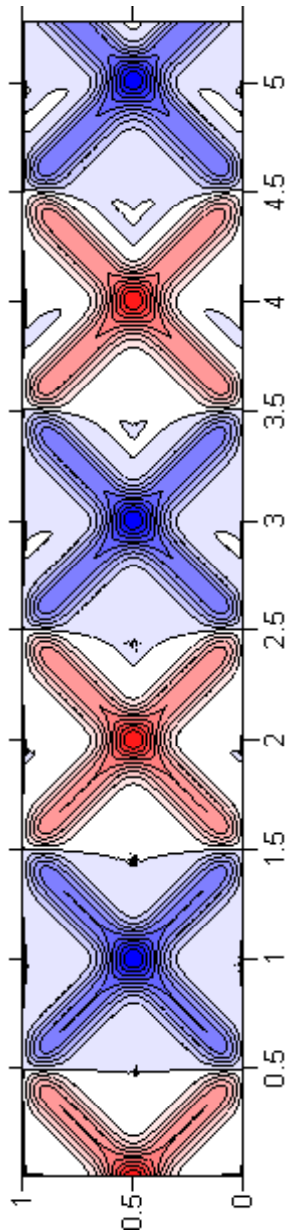


wyniki identyczne



## FEM ze schematem Newmarka i kwadratowymi FK

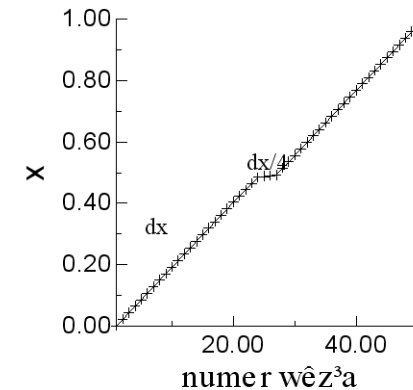
$dt=dx$ ,  $\beta=0.25$



zastosowanie schematu Newmarka dla MES przy nierównej siatce

Newmark ratuje sytuacje MES: można dobrać takie  $\beta$  aby uzyskać schemat stabilny dla każdego kroku czasowego

101 węzłów



przekroczyliśmy ograniczenie Verleta  $dt < dx/4/\sqrt{3}$  siedmiokrotnie

Wniosek:

MES pozwala na adaptację siatki,  
która niemożliwa (trudna) w MRS

Tw. Ironsa: o stabilności decyduje najdrobniejszy element.  
[problem podobny do sztywności]

Wyjście: MES zależne od czasu tylko  
ze schematami, które w MRS są niejawne  
i pozwalają na dowolny krok czasowy

(jawne nie są mniej złożone, a gorsze)

# Metody Monte Carlo dla równań różniczkowych

Metody Monte Carlo – najogólniej te, które do rozwiązania zadania (obliczenia wyniku) wykorzystują próbkowanie losowe.

Stosowane nie tylko w modelowaniu procesów losowych, również do problemów nie mających nic wspólnego z rachunkiem prawdopodobieństwa (patrz – nasze doświadczenie z pierwszego semestru dla optymalizacji MC lub liczenia całek).

W tradycyjnej teorii MC problemy takie rozwiązuje się stawiając (nowe) zadanie z rachunku prawdopodobieństwa, które ma to samo rozwiązanie co zadanie pierwotne. Zadanie nowe rozwiązywane jest przez eksperyment statystyczny.

Znany przykład:  $I = \int_a^b f(x)g(x)dx$  przy czym  $\int_a^b f(x)dx = 1, f(x) \geq 0$

$I$  szacować można wtedy losując zmienną  $x$  z rozkładem pstwa  $f(x)$  i liczyć średnią wartość

$$I \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i)_{|f(x)} = \langle g(x) \rangle_{|f(x)}$$

Całkowania MC istotnie używa się, dla całek o większej liczbie wymiarów

Przykład: („mniej” użyteczny)

Sumę  $S=A+B$  można przedstawić jako

$$S = p \frac{A}{p} + (1 - p) \frac{B}{1 - p} \quad \text{gdzie } 0 < p < 1$$

i interpretować jako wartość oczekiwaną zmiennej losowej, która  
z prawdopodobieństwem  $p$  przyjmuje wartość  $A/p$ ,  
a z prawdopodobieństwem  $(1-p)$  wartość  $B/(1-p)$

Jeśli zbudujemy odpowiednią zmienną losową, i dokonamy  $N$  losowań,  
które dadzą wyniki  $w_1, w_2 \dots w_N$ ,

oszacowanie  $S$  znajdziemy jako

$$S \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_i$$

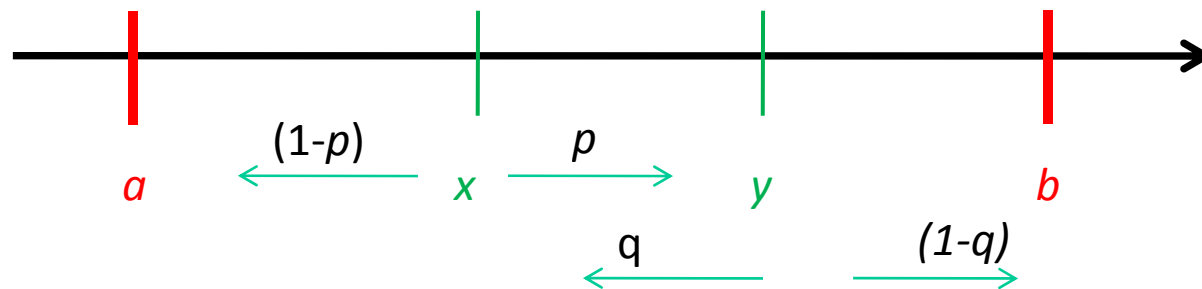


Wyobraźmy sobie, że mamy układ równań liniowych

$$X = pY + (1-p)A$$

$Y = qX + (1-q)B$ , gdzie  $X, Y$  – niewiadome,  $A, B, p, q$  – dane, przy czym  $0 < p < 1$ ,  $0 < q < 1$ ,  
Interesuje nas  $X$

Problem można rozwiązać w następujący sposób (przez **błądzenie przypadkowe**):



Zasady błędzenia:

Startuję w  $x$ :

Jeśli jestem w  $x$ : z pstwem  $p$  przechodzę do  $y$ , a z pstwem  $(1-p)$  do  $a$

Jeśli jestem w  $y$ : z pstwem  $q$  przechodzę do  $x$ , a z pstwem  $(1-q)$  do  $b$

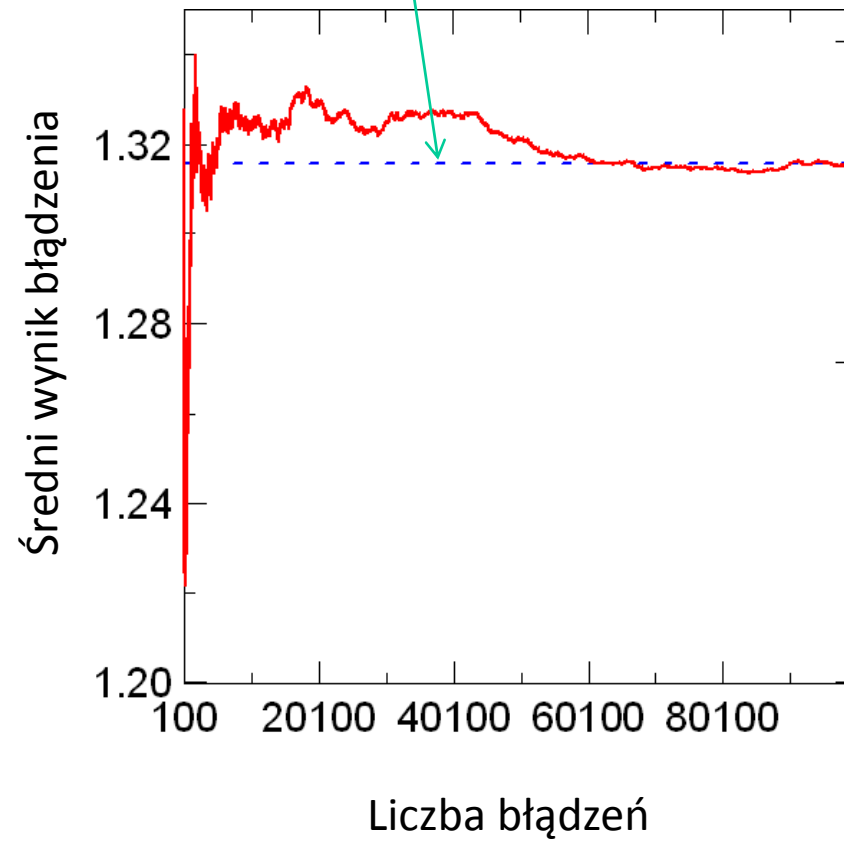
Błądzenie kończy się z wynikiem  $A$  gdy trafię do  $a$  i z wynikiem  $B$  gdy trafię do  $b$

$X$  jest oczekiwanym wynikiem błędzenia, które wystartujemy od  $x$

$$X = pY + (1-p)A$$
$$Y = qX + (1-q)B,$$

$$A=1, B=5, p=0.3, q=0.8$$
$$Y = 2.0526$$
$$X = 1.3158$$

Przykład:



Układ dowolnej liczby równań liniowych:  $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$

Przedstawiony w postaci iteracyjnej:  $\mathbf{x}=\mathbf{a}+\mathbf{Hx}$

Założmy, że macierz iteracji  $\mathbf{H}$  konstruujemy tak, że wszystkie jej elementy są nieujemne oraz mniejsze od 1

$$(\mathbf{I}-\mathbf{H})\mathbf{x}=\mathbf{a}$$

$$\mathbf{x}=(\mathbf{I}-\mathbf{H})^{-1}\mathbf{a}$$

$$\mathbf{x}=\mathbf{a}+\mathbf{H}\mathbf{a}+\mathbf{H}^2\mathbf{a}+\mathbf{H}^3\mathbf{a}+\dots$$

$$A:=\begin{bmatrix} -3 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & 0 \\ 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \quad B:=\begin{bmatrix} -3 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} \quad C:=\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$(\mathbf{B}+\mathbf{C})\mathbf{x}=\mathbf{b}$$

$$\mathbf{Bx}=\mathbf{b}-\mathbf{Cx}$$

$$\mathbf{x}=\mathbf{B}^{-1}\mathbf{b}-\mathbf{B}^{-1}\mathbf{Cx}$$

$$\mathbf{H}=-\mathbf{B}^{-1}\mathbf{C}$$

Jak w met. Jakobiego

$$H:=\begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}$$

$$x_i = a_i + \sum_{j=1}^n H_{ij}a_j + \sum_{j_1=1}^n \sum_{j_2=1}^n H_{ij_1}H_{j_1j_2}a_{j_2} + \sum_{j_1=1}^n \sum_{j_2=1}^n \sum_{j_3=1}^n H_{ij_1}H_{j_1j_2}H_{j_2j_3}a_{j_3} + \dots$$

$$\mathbf{b}=(9,0,0)^T$$

$$\mathbf{x}=-(-4,2,1)^T$$

$$\mathbf{a}=-(-3,0,0)^T$$

Metoda von Neumanna-Ulama:  $\mathbf{x}=\mathbf{a}+\mathbf{H}\mathbf{x}$

Dla macierzy  $\mathbf{H}$ , która posiada tylko dodatnie elementy, takie, że suma wyrazów w wierszu  $< 1$

$$H := \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}$$

Uzupełniamy macierz  $\mathbf{H}$  o kolumnę zerową

$$H_{i,0} = 1 - \sum_{j=1}^n H_{ij} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{a} = \begin{pmatrix} -3 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Cel metody – wyznaczenie oszacowania składowej  $j$ -tej rozwiązania

Zbiór indeksów (stanów)  $\{0,1,2,\dots,n\}$

Punkt  $X$  (wędrowiec), startuje od wiersza  $i_0 = j$

W kroku  $t$  wędrowiec przechodzi z wiersza  $i_t$  do  $i_{t+1}$  z prawdopodobieństwem  $H(i_t, i_{t+1})$

Błądzenie zakończone, gdy  $X$  dotrze do stanu 0. Trajektoria  $\gamma = (i_0, i_1, i_2, \dots, i_{k-1}, i_k, 0)$ .

Wtedy wynik błędzenia:  $X(\gamma) = a(i_k) / H(i_k, 0)$

$X(\gamma)$  – zmienna losowa, która przyjmuje wartość  $= a(i_k) / H(i_k, 0)$  z pstwem równym wystąpieniu stanu  $i_k$  w przedostatnim kroku trajektorii.

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} -9 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$X(\gamma)$  – zmienna losowa, która przyjmuje wartość  $W(i_k)$  z pstwem równym wystąpieniu stanu  $i_k$  w przedostatnim kroku trajektorii.

$$\langle X | i_0 = s \rangle = \sum_{\gamma} X(\gamma) P(\gamma)$$

Wartość oczekiwana zmiennej  $X$ , pod warunkiem, że trajektoria startuje z punktu  $s$

Suma po wszystkich trajektoriach

Wynik błędzenia

pstwo wystąpienia konkretnej trajektorii

$$\langle X \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\gamma_k} X(\gamma_k) P(\gamma_k)$$

Suma po trajektoriach długości  $k$

Trajektoria długości 0 jest tylko jedna

:  $\gamma_0=(s,0)$

Trajektorii długości 1 jest  $n$  :

$\gamma_1=(s,1,0); (s,2,0); \dots; (s,n,0)$

Pstwo, że zaobserwowana zostanie trajektoria długości 0:  $H_{s,0}$ , jej wynik  $a_s / H_{s,0}$

Pstwo, że zaobserwowana zostanie trajektoria długości 1:  $(s, i_1, 0)$ :

$P(s, i_1, 0) = H_{s, i_1} * H_{i_1, 0}$ , a jej wynik  $X(s, i_1, 0) = a_{i_1} / H_{i_1, 0}$

itd

$$\begin{array}{c}
 -9 \\
 0 \\
 0 \\
 \uparrow \\
 x
 \end{array}
 \left[ \begin{array}{c}
 \frac{1}{3} \\
 \frac{1}{2} \\
 \frac{1}{2}
 \end{array} \right]
 \left[ \begin{array}{ccc}
 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\
 \frac{1}{2} & 0 & 0 \\
 0 & \frac{1}{2} & 0
 \end{array} \right]$$

$$\langle X \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\gamma_k} X(\gamma_k) P(\gamma_k)$$

Suma po trajektoriach długości  $k$

Trajektoria długości 0 jest tylko jedna

:  $\gamma_0 = (s, 0)$

Trajektorii długości 1 jest  $n$  :

$\gamma_1 = (s, 1, 0); (s, 2, 0); \dots; (s, n, 0)$

Pstwo, że zaobserwowana zostanie trajektoria długości 0:  $H_{s,0}$ , jej wynik  $a_s / H_{s,0}$

Pstwo, że zaobserwowana zostanie trajektoria długości 1:  $(s, i_1, 0)$ :

$P(s, i_1, 0) = H_{s, i_1} * H_{i_1, 0}$ , a jej wynik  $X(s, i_1, 0) = a_{i_1} / H_{i_1, 0}$

itd

$$\langle X \rangle = a_s + \sum_{i_1=1}^n H_{s, i_1} a_{i_1} + \sum_{i_1=1}^n \sum_{i_2=1}^n H_{s, i_1} H_{i_1, i_2} a_{i_2} + \dots$$

$$\langle X \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\gamma_k} X(\gamma_k) P(\gamma_k)$$

Suma po trajektoriach długości  $k$

Trajektoria długości 0 jest tylko jedna

:  $\gamma_0 = (s, 0)$

Trajektorii długości 1 jest  $n$ :

$\gamma_1 = (s, 1, 0); (s, 2, 0); \dots; (s, n, 0)$

Pstwo, że zaobserwowana zostanie trajektoria długości 0:  $H_{s,0}$ , jej wynik  $a_s / H_{s,0}$

Pstwo, że zaobserwowana zostanie trajektoria długości 1:  $(s, i_1, 0)$ :

$P(s, i_1, 0) = H_{s, i_1} * H_{i_1, 0}$ , a jej wynik  $X(s, i_1, 0) = a_{i_1} / H_{i_1, 0}$

itd

$$\langle X \rangle = a_s + \sum_{i_1=1}^n H_{s, i_1} a_{i_1} + \sum_{i_1=1}^n \sum_{i_2=1}^n H_{s, i_1} H_{i_1, i_2} a_{i_2} + \dots$$

Rozpoznajemy wcześniejszy wzór:

$$\mathbf{x} = (\mathbf{I} - \mathbf{H})^{-1} \mathbf{a}$$

$$x_i = a_i + \sum_{j=1}^n H_{ij} a_j + \sum_{j_1=1}^n \sum_{j_2=1}^n H_{ij_1} H_{j_1 j_2} a_{j_2} + \sum_{j_1=1}^n \sum_{j_2=1}^n \sum_{j_3=1}^n H_{ij_1} H_{j_1 j_2} H_{j_2 j_3} a_{j_3} + \dots$$

Oszacowanie s-tej składowej rozwiązania dostaniemy jako średnią ważoną z wyników trajektorii błędzenia przypadkowego wg. podanego wyżej regulaminu



Przykład:

Startujemy od  $s=1$ :

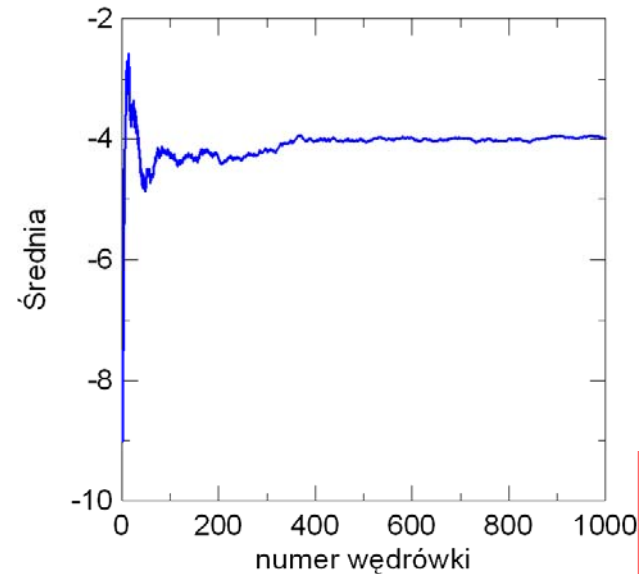
```
2.2477936E-05    0
*** -9.000000    -9.000000
8.5032448E-02    0
*** -9.000000    -9.000000
0.6013526        2
0.8916113        1
0.9679557        3
0.1896898        0
*** 0.0000000E+00 -6.000000
0.5149758        2
0.3980084        0
*** 0.0000000E+00 -4.500000
0.2629062        0
*** -9.000000    -5.400000
0.7435125        3
8.9547768E-02    0
*** 0.0000000E+00 -4.500000
0.5603899        2
0.5822297        1
0.8095667        3
0.5919188        2
0.5117126        1
0.8766339        3
0.9950845        2
0.7262117        1
0.9666114        3
0.2971023        0
*** 0.0000000E+00 -3.857143
0.4260508        2
0.8994977        1
0.6529987        2
0.9015343        1
0.9615331        3
0.1647129        0
```

Drukujemy liczbę losową i zaakceptowany stan

Trajektoria kończy się przez '\*\*\*', dwie liczby to „wynik” oraz

„średnia” z wyników

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix} \quad X = \begin{pmatrix} -9 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$



$$b = (9, 0, 0)^T$$

$$x = -(4, 2, 1)^T$$

$$a = (-3, 0, 0)^T$$

Przykład:

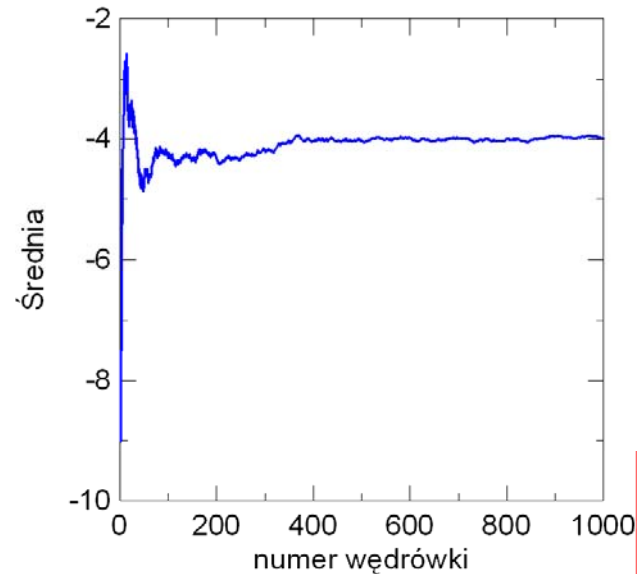
Startujemy od  $s=1$ :

$\sigma^2 = \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle$     Wariancja (miara zmienności rozkładu pstwa)

$\tilde{\sigma}^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (X_i - \langle X \rangle)^2$     Oszacowanie wariancji (estymator nieobciążony)

W naszym przykładzie,  $X$  przyjmuje  
wartość  $-9$  z pstwem  $44.(44)\%$   
oraz  $0$  z pstwem  $[100-40.(44)]\%$   
Średnia  $-4$

Wariancja:  $44.(44)\% * (-9+4)^2 +$   
 $(100-44.(44)\%)*4^2=20$

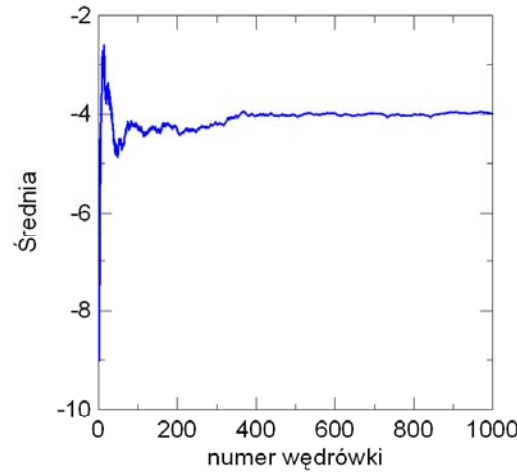
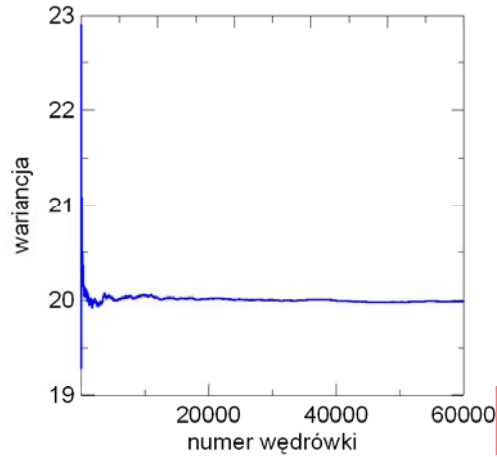


$b = (9,0,0)^T$   
 $x = -(4,2,1)^T$   
 $a = (-3,0,0)^T$

## Szacowanie błędu wyznaczenia średniej

$$\sigma^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (X_i - \langle X \rangle)^2$$

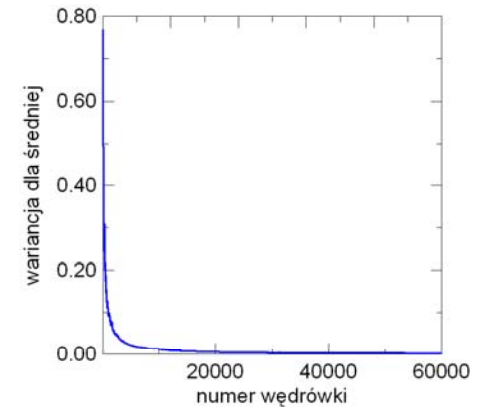
$\langle X \rangle$



$$\langle X_j \rangle = \frac{1}{j} \sum_{i=1}^j X_i$$

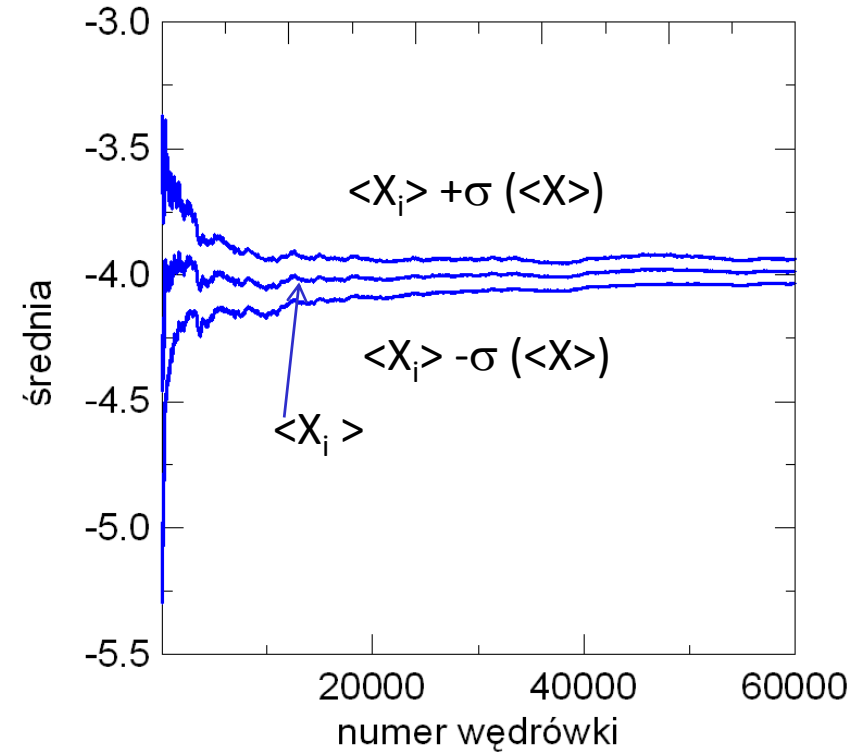
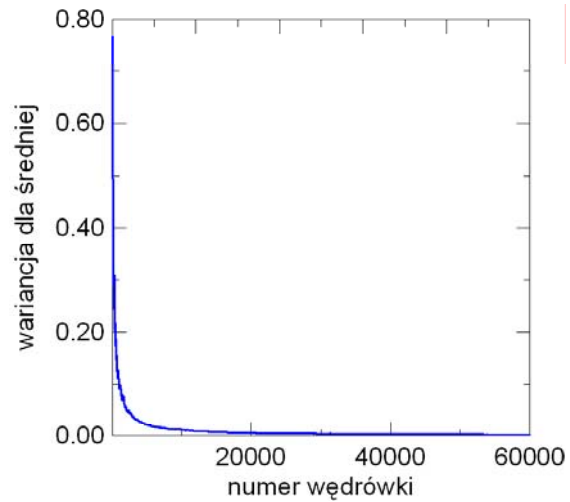
Średnia wyznaczona w  $j$  losowaniach

$$\sigma^2(\langle X \rangle) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\langle X_N \rangle - \langle X_i \rangle)^2 \longrightarrow$$

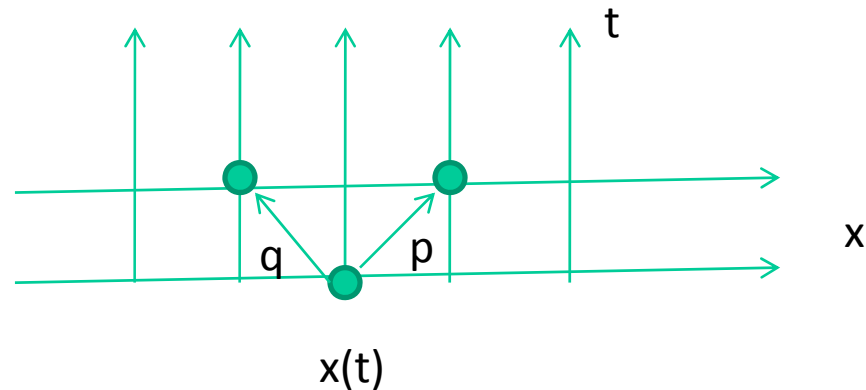


## Szacowanie błędu wyznaczenia średniej

$$\sigma^2(\langle X \rangle) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\langle X_N \rangle - \langle X_i \rangle)^2$$



## Metody MC dla równań cząstkowych



Czas: w jednym kroku zmienia się z  $t$  na  $t+1$

W czasie zmiany cząstka (wędrowiec) z pstwem  $p$  przechodzi do prawego oczka siatki przestrzennej  $x(t+1)=x(t)+1$   
a z pstwem  $q=1-p$  przechodzi do oczka lewego  $x(t+1)=x(t)-1$

Ruch zaczyna się w chwili czasowej  $t=0$  i w punkcie  $x=0$ .

Prawdopodobieństwo tego, że w chwili czasowej  $t$  cząstka jest w punkcie  $x$ :  $v(x,t)$   
 $v(x=0,t=0)=1$ ,  $v(x,t=0)=0$  dla  $x \neq 0$

Zgodnie z regulaminem błędzenia:  $v(x,t+1)=p v(x-1,t)+q v(x+1,t)$

Zgodnie z regulaminem błędzenia:  $v(x, t+1) = p v(x-1, t) + q v(x+1, t)$

W powyższym wzorze  $t$  oraz  $x$  to indeksy punktów

Dla siatki o krokach  $\Delta x$  i  $\Delta t$  pstwo w funkcji położzeń:

$$v(x, t + \Delta t) = p v(x - \Delta x, t) + q v(x + \Delta x, t)$$

Rozwijamy  $v$  z powyższego wzoru w szeregu Taylora.

Zachowujemy 2 pierwsze wyrazy dla lewej strony oraz 3 pierwsze dla strony prawej

$$v(x, t) + \frac{\partial v(x, t)}{\partial t} \Delta t = p v(x, t) - p \frac{\partial v(x, t)}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} p \frac{\partial^2 v(x, t)}{\partial x^2} \Delta x^2 + q v(x, t) + q \frac{\partial v(x, t)}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} q \frac{\partial^2 v(x, t)}{\partial x^2} \Delta x^2$$

$$\frac{\partial v(x, t)}{\partial t} \Delta t = (q - p) \frac{\partial v(x, t)}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 v(x, t)}{\partial x^2} \Delta x^2$$

$$\text{Równanie adwekcji dyfuzji} \quad u_t + V u_x = D u_{xx}$$

$$z \quad \left\{ \begin{array}{l} V = (p - q) \frac{\Delta x}{\Delta t} \\ D = \frac{1}{2} \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \end{array} \right.$$

Błędzenia przypadkowego o ww. regulaminie można więc użyć do oszacowania rozwiązań równania adwekcji dyfuzji

Alternatywne wprowadzenie dla czystej dyfuzji:

$$D \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = \frac{\partial v}{\partial t}$$

Wersja różnicowa (tzw. schemat Eulera)

$$D \frac{v(x + \Delta x, t) + v(x - \Delta x, t) - 2v(x, t)}{\Delta x^2} = \frac{v(x, t + \Delta t) - v(x, t)}{\Delta t}$$

$$v(x, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{2D\Delta t}{\Delta x^2}\right) v(x, t) + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (v(x - \Delta x, t) + v(x + \Delta x, t))$$

Dla danej stałej dyfuzji i kroku siatki przestrzennej dobierzemy krok czasowy tak, aby

$$\frac{2D\Delta t}{\Delta x^2} = 1$$

Wtedy:

$$v(x, t + \Delta t) = \frac{1}{2} (v(x - \Delta x, t) + v(x + \Delta x, t))$$

co odpowiada błędzeniu  
przypadkowemu z  $p=q=1/2$

$$D \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = \frac{\partial v}{\partial t}$$

$$v(x, t + \Delta t) = \frac{1}{2} (v(x - \Delta x, t) + v(x + \Delta x, t))$$

Warunki brzegowe:  $u(0,t)=f(t)$ ,  $u(a,t)=g(t)$

Warunek początkowy:  $u(x,t=0)=h(x)$

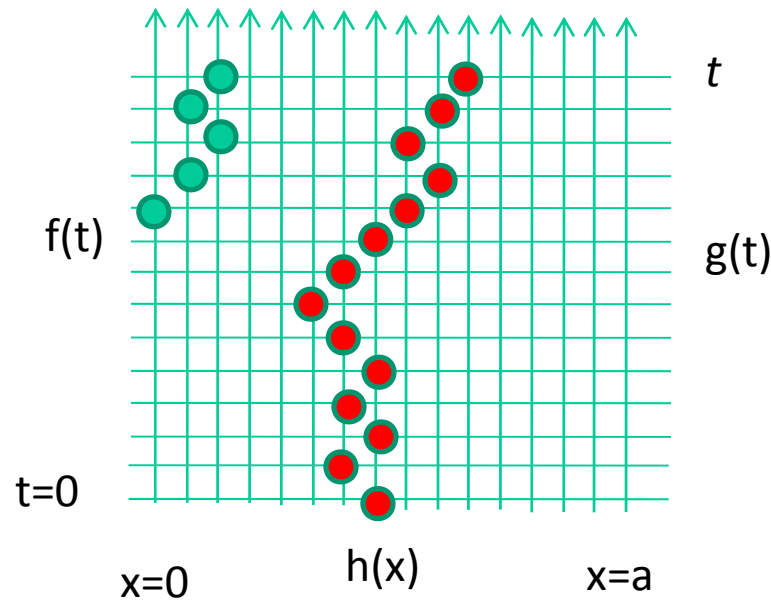
Regulamin:

Startujemy w chwili  $t$

Wędrowiec cofa się w czasie

W każdym kroku czasowym przechodzi do prawego lub lewego sąsiada z pstwem 50%

Wędrowka kończy się, gdy wędrowiec dojdzie do brzegu ( $x=0$  lub  $x=a$ ) z wynikiem  $f(\tau)$  lub  $g(\tau)$  lub gdy dojdzie do chwili początkowej, wtedy wynik wędrowki:  $h(\xi)$  gdzie  $\xi$  oraz  $\tau$  to współrzędne końca wędrowki



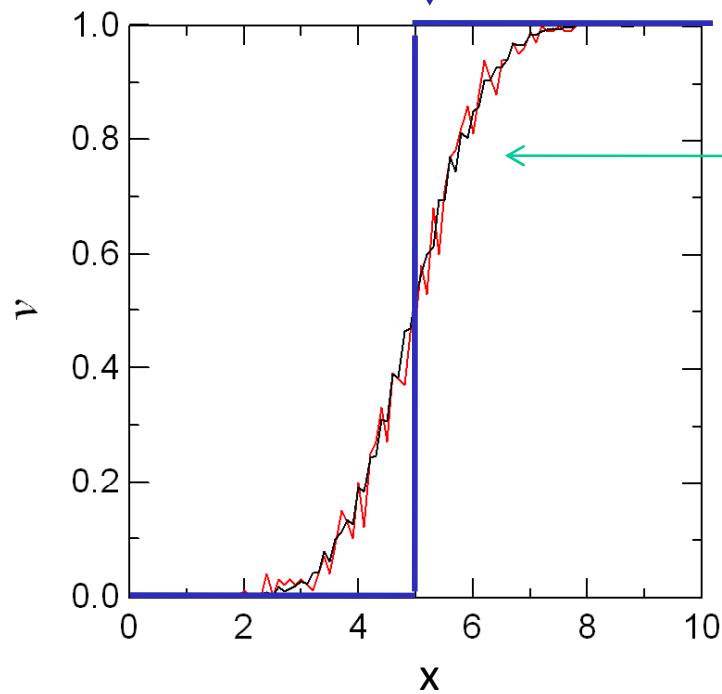


$$D \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = \frac{\partial v}{\partial t} \quad \left| \quad \frac{2D\Delta t}{\Delta x^2} = 1$$

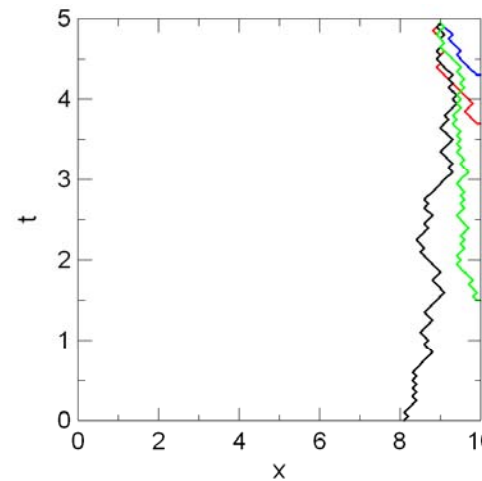
Wyniki:  $a=10$ ;  $\Delta x=0.1$ ,  $D=1 \rightarrow \Delta t=0.05$

$V(x=0,t)=0$ ,  $v(x=a,t)=1$ ,  $v(x,t=0)=1$  dla  $x>5$  oraz 0 dla  $x<5$

Warunek początkowy



Rozwiązania MC dla chwili czasowej  $t=5$   
Uzyskane dla 100 oraz 1000 błędzeń startowanych od każdego punktu



Cztery ścieżki startowane z  $x=8$

Podobnie można rozwiązywać problemy 2D,  
Zmienia się tylko interpretacja kroku czasowego:  $4D\Delta t/\Delta x^2 = 1$

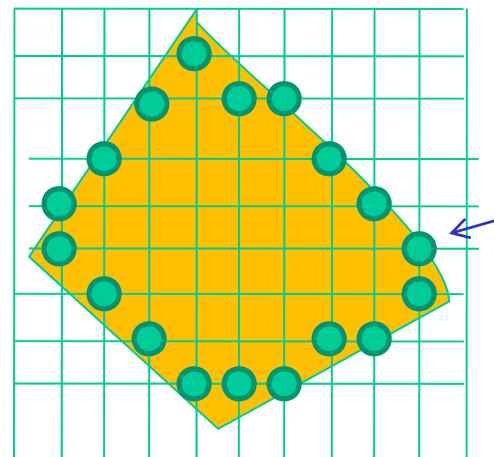
## Równanie Laplace'a: 2D

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

$$u(x, y) = \frac{1}{4} (u(x + \Delta, y) + u(x - \Delta, y) + u(x, y + \Delta) + u(x, y - \Delta))$$

Warunki Dirichleta na brzegu

$$u(x, y) = f(x, y)$$



Punkty należące do  
zdyskretyzowanego  
brzegu

## Równanie Laplace'a: 2D

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

$$u(x, y) = \frac{1}{4} (u(x + \Delta, y) + u(x - \Delta, y) + u(x, y + \Delta) + u(x, y - \Delta))$$

Warunki Dirichleta na brzegu

$$u(x, y) = f(x, y)$$

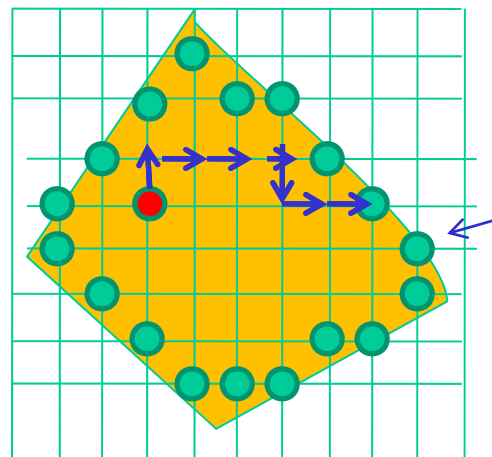
Startujemy od punktu  $(\alpha, \beta)$

Losowo wybieramy krawędź siatki

Idziemy aż do brzegu.

Wynikiem wędrówki jest warunek brzegowy w punkcie kończącym wędrówkę.

Zmienna losowa: wynik wędrówki dla startu w wybranym punkcie.



Punkty należące do zdyskretyzowanego brzegu

## Równanie Laplace'a: 2D

Zmienna losowa: wynik wędrówki dla startu w wybranym punkcie.

Jej wartość oczekiwana

$$E(\alpha, \beta) = \sum_{\Gamma} p_{\alpha, \beta}(x, y) f(x, y)$$

Suma po trajektoriach

$p_{\alpha, \beta}(x, y)$  pstwo zakończenia w punkcie  $(x, y)$   
wędrówki, która startuje z punktu  $(\alpha, \beta)$

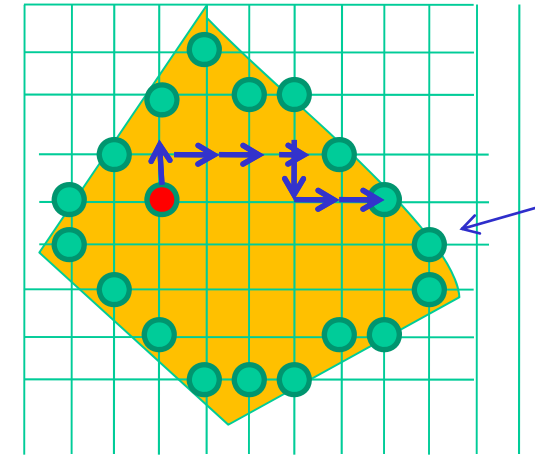
Ze względu na regulamin błędzenia

$$p_{\alpha, \beta}(x, y) = \frac{1}{4} [p_{\alpha-1, \beta}(x, y) + p_{\alpha, \beta-1}(x, y) + p_{\alpha+1, \beta}(x, y) + p_{\alpha, \beta+1}(x, y)]$$

$$E(\alpha, \beta) = \frac{1}{4} [E(\alpha - 1, \beta) + E(\alpha, \beta - 1) + E(\alpha + 1, \beta) + E(\alpha, \beta + 1)]$$

Wartości oczekiwane spełniają to samo równanie co rozwiązanie równania Laplace'a:

$$u(x, y) = \frac{1}{4} (u(x + \Delta, y) + u(x - \Delta, y) + u(x, y + \Delta) + u(x, y - \Delta))$$



## Błądzenie przypadkowe dla równania Laplace'a : oczekiwany czas błędzenia

Całkujemy równanie Laplace'a w k-wymiarowej kuli

$$\sum_{i=1}^k x_i^2 \leq R^2$$

$$\pi_\nu(x_1, x_2, \dots, x_k)$$

Pstwo tego, że cząstka startując od  $(x_1, \dots, x_k)$  dojdzie do brzegu  $\Gamma$  w  $\nu$  krokach

$$\pi_0(x_1, x_2, \dots, x_k) = \begin{cases} 1 & (x_1, x_2, \dots, x_k) \in \Gamma \\ 0 & (x_1, x_2, \dots, x_k) \notin \Gamma \end{cases}$$

$$\pi_\nu(x_1, x_2, \dots, x_k) = \frac{1}{2k} \sum' \pi_{\nu-1}(x'_1, x'_2, \dots, x'_k)$$

Suma po wszystkich  $(2k)$  sąsiadach punktu  $(x_1, \dots, x_k)$

Oczekiwana liczba kroków potrzebnych na dotarcie do brzegu

$$\kappa(x_1, x_2, \dots, x_k) = \sum_{\nu=1}^{\infty} \nu \pi_\nu(x_1, x_2, \dots, x_k)$$

Oczekiwana liczba kroków potrzebnych na dotarcie do brzegu

$$\kappa(x_1, x_2, \dots, x_k) = \sum_{\nu=1}^{\infty} \nu \pi_{\nu}(x_1, x_2, \dots, x_k)$$

$$\pi_{\nu}(x_1, x_2, \dots, x_k) = \frac{1}{2k} \sum' \pi_{\nu-1}(x'_1, x'_2, \dots, x'_k) \quad \left| \right.$$

$$\kappa(x_1, x_2, \dots, x_k) = \frac{1}{2k} \sum_{\nu=1}^{\infty} \nu \sum' \pi_{\nu-1}(x'_1, x'_2, \dots, x'_k)$$

$$\kappa(x_1, x_2, \dots, x_k) = \frac{1}{2k} \sum_{\nu=1}^{\infty} (\nu - 1) \sum' \pi_{\nu-1}(x'_1, x'_2, \dots, x'_k) + \frac{1}{2k} \sum_{\nu=1}^{\infty} \sum' \pi_{\nu-1}(x'_1, x'_2, \dots, x'_k)$$

$$\kappa(x_1, x_2, \dots, x_k) = \frac{1}{2k} \sum' \kappa(x'_1, x'_2, \dots, x'_k) + 1 \quad \left| \right.$$

$\pi_{\nu}$

Co odpowiada różnicowej wersji równania Poissona  
[z warunkiem brzegowym  $\kappa(\Gamma)=0$  ]

$$\nabla^2 \kappa = -2k$$

$$Z \Delta x=1$$

$$\nabla^2 \kappa = -2k \quad [\text{z warunkiem brzegowym } \kappa(\Gamma)=0 ]$$

$$\kappa = \psi - \sum_{i=1}^k x_i^2$$

$$\nabla^2 \psi = 0 \quad [\text{z warunkiem brzegowym } \psi(\Gamma)=R^2 ]$$

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_k) = \sum_i x_i^2$$

Czyli wewnątrz obszaru całkowania oczekiwany czas błędzenia jest nie większy niż  $R^2$  niezależnie od wymiaru przestrzeni (metoda staje się atrakcyjna dla problemów o dużej liczbie wymiarów)

Równanie dyfuzji: wiemy jak je rozwiązywać cofając się w czasie  
 nauczmy się symulować jego rozwiązanie

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \text{z czasem płynącym do przodu}$$

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \quad (*) \quad \text{Jedno z rozwiązań}$$

Dla chwili początkowej  $t_0 = 0$

Rozwiązanie to przechodzi do delty Diraca,  
 Lub inaczej stanowi rozwiązanie dla warunku  
 początkowego w formie  $u(x, t) = \delta(x)$

ewolucja czasowa

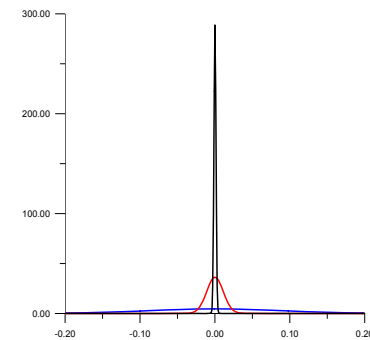
$$\delta(x) \longrightarrow u(x, t)$$

$$a\delta(x) + b\delta(x - x_0) \longrightarrow au(x, t) + bu(x - x_0, t)$$

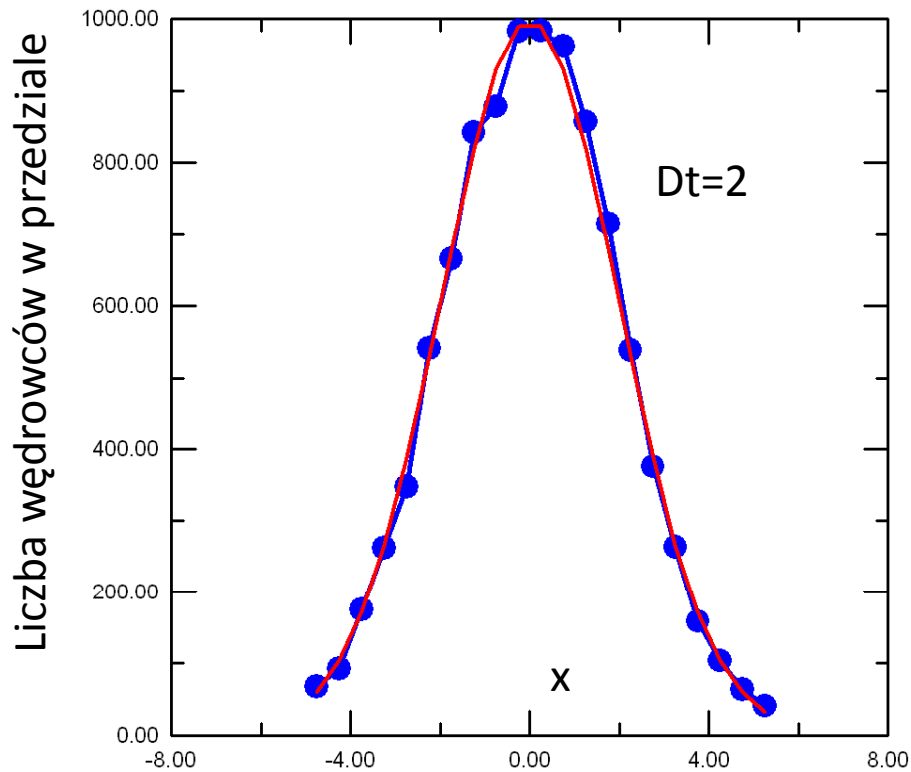
$$f(x) = \int dx_0 f(x_0) \delta(x - x_0) \longrightarrow \int dx_0 f(x_0) u(x - x_0, t)$$

Jeśli będę wiedział jak zasymulować rozwiązanie startując od delty Diraca,  
 będę wiedział jak zasymulować rachunek dla dowolnego warunku początkowego

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \exp(-x^2/a^2)$$







$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

- 1) W punkcie  $x=0$   
wstawiam 10 000 wędrowców
- 2) Dla każdego wędrowca  
dokonuje przesunięcia  
 $x := x + \rho$ ,  
gdzie  $\rho$  jest zmienną losową  
o rozkładzie gaussowskim  
ze średnią  $\mu=0$  w zerze oraz  
wariancji  $\sigma^2 = 2Dt$

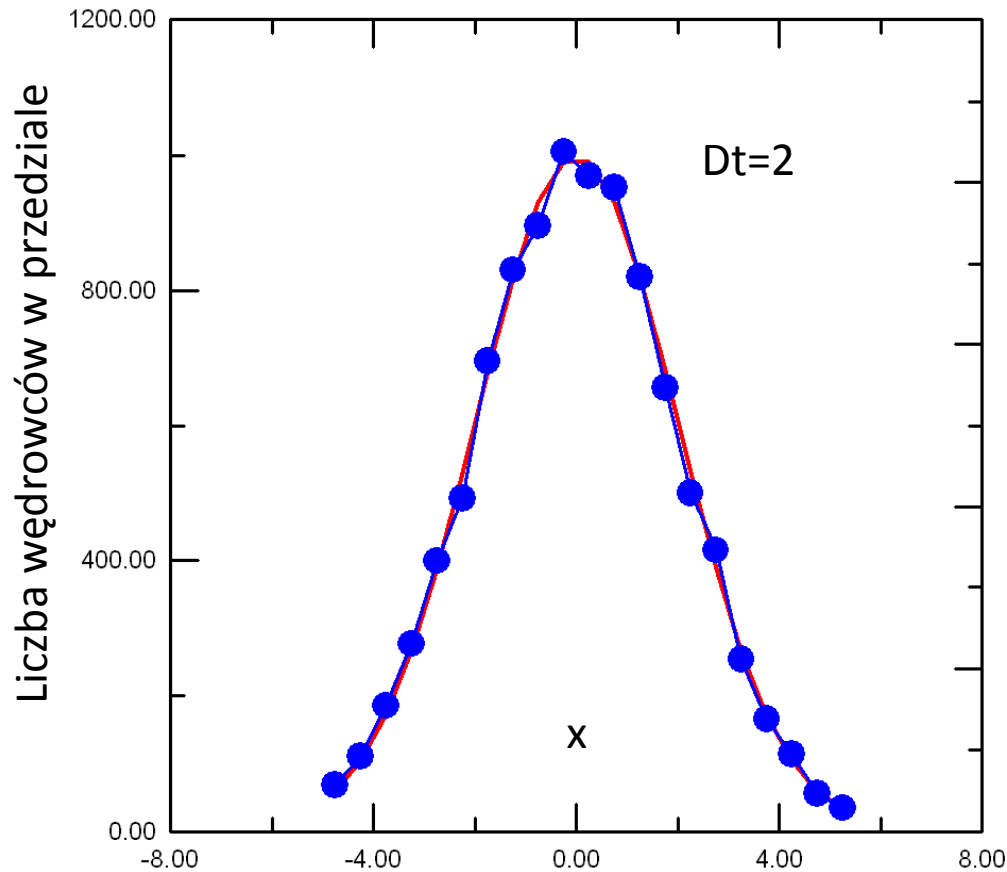
$$\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

Wynik: wprowadzam przedziały o długości 0.5

Rysuję oczekiwaną liczbę wędrowców w każdym przedziale  
oraz wynik eksperymentu

Zamiast 1 kroku z wariancją  $\sigma^2$  :  
10 kroków z wariancją  $\sigma^2 / 10$ ,  
Wynik:

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$



- 1) W punkcie  $x=0$   
wstawiam 10 000 wędrowców
- 2) 10 razy powtarzam operację:  
Dla każdego wędrowca  
dokonuje przesunięcia  
 $x := x + \rho$ ,  
gdzie  $\rho$  jest zmienną losową  
o rozkładzie gaussowskim  
ze średnią  $\mu=0$  w zerze oraz  
wariancji  $\sigma^2 = 2Dt / 10$

Przesunięcie w jednym kroku  
czasowym: normalne ze średnią  
zero oraz wariancją daną  
przez  $\sigma^2 = 2D\Delta t$ .

Wniosek: Symulacja rozwiązania równania dyfuzji MC:

W chwili początkowej wędrowcy rozłożeni zgodnie z warunkiem początkowym  
każdy z nich wykonuje w każdym kroku czasowym losowe przesunięcie zgodne  
z rozkładem normalnym o średniej zero i wariancji  $\sigma^2 = 2D\Delta t$ .

Przesunięcie w jednym kroku czasowym: normalne ze średnią zero oraz wariancją  $\sigma^2 = 2D\Delta t$

$$N(\sigma, \mu) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

$\rho$  – zmienna losowa o rozkładzie normalnym, średniej 0 i wariancji  $\sigma^2$

$\rho_1$  – zmienna losowa o rozkładzie normalnym i wariancji 1

$$x := x + \rho = x + \sigma \rho_1$$

```
function rho1 ()
x1=rand()
x2=rand()
pi=4*atan(1.0)
rho1 = sqrt( - 2.0*log(x1) ) *cos( 2 *pi* x2 )
end
```

Metody MC – stosowane do np. dyfuzji neutronów.

Jakość rozwiązania i czas rachunków nie zależy od liczby wymiarów, dla skomplikowanej geometrii w 3D rachunek może być konkurencyjny do metod tradycyjnych [MRS, MES].

W MC nie musimy budować żadnej siatki przestrzennej.

W rachunkach wielowymiarowych metody MC uważane są za niezastąpione.

Problemy wielowymiarowe, generowane w mechanice kwantowej.

Przykład: półprzewodnik, 3 nośniki dziura + 2 elektrony (trion ekscytonowy) układ 12 (!) wymiarowy.

Metody MC – jedyny sposób zbliżenia się do rozwiązania dokładnego.

## Równanie Schroedingera zależne od czasu

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$$

Operator Hamiltona w najprostszej wersji: 
$$H\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(\mathbf{r})\Psi$$

$$n(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$$
 Gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w chwili  $t$  i w punkcie  $\mathbf{r}$

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

BTW: rozwiązanie równania dyfuzji

dla warunku początkowego  $u(x, t) = \delta(x)$

rozwiązanie można interpretować, jako gęstość prawdopodobieństwa znalezienia w chwili  $t$  i w punkcie  $x$  cząstki, która w chwili  $t=0$  była w początku układu współrzędnych

## Równanie Schroedingera zależne od czasu

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$$

$$H\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(\mathbf{r})\Psi$$

$\tau = -it$       Wstawmy czas urojony (rotacja Wicka)

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial \tau}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \tau}$$

$$\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - \underline{V(x)\Psi(x)}$$

równanie dyfuzji

ze źródłami (odpływami) cząstek  
źródło nietypowe – bo zależne od rozwiązania  $\Psi$   
[dla dyfuzji ciepła, w najprostszej wersji wprowadza się źródła niezależne od rozwiązania – tj. temperatury]

## Równanie Schroedingera zależne od czasu

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$$

H jest liniowy, rozwiązanie można więc wskazać jako superpozycję stanów własnych

$$H\phi_n = E_n\phi_n$$

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \phi_n(x) \exp(-iE_n t/\hbar) \quad c_n \text{ nie zależy od czasu}$$

$$\tau = -it$$

$$\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - V(x)\Psi(x)$$

$$\Psi(x, \tau) = \sum_n c_n \phi_n(x) \exp(-E_n \tau/\hbar) \leftarrow \begin{array}{l} \text{Składowe gasną tym szybciej im wyższa} \\ \text{jest ich energia, najwolniej gaśnie składowa } E_0 \end{array}$$

zmiana poziomu odniesienia dla energii  $V(x) := V(x) - E_R$ ,  $E_n := E_n - E_R$

$$\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - (V(x) - E_R)\Psi(x)$$

$$\Psi(x, \tau) = \sum_n c_n \phi_n(x) \exp(-(E_n - E_R)\tau/\hbar) \leftarrow$$

Składowe gasną tym szybciej im wyższa jest ich energia, o losie symulacji decyduje ustawienie punktu odniesienia względem energii stanu podstawowego

- 1) Jeśli  $E_0 < E_R$  Funkcja falowa eksploduje w funkcji  $\tau$
- 2) Jeśli  $E_0 > E_R$  Funkcja falowa znika w funkcji  $\tau$
- 3) Jeśli  $E_0 = E_R$  Funkcja falowa dąży do  $c_0 \phi_0$  (funkcji falowej stanu podstawowego)

$$\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - (V(x) - E_R) \Psi(x)$$

$$\Psi(x, \tau) = \sum_n c_n \phi_n(x) \exp(-(E_n - E_R)\tau/\hbar)$$

Składowe gasną tym szybciej im wyższa jest ich energia

- 1) Jeśli  $E_0 < E_R$  Funkcja falowa eksploduje w funkcji  $\tau$
- 2) Jeśli  $E_0 > E_R$  Funkcja falowa znika w funkcji  $\tau$
- 3) Jeśli  $E_0 = E_R$  Funkcja falowa dąży do  $c_0 \phi_0$  (funkcji falowej stanu podstawowego)

Wniosek: dla odpowiednio dobranego poziomu odniesienia funkcja falowa w czasie urojonym dąży do funkcji falowej stanu podstawowego niezależnie od warunku początkowego [o ile tylko całka przekrywania  $\langle \Psi(x,0) | \phi_0(x) \rangle = c_0$  nie znika].

Kwantowa dyfuzyjna metoda MC – do wyznaczenia funkcji falowej stanu podstawowego  
Kluczowy = dobór  $E_R$  oraz opis generacji / zaniku wędrowców

### Algorytm:

- 1) Umieścić  $N$  wędrowców gdziekolwiek, np. wszystkich w początku układu współrzędnych
- 2) Każdy z wędrowców jest przesuwany, o losową wartość zgodną z równaniem dyfuzji, to jest  $x := x + \sigma \rho_1$  gdzie wariancja

$$\sigma^2 = \frac{\hbar^2}{m} \Delta \tau$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

- 3) Replikacja wędrowców

$$\sigma^2 = 2D\Delta t$$

### 3) Replikacja wędrówców

$$\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - (V(x) - E_R) \Psi(x)$$

Dla zaniedbanej części dyfuzyjnej mamy w każdym punkcie  $x$ :

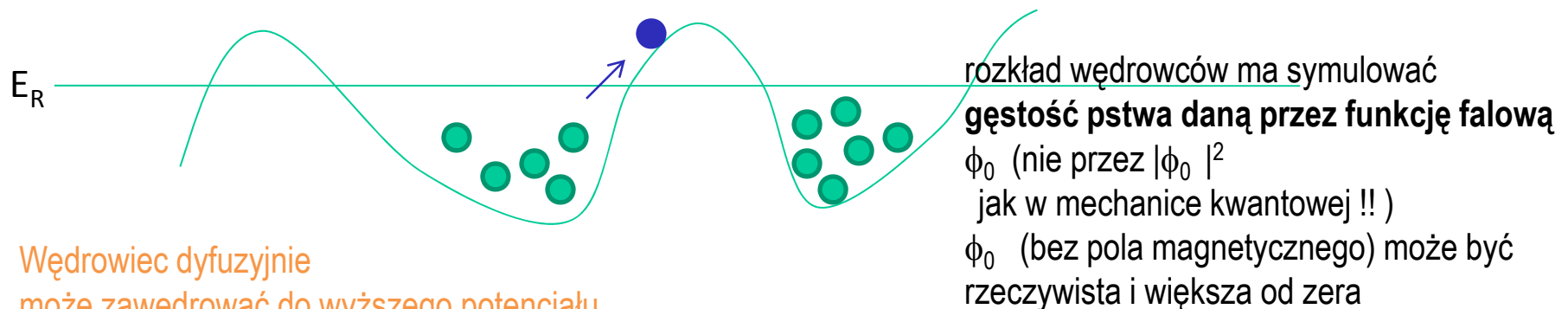
$$\Psi(x, \tau) = \Psi(x, \tau = 0) \exp [(E_R - V(x))\tau / \hbar]$$

$W(x)$

$$W(x) \simeq 1 + \frac{E_R - V(x)}{\hbar} d\tau$$

W oryginalnej metodzie wędrowiec znajdujący się w punkcie  $x$  jest rozmnażany  $n$  razy, gdzie  $n$  jest liczbą całkowitą najbliższą  $W(x)$

Co się będzie działo: wędrowiec ginie na wierzchołkach potencjału wznoszących się ponad poziom odniesienia, a mnoży się w dolinach.



Wędrowiec dyfuzyjnie może zawędrować do wyższego potencjału, Lecz gdy wyjdzie zbyt wysoko - zginie



### 3) Replikacja wędrowców

$$\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - (V(x) - E_R) \Psi(x)$$

Dla zaniedbanej części dyfuzyjnej mamy w każdym punkcie  $x$ :

$$\Psi(x, \tau) = \Psi(x, \tau = 0) \exp \left[ \frac{(E_R - V(x))\tau}{\hbar} \right]$$

$W(x)$

$$W(x) \simeq 1 + \frac{E_R - V(x)}{\hbar} d\tau$$

W oryginalnej metodzie wędrowiec  $n$  znajdujący się w punkcie  $x$  jest rozmnażany  $m_n$  razy, gdzie  $m$  jest liczbą całkowitą najbliższą  $W(x_n)$

-Takie grozi nagłą eksplozją liczby wędrowców, gdy jeden z nich wdepnie w głęboki dołek. Na początku symulacji, gdy oszacowanie  $E_R$  jest zgrubne może to prowadzić do niestabilności symulacji,

dlatego lepiej:

$m_n = \min\{\text{int}(W(x_n) + \text{rand}()), 3\}$ , gdzie  $\text{rand}()$  – liczba losowa z przedziału  $[0, 1]$  (rozkład jednorodny)

gdy krok czasu urojonego  $d\tau$  jest mały: wtedy  $W$  oscyluje wokół 1 i rzadko przekracza 2, wtedy ograniczenie  $m_n$  przez 3 generuje mały błąd

Jeśli  $m_n$  wyjdzie zero – likwidujemy wędrowca, jeśli  $m_n$  wyjdzie 3 – startujemy dwie nowe ścieżki błędzenia dyfuzyjnego od punktu  $x$

### Algorytm:

- 1) Umieścić  $N$  wędrówców gdziekolwiek, np. wszystkich w początku układu współrzędnych
- 2) Każdy z wędrówców jest przesuwany, o losową wartość zgodną z równaniem dyfuzji, to jest  $x := x + \sigma \rho_1$  gdzie wariancja
- 3) Replikacja wędrówców  $W(x) \simeq 1 + \frac{E_R - V(x)}{\hbar} d\tau$   $m_n = \min\{\text{int}(W(x_n) + \text{rand}()), 3\}$
- 4) Adaptacja poziomu odniesienia  $E_R$

Składowe gasną tym szybciej im wyższa jest ich energia

- 1) Jeśli  $E_0 < E_R$  Funkcja falowa eksploduje w funkcji  $t$
- 2) Jeśli  $E_0 > E_R$  Funkcja falowa znika w funkcji  $t$
- 3) Jeśli  $E_0 = E_R$  Funkcja falowa dąży do  $c_0 f_0$   
(funkcji falowej stanu podstawowego)

Dobre  $E_R$  będzie oszacowaniem energii stanu podstawowego, ma być takie aby funkcja falowa się nie zmieniała

...

Chcemy więc aby liczba wędrówców się nie zmieniała, więc

Średnie  $W$  powinno być jeden  $W(x) \simeq 1 + \frac{E_R - V(x)}{\hbar} d\tau$

Czyli: 
$$E_R = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V(x_i)$$

### Algorytm:

- 1) Umieścić  $N$  wędrówców gdziekolwiek, np. wszystkich w początku układu współrzędnych
- 2) Każdy z wędrówców jest przesuwany, o losową wartość zgodną z równaniem dyfuzji, to jest  $x := x + \sigma \rho_1$  gdzie wariancja
- 3) Replikacja wędrówców  $W(x) \simeq 1 + \frac{E_R - V(x)}{\hbar} d\tau$   $m_n = \min\{\text{int}(W(x_n)) + \text{rand}(), 3\}$
- 4) Adaptacja poziomu odniesienia  $E_R$

$$E_R = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V(x_i)$$

Chcielibyśmy utrzymać stałą liczbę wędrówców w czasie symulacji.

Po replikacji mamy  $N=N_i$  wędrówców, a chcemy ich liczbę utrzymać na poziomie  $N_0$  empiryczna i skuteczna w tym celu modyfikacja poziomu odniesienia:

$$E'_R = E_R + \frac{\hbar}{\Delta\tau} \left(1 - \frac{N_i}{N_0}\right)$$

Uwaga! Pojawiają się dwa progi  $E_R$

Energię stanu początkowego szacujemy na podstawie  $E_R$

$E'_R$  używane do wyliczenia  $W$

Uwaga:  $E_R$  warto uśredniać nie tylko po obecnej iteracji, ale również po krokach poprzednich (z pominięciem pewnej liczby kroków początkowych)

Przykład: atom wodoru (3D)

$$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r}$$

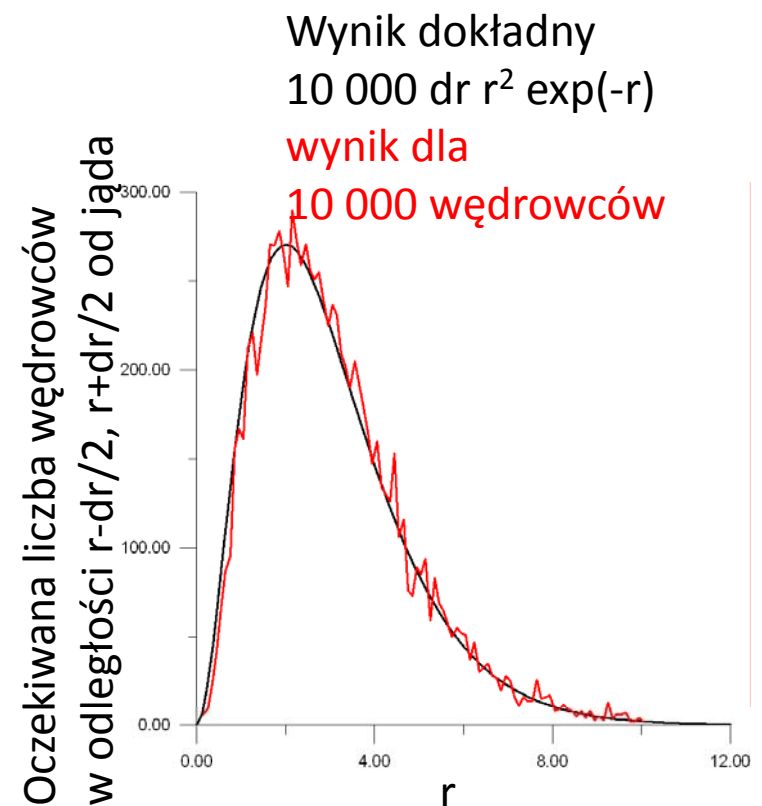
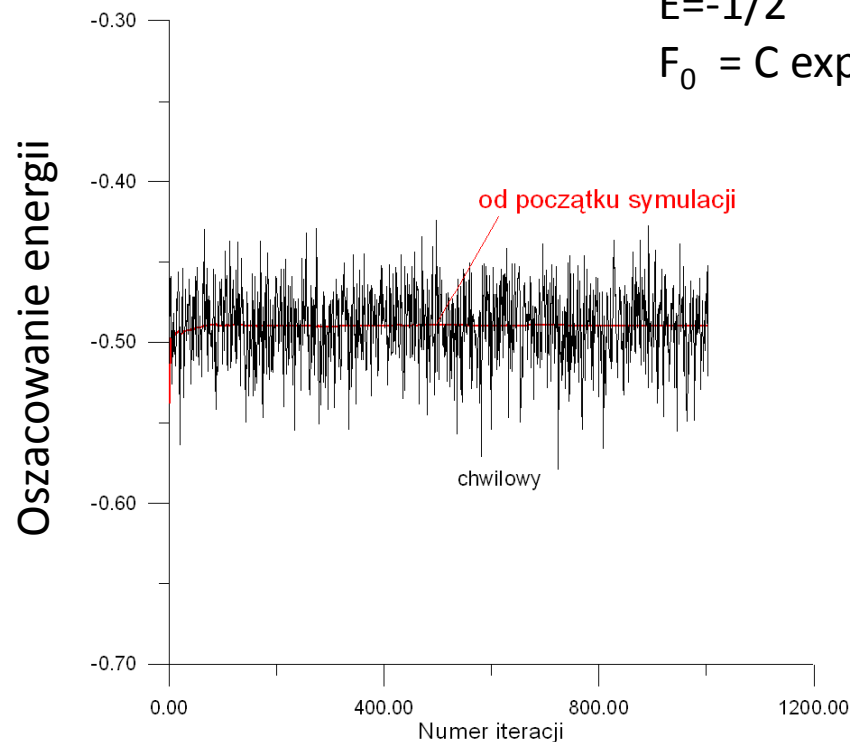
1000 wędrówców, ich położenia startują od  $r=(1,1,1)$

krok czasu urojonego  $d\tau=0.1$

$$\sigma^2 = d\tau$$

$$E = -1/2$$

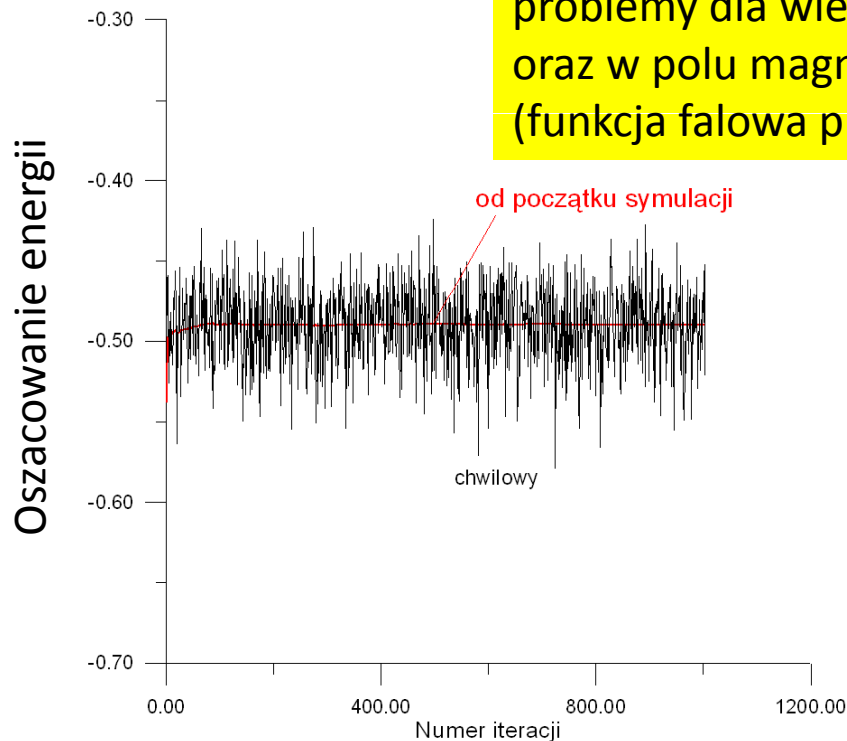
$$F_0 = C \exp(-r)$$



Przykład: atom wodo

$$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r}$$

1000 wędrówców, ich p  
krok czasu urojonego  $d$   
 $\sigma^2 = d\tau$

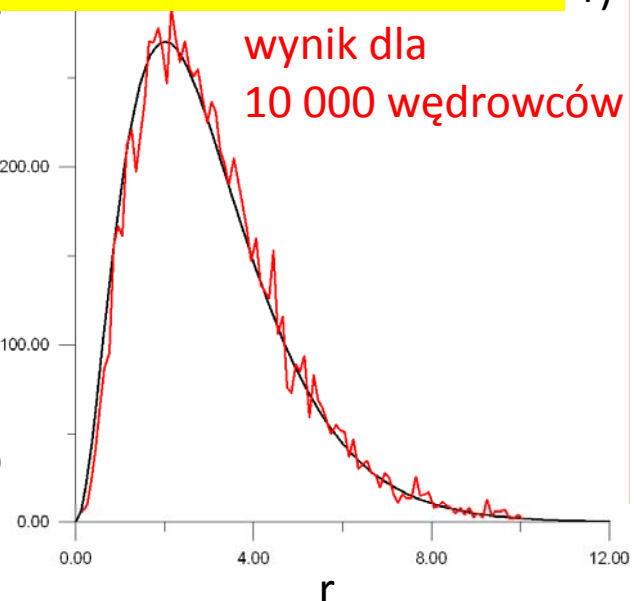


**Uwaga: gęstość wędrówców jest proporcjonalna do funkcji falowej (rzeczywistej, dodatniej), a nie do gęstości prawdopodobieństwa (f.falowa<sup>2</sup>)**

Kwantowa Metoda MC w tej formie: stosowana tylko dla stanu podstawowego nie więcej niż dwóch identycznych fermionów

Istnieją jednak warianty pozwalające rozwiązywać problemy dla wielu fermionów oraz w polu magnetycznym (funkcja falowa przestaje być rzeczywista)

Oczekiwana liczba wędrówców w odległości  $r-dr/2, r+dr/2$  od



2 elektrony + dziura : 12 wymiarów

Po separacji ruchu środka masy: 9 wymiarów (możliwa dalsza redukcja do 6

Dla określonego momentu pędu)

Przykład dla trionu w studni kwantowej:

12 456

B. STĚBĚ *et al.*

56

$$\begin{aligned}
 H = & -\partial_{z_1}^2 - \partial_{z_2}^2 - \frac{2}{s^2 - t^2} (s\partial_s - t\partial_t) - \partial_u^2 - \frac{1}{u}\partial_u - \frac{2s(u^2 - t^2)}{u(s^2 - t^2)}\partial_{su} - \frac{2t(s^2 - u^2)}{u(s^2 - t^2)}\partial_{tu} - \frac{1}{2}(\partial_{z_1}^2 + \partial_{z_2}^2) - 2\sigma\left(\frac{s^2 - u^2}{s^2 - t^2}\partial_{s^2}\right. \\
 & \left. + \frac{u^2 - t^2}{s^2 - t^2}\partial_{t^2} + \frac{s}{s^2 - t^2}\partial_s - \frac{t}{s^2 - t^2}\partial_t + \frac{1}{4}\partial_{z_h}^2\right) - \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{s+t}{2}\right)^2 + (z_1^2 - z_h^2)}} - \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{s-t}{2}\right)^2 + (z_2^2 - z_h^2)}} + \frac{1}{\sqrt{u^2 + (z_1^2 - z_2^2)}} \\
 & + V_w^e(z_1) + V_w^e(z_2) + V_w^h(z_h), \tag{12}
 \end{aligned}$$

$$\psi(s, t, u, z_1, z_2, z_h) = \sum_{lmnpqr} c_{lmnpqr} \chi_{lmnpqr}, \quad \text{Wybór bazy wariacyjnej}$$

$$\theta_{pqr}(z_1, z_2, z_h) = f_e(z_1) f_e(z_2) f_h(z_h) [a_p(z_1) a_q(z_2) + a_q(z_1) a_p(z_2)] b_r(z_h),$$

$$\chi_{lmnpqr} \equiv \phi_{lmn}(s, t, u) \theta_{pqr}(z_1, z_2, z_h).$$

$$\phi_{lmn}(s, t, u) = e^{-k(s/2)} s^l u^m t^n$$

$$f_e(z) = \begin{cases} A_e \cos(\sqrt{2E_e}z) & \text{if } |z| \leq \frac{L}{2} \\ B_e \exp[-\sqrt{2(V_e - E_e)}|z|] & \text{if } |z| > \frac{L}{2}, \end{cases}$$

+ liczenie elementów macierzowych

QMC: i współczesna moc obliczeniowa – problem rozwiążemy przy pomocy programu nie dłuższego niż 100 linii

$$\begin{cases} \dots & \text{if } |z| \leq \frac{L}{2} \\ \dots & \text{if } |z| > \frac{L}{2}, \end{cases}$$

