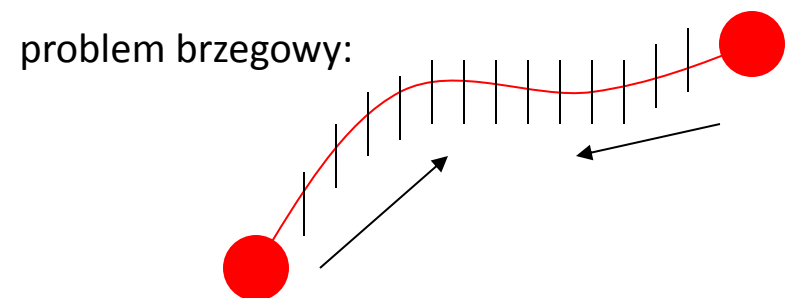
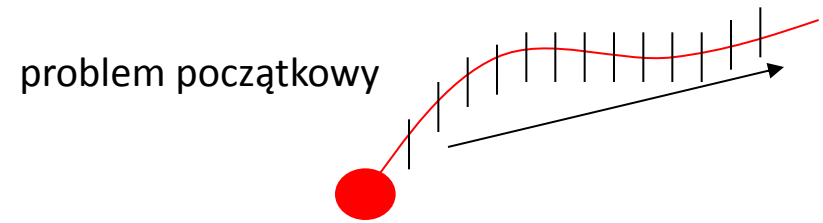


Równania różniczkowe zwyczajne: problem brzegowy [1D]

- 1) Równania różniczkowe **zwyczajne** jako szczególny przypadek problemów opisywanych przez eliptyczne równania cząstkowe
- 2) Problem brzegowy a problem początkowy (*case study*)
- 3) Metoda różnic skończonych (idea, rozwinięcie później)
- 4) Metoda Numerowa
- 5) Metoda strzałów



mówiliśmy, o równaniach różniczkowych zwyczajnych opisujących wielkości dane funkcjami **wyłącznie czasu**, z warunkiem początkowym.

$$u(t = 0) = u_0$$
$$\frac{du(t)}{dt} = f(t, u)$$

Rozwiązaniem równań różniczkowych cząstkowych są zazwyczaj funkcje zarówno **czasu i położenia** (pole elektryczne, rozkładu temperatury, prędkości przepływu itp.)

modelowe równania przy jednym wymiarze przestrzennym $u(x,t)$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \text{dyfuzji (paraboliczne)}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \text{falowe (hiperboliczne)}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x) \quad \text{Poissona (eliptyczne)}$$

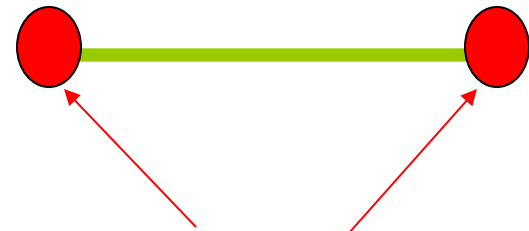
$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x)$$

eliptyczne niezależne od czasu:
 $u = u(x)$ – wyłącznie funkcja położenia
 stany ustalone, równowagowe itp.

równania elektrostatyki, ustalony transport ciepła,
 przepływy cieczy w stanie ustalonym, etc.

Problem brzegowy: równanie różniczkowe (na razie zwyczajne) + warunek na rozwiązanie na brzegu.

~~$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + S(x)$$~~



Brzeg w 1D: 2 punkty

warunki brzegowe w 1D:

na początku ($x=0$) i końcu pudła obliczeniowego ($x=L$)

- 1) na wartość funkcji (Dirichleta) $u(0)=a, u(L)=b$
- 2) na pochodną funkcji (Neumanna) $u'(0)=a, u'(L)=b$
- 3) mieszane (Robina) $u(0)+cu'(0)=a, u(L)+du'(L)=b$

opis jednowymiarowy problemów wielowymiarowych

Przykład nr 1)

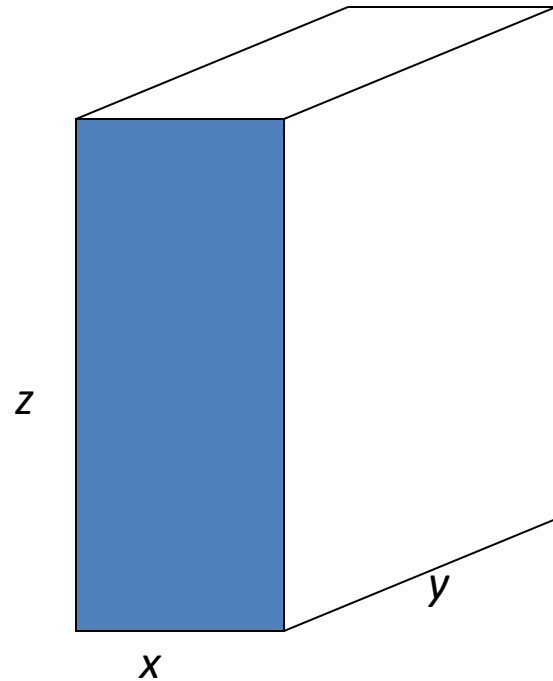
$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = -4\pi\rho(x)$$

równanie Poissona (jednostki atomowe),
gęstość ładunku zależna tylko od x
*albo rozkład temperatury w jednorodnej
sztabce ze źródłami ciepła
w kąpielii cieplnej*

układ jednorodny i rozległy
w (y,z)

+ warunki brzegowe niezależne
od y i z [płaski kondensator]

interesuje nas rozkład potencjału w środku
układu



$$u(x, y, z) = u(x) \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = -4\pi\rho(x)$$

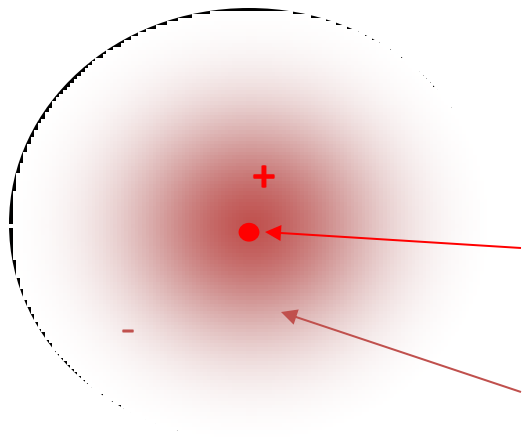
warunki brzegowe: Dirichleta: wartość potencjału (temperatury)

: Neumana: wartość pola elektrycznego (strumienia ciepła)

P2:

problem o wysokiej sferycznej symetrii

r-odległość od początku układu wsp.



atom wodoru: obiekt sferyczny 3D **jądro** + **elektron**

gęstość ładunku jądra: $\rho(r)=+\delta^3(r)$ (jednostki atomowe)

gęstość ładunku elektronowego zależy tylko od odległości od jądra: $n(r)=-\exp(-2r)/\pi$.

$$\nabla^2 \phi_t = -4\pi(p(r) + n(r))$$

$$\int d^3r p(r) = - \int d^3r n(r) = 1$$

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi_t$$

równanie jest liniowe

$$\nabla^2 \phi_+ = -4\pi p(r)$$

$$\nabla^2 \phi = -4\pi n(r)$$

zasada superpozycji:

$$\phi_t = \phi + \phi_+$$

$$\nabla^2 \phi_+ = -4\pi p(r)$$

laplasjan we współrzędnych sferycznych

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin^2(\phi)} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan(\phi)} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

$$\phi_+ = \phi_+(r)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\phi_+}{dr} \right) = -4\pi \delta^3(r)$$

„punktowy ładunek
o nieskończonej gęstości w $r=0$ ”

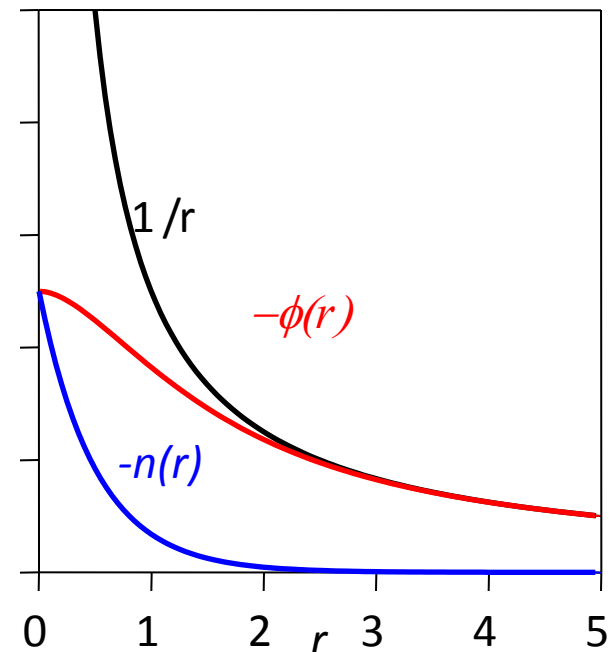
$$\phi_+ = 1/r$$

składowa od gęstości
elektronowej

$$n(r) = -\exp(-2r)/\pi.$$

$$\nabla^2 \phi = -4\pi n(r)$$

$$\phi = -\frac{1}{r} + \frac{(r+1)\exp(-2r)}{r}$$

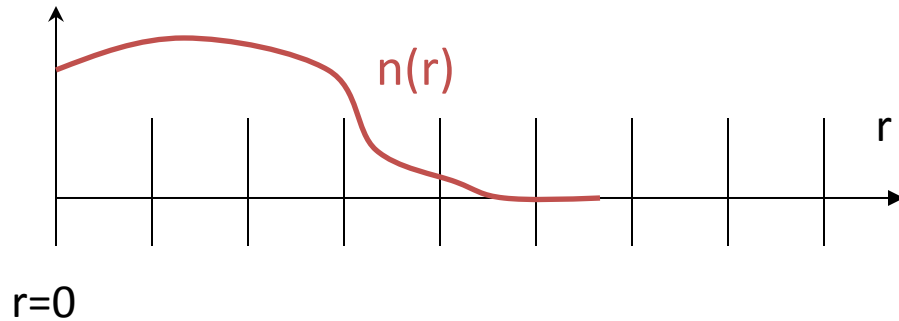


$$\nabla^2 \phi = -4\pi n(r) \quad n(r) = -\exp(-2r)/\pi.$$

$$\phi = -\frac{1}{r} + \frac{(r+1)\exp(-2r)}{r}$$

gdy $n(r)$ nieznanie w postaci analitycznej – pozostaje rachunek numeryczny

numeryczny rachunek ϕ dla rozciągłej gęstości ładunku o symetrii sferycznej n :



$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\phi}{dr} \right) = -4\pi n$$

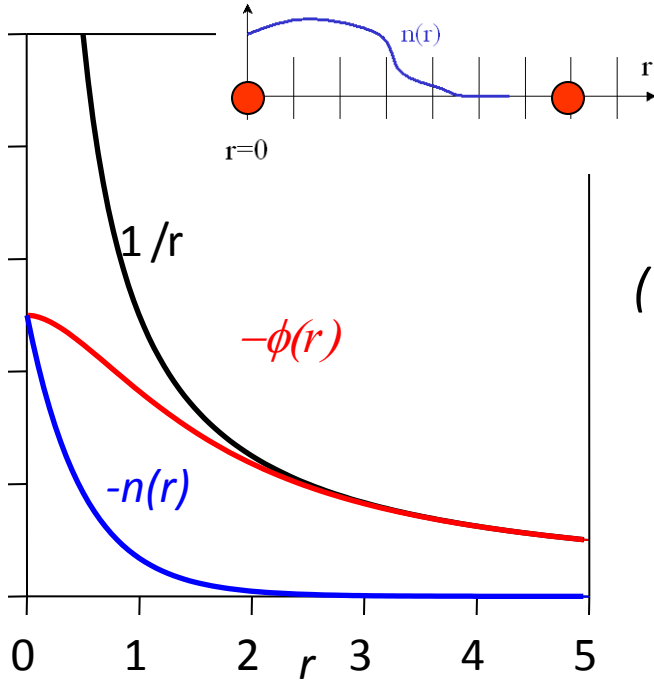
zdyskretyzować równanie – zamiast wartości dla ciągłych r – wartości dyskretne

Zamiast pochodnych ilorazy różnicowe

zamiast równania różniczkowego - algebraiczny **układ** równań

potrzebne **warunki brzegowe** na potencjał ϕ (dla $r=0$ oraz dla „dużego” r)
 - cała sztuka w rozwiązywaniu problemów brzegowych to dobór odpowiednich w.b.
 i skuteczne ich wprowadzenie do równania

tw. Gaussa



$$\oint dS \mathbf{E} = \int dV \nabla \cdot \mathbf{E} = - \int dV \nabla^2 \phi$$

$\mathbf{E} = -\nabla \phi$

$\nabla^2 \phi = -4\pi n(r)$

r. Poissona

jakobian

$$(*) \quad 4\pi R^2 E = 4\pi \int_0^R r^2 n(r) dr \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) \int_0^{2\pi} d\phi$$

duże R – całka potrójna dąży jedynki (z normalizacji n)

duże R : $E(R)=1/R^2$, $\phi = -1/R$

gdy powierzchnia pudła obliczeniowego obejmuje cały ładunek – potencjał – jak dla punktowego ładunku

gdy rozkład gęstości rozciągnięty:

2) potencjał skończony dla $r=0$ (zamiast osobliwości $1/r$)

3) jego pochodna znika w $r=0$ [$E=zero$ dla małego r – patrz drugie równanie (*)]

WB: dla dużego r :	$\phi(r)=1/r$	(Dirichlet)
dla małego r :	$d\phi(r)/dr=0$	(Neumann)

WB Neumanna – trudniejszy w zastosowaniu, chcemy go przekształcić w warunek Dirichleta

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) = -4\pi n(r)$$

$$\phi(r) = \frac{f(r)}{r} \longrightarrow \frac{d^2 f}{dr^2} = -4\pi r n$$

warunki brzegowe na f

$f(0)=0$ bo $\phi(0)$ skończone, $f(r=\text{duże})=-1$ bo $\phi(r=\text{duże})=-1/r$.

spróbujmy ten problem rozwiązać numerycznie

$$\frac{d^2 f}{dr^2} = -4\pi r n \quad + f(0)=0, f(R)=-1, \text{ gdzie } R \text{ promień pudła obliczeniowego | obejmujący całe } n$$

Iloraz różnicowy drugiej pochodnej

$$u(x + \Delta x) = u(x) + \Delta x \frac{du}{dx} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{\Delta x^3}{6} \frac{d^3 u}{dx^3} + O(\Delta x^4) \quad (1)$$

$$u(x - \Delta x) = u(x) - \Delta x \frac{du}{dx} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{d^2 u}{dx^2} - \frac{\Delta x^3}{6} \frac{d^3 u}{dx^3} + O(\Delta x^4) \quad (2)$$

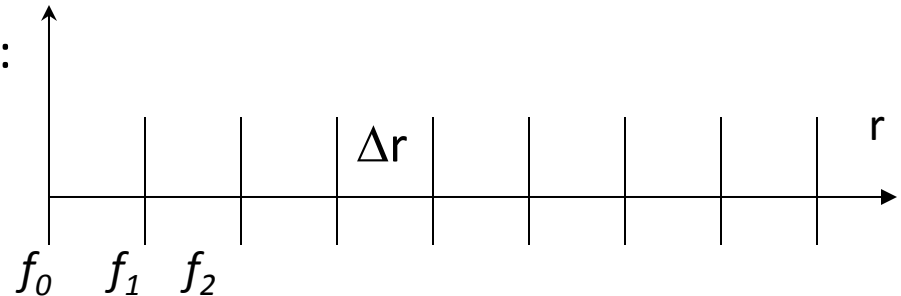
(1) plus (2) trójpunktowy iloraz drugiej pochodnej

$$\frac{d^2 u}{dx^2} = \frac{u(x + \Delta x) - 2u(x) + u(x - \Delta x)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

do rozwiązania problem algebraiczny:

$$f_0=0, f_N=-1$$

$$\frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta r^2} = -4\pi r_i n_i$$



$$f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1} = -4\pi\Delta r^2 r_i n_i$$

$$f_0=0, f_N=-1$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ & & & \dots & & & & \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ \dots \\ f_{N-3} \\ f_{N-2} \\ f_{N-1} \\ f_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -4\pi\Delta r^2 r_1 n_1 \\ -4\pi\Delta r^2 r_2 n_2 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ -4\pi\Delta r^2 r_{N-1} n_{N-1} \\ -1 \end{pmatrix}$$

Układ równań liniowych rozwiązać i po sprawie.

ale: dokładność rachunku ograniczona dokładnością ilorazu różnicowego drugiej pochodnej

poznaliśmy świetne metody do rozwiązania problemu początkowego

może je spróbować zastosować?

$$f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1} = -4\pi\Delta r^2 r_i n_i$$

alternatywa:

ustawmy ten wzór jak dla problemu początkowego
(jak liniową metodę wielokrokową):

$$f_{i+1} = 2f_i - f_{i-1} - 4\pi\Delta r^2 r_i n_i$$

nasz problem początkowy - drugiego rzędu
dla warunku początkowego: potrzebna funkcja+pochodna
tzn. f_0 i f_1

Powiedzmy, że znamy

1) f_0 [bo znamy]

2) f_1 [to powiedzmy]

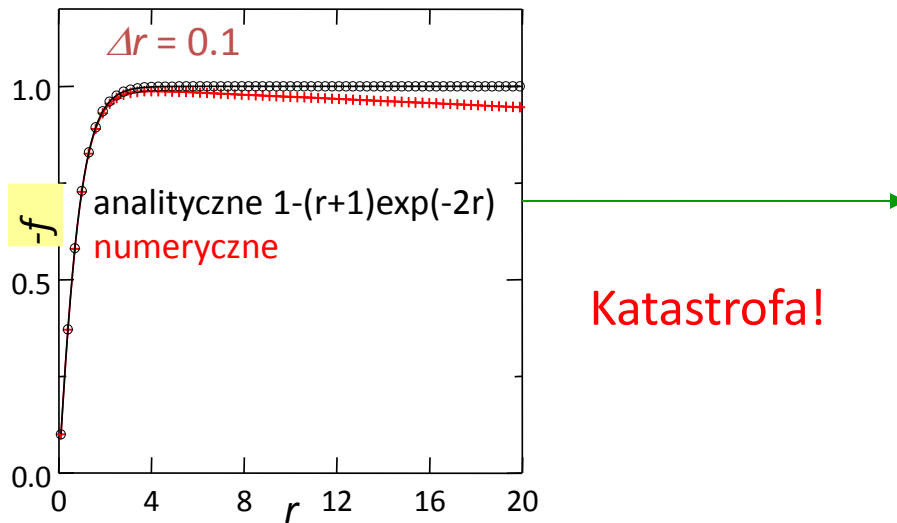
możemy wyliczyć f_2 i następne.

następnie: sprawdzimy, czy f_N spełni WB na prawym końcu.

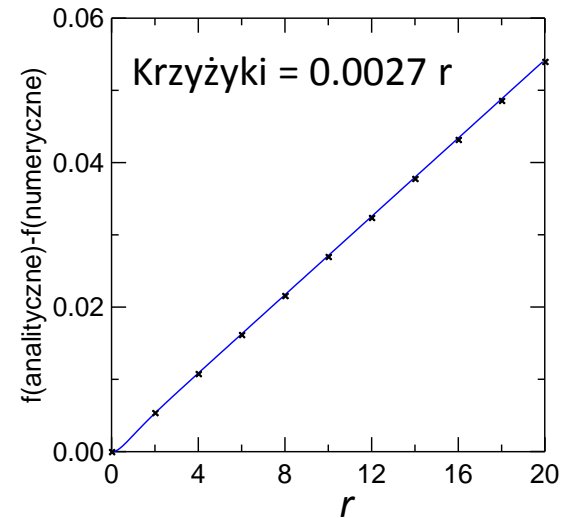
Jeśli tak – problem rozwiązany

$$f_{i+1} = 2f_i - f_{i-1} - 4\pi\Delta r^2 r_i n_i$$

znamy f_0 i f_1 wstawiamy analityczne, liczymy f_2 i następne.



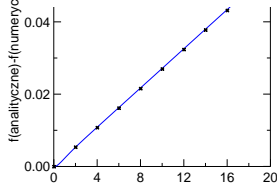
Katastrofa!



(WB na prawym końcu nie spełniony:
rachunek numeryczny łamie prawo Gaussa
potencjał daleko od źródła nie będzie $-1/r$)

Błąd okazuje się liniowy
z r !

$$\frac{d^2 f}{dr^2} = -4\pi r n$$



Błąd f jest liniowy z r !
Jak to zrozumieć?

Pod nieobecność ładunku: $\frac{d^2 g}{dr^2} = 0 \longrightarrow g(r) = ar + b$.
(równanie Laplace'a)

W naszym problemie n istotnie znika dla dużych r , gdzie rozwiązanie powinno być postaci $g(r) = -1$ (czyli $a=0, b=-1$)

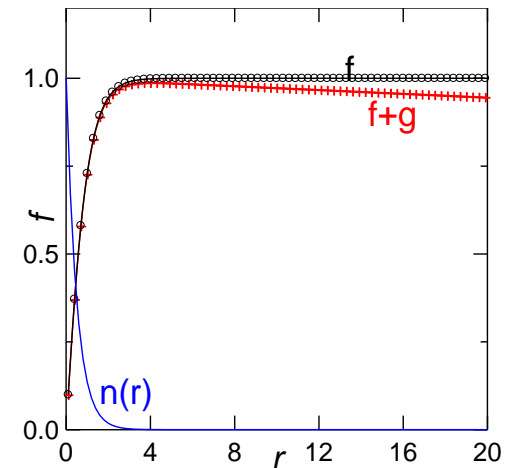
Z drugiej strony: $\frac{d^2(f + g)}{dr^2} = -4\pi r n$ rozwiązanie równania Laplace'a g (jednorodnego) możemy zawsze dodać do rozwiązania równania Poissona f

$g+f$ spełni równanie Poissona, ale warunki brzegowe – niekoniecznie

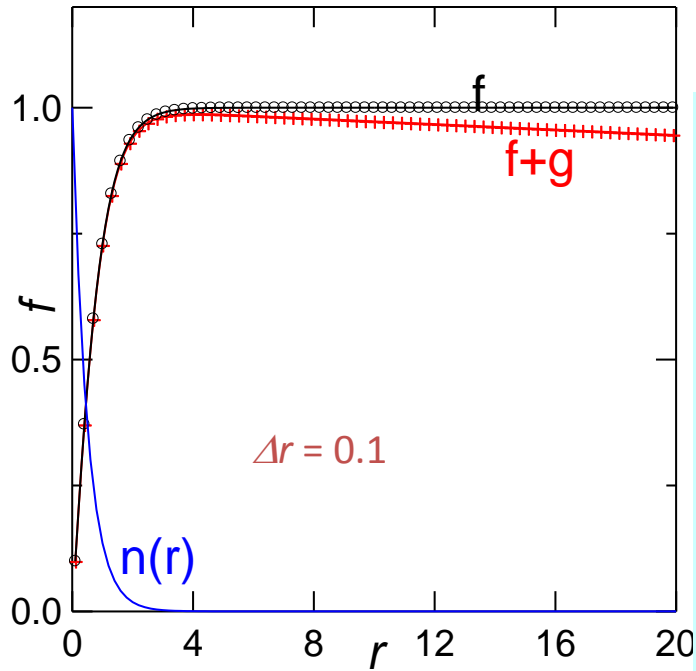
W naszym wyniku: błąd polega na niezerowej wartości a .
Skąd się ona bierze?

Trójpunktowy schemat różnicowy drugiej pochodnej dokładnie różniczuje nawet parabolę, więc dla funkcji typu $ar+b$ się nie myli!
wniosek:

Z obszaru w którym $n <> 0$ iteracja wychodzi z błędem.
błąd pochodzi z całkowania $n(r)$

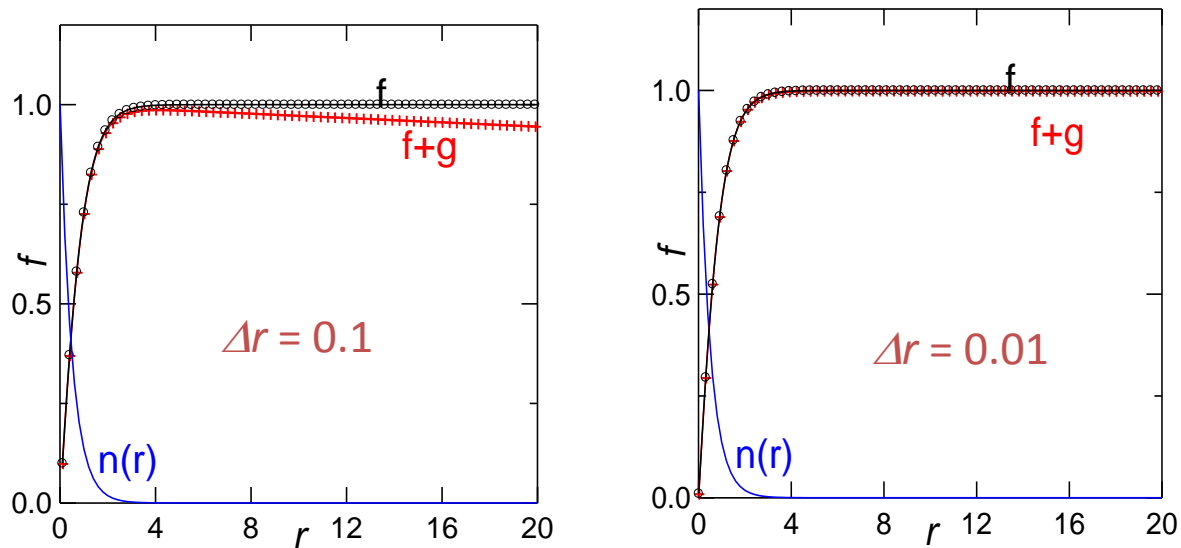


Cóż można poradzić żeby rozwiązanie numeryczne nie odklejało się od dokładnego dla dużych r ?



- rozwiązać jednak problem (URL) z narzuconymi warunkami brzegowymi z obydwu stron
- zagęścić siatkę
- scałkować równanie wstecz
- spróbować wykorzystać lepszą (dokładniejszą) metodę
- f_1 – zamiast analitycznego przyjąć taki, aby prawy warunek był spełniony (metoda strzałów)

Zagęścić siatkę (metoda brutalnej siły)



w f_1 wstawiona wartość analityczna
przy drobnym kroku przestrzennym nie generuje widocznego błędu

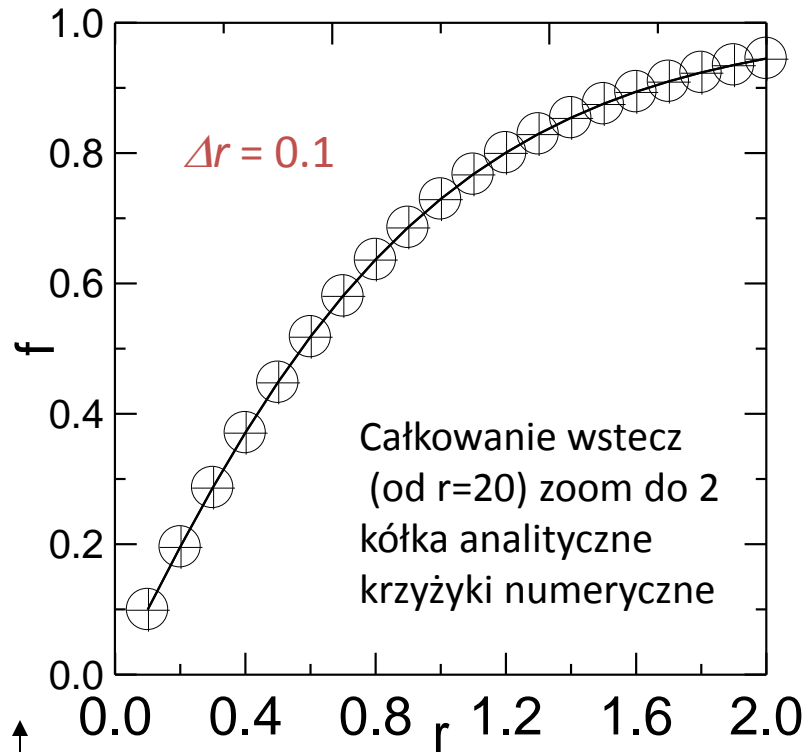
widzieliśmy, że schemat wychodził poza zakres $n(r) < 0$
z błędem, pomysł: **scąkować równanie wstecz**

Zamiast do przodu:

$$f_{i+1} = -4\pi r_i \Delta r^2 n_i + 2f_i - f_{i-1}$$

scąkujemy wstecz:

$$f_{i-1} = -4\pi r_i \Delta r^2 n_i + 2f_i - f_{i+1}$$

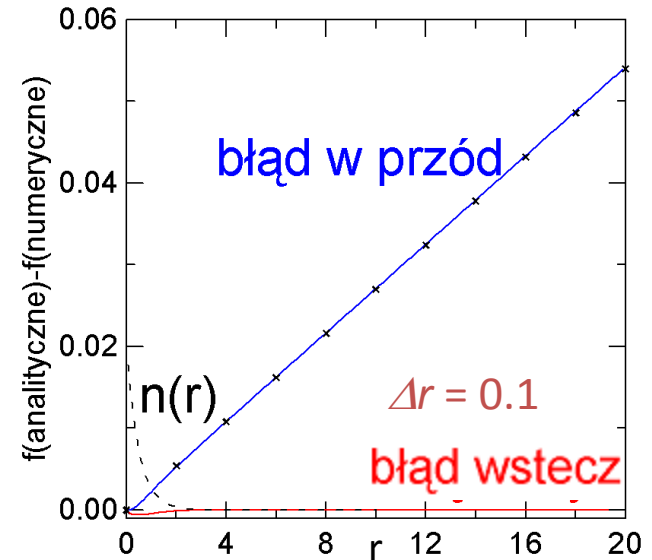


dla $r=0$: f (numeryczne) = 6×10^{-6}
zamiast zera

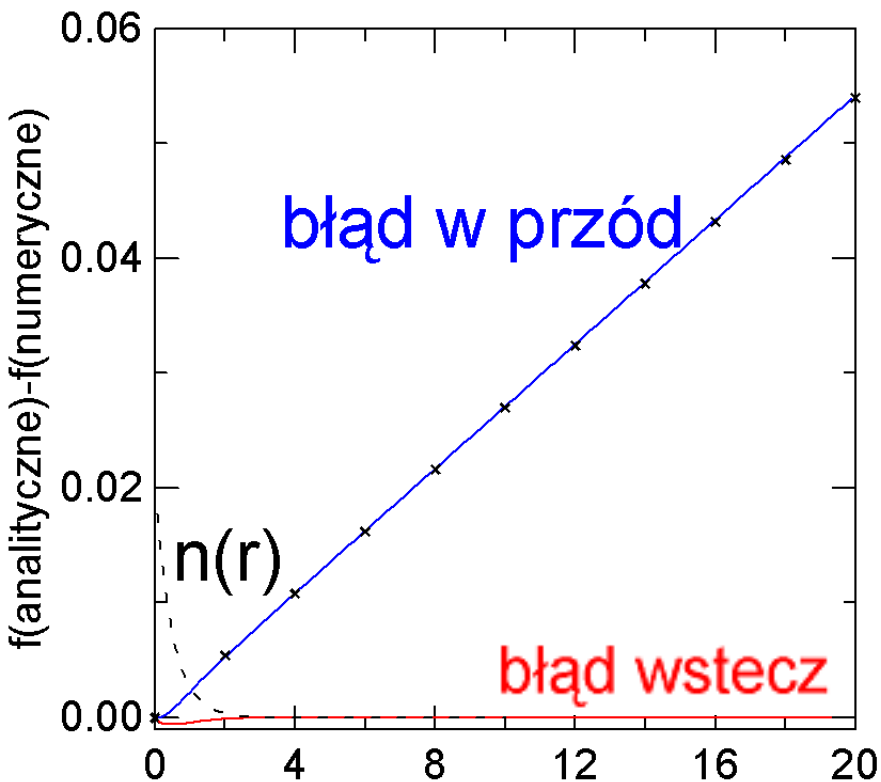
$$f_0 = 1, f_1 = \text{analityczne}$$

$$f_N = 1, f_{N-1} = 1$$

znamy potrzebne
2 wartości!



Tam gdzie pojawia się ładunek,
tam pojawiają
się również błędy, ale nie narastają.



tajemnica naszego sukcesu:

Startowaliśmy w obszarze, gdzie $n(r)$ znika czyli tam obowiązuje r. Laplace'a:

$$g(r) = ar + b.$$

Ustawiliśmy jego rozwiązanie na: $a=0$, $b=-1$.

Dzięki temu: nie pozwoliliśmy domieszać się rozwiązaniu Laplace'a z innymi a i b

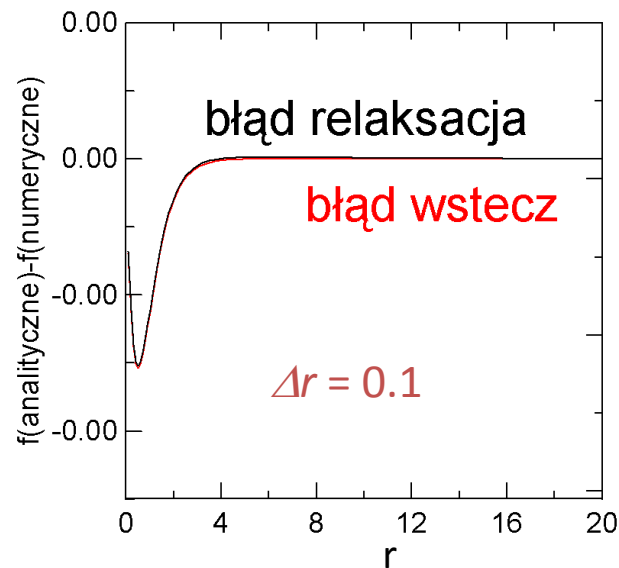
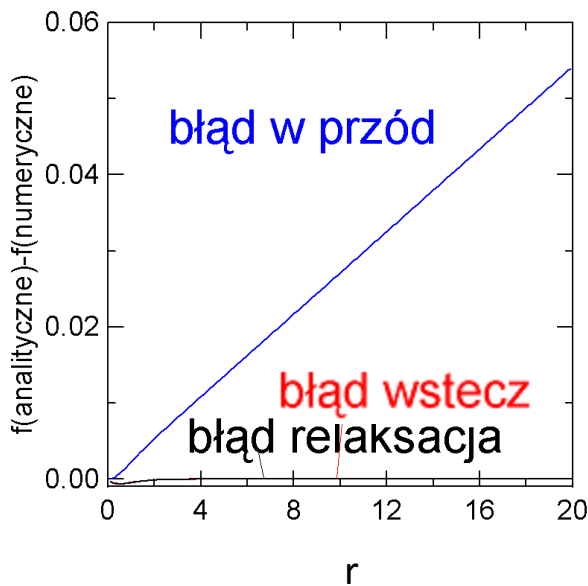
błąd pojawia się tam gdzie ładunek, ale zbytnio nie rośnie

metoda różnic skończonych dla ustalonych WB

$$\frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta r^2} = -4\pi r_i n_i \quad f_0=0, f_N=-1$$

$$f_i := (f_{i+1} + f_{i-1} + 4\pi \Delta r^2 r_i n_i) / 2$$

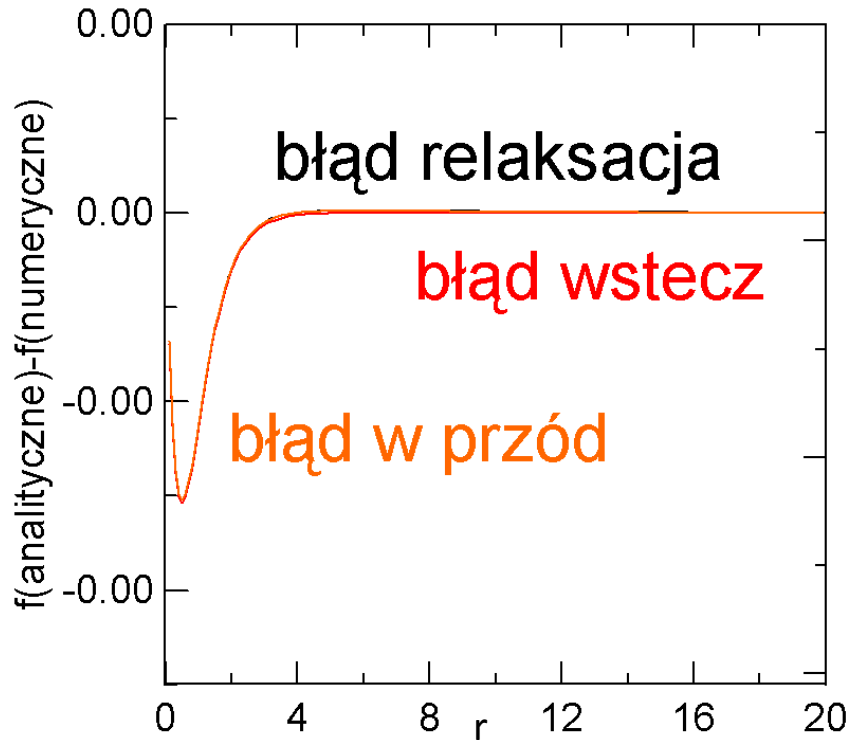
układ równań
rozwiązany iteracyjnie,
(relaksacja)



rozwiązanie wstecz (gdzie właściwy WB w $r=0$ został odnaleziony)
nie gorsze od relaksacji, gdzie spełnienie obydwu WB jest wymuszone.

dlatego błąd w rozwiązaniu do przodu jest tak wielki?

znowu całkowanie do przodu, ale tym razem:



$f_0 = 0, f_1 =$ wyliczone z relaksacji
zamiast wzoru analitycznego

dla $\Delta r = 0.1$ „dokładne”
rozwiązanie numeryczne jest
nieco inne niż analityczne.

(dokładne numeryczne: 0.0996
dokładne analityczne: 0.0993)

wniosek: błąd pierwszego podejścia polegał na
zastosowaniu analitycznego wyniku na f_1 !

Uwaga: to samo rozwiązanie uzyskujemy każdą z 3 metod.
cały błąd leży teraz w ograniczonej dokładności ilorazu różnicowego.

dla całkowania do przodu:

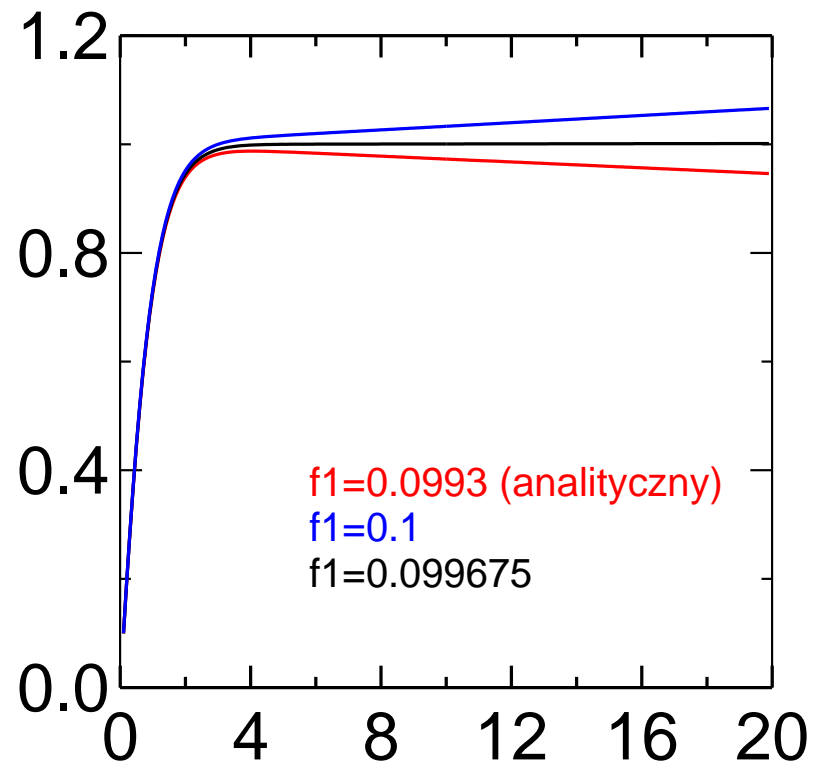
$$f_{i+1} = -4\pi r_i \Delta r^2 n_i + 2f_i - f_{i-1}$$

Jeśli f_1 = analitycznie nie jest
to najlepsze = odgadniemy: **metoda strzałów**

$f_0=0$, f_1 = dobieramy tak aby prawy wb
był odtworzony $f(r=daleko)=1$,
lub $f'(r=daleko) = 0$

metoda strzałów:

Służy do rozwiązania problemu brzegowego przy pomocy podejścia dedykowanego dla problemu początkowego: wstrzelić należy się w (nieznany) parametr określający przebieg = u nas f_1 .



$$\frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta r^2} = -4\pi r_i n_i + O(\Delta r^2)$$

najprostszy iloraz drugiej pochodnej
produkuje przepis z błędem lokalnym rzędu 4
całkiem nieźle, ale:

$$f_{i+1} = 2f_i - f_{i-1} - 4\pi\Delta r^2 r_i n_i + O(\Delta r^4)$$

można lepiej = metoda Numerowa
błąd lokalny rzędu 6

metoda Numerowa:

[przepis na kolejne wartości rozwiązania liczone
z błędem $O(\Delta x^6)$ zamiast $O(\Delta x^4)$]:

Stosowana do równania typu:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + g(x)y = S(x)$$

[równanie liniowe II rzędu, bez pierwszej pochodnej]

równanie traktowane
metodą Numerowa:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + g(x)y = S(x)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\phi}{dr} \right) = -4\pi n$$

oryginalne równanie Poissona

$$\frac{d^2 \phi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\phi}{dr} = -4\pi n$$

występuje pochodna – nie podejmiemy
Numerowem

sprowadzone do wersji odpowiedniej dla Numerowa przez podstawienie

$$\phi(r) = \frac{f(r)}{r}$$

$$\frac{d^2 f}{dr^2} = -4\pi r n$$

Metoda Numerowa – wyprowadzenie:

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = S(x) - g(x)u(x)$$

$$u(x + \Delta x) = u(x) + \Delta x \frac{du}{dx} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{\Delta x^3}{6} \frac{d^3 u}{dx^3} + \frac{\Delta x^4}{24} \frac{d^4 u}{dx^4} + \frac{\Delta x^5}{120} \frac{d^5 u}{dx^5} + O(\Delta x^6)$$

$$u(x - \Delta x) = u(x) - \Delta x \frac{du}{dx} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{d^2 u}{dx^2} - \frac{\Delta x^3}{6} \frac{d^3 u}{dx^3} + \frac{\Delta x^4}{24} \frac{d^4 u}{dx^4} - \frac{\Delta x^5}{120} \frac{d^5 u}{dx^5} + O(\Delta x^6)$$

$$u(x + \Delta x) + u(x - \Delta x) = 2u(x) + \frac{2\Delta x^2}{2} \frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{2\Delta x^4}{24} \frac{d^4 u}{dx^4} + O(\Delta x^6)$$

$$\frac{d^2 u}{dx^2} = \frac{u(x + \Delta x) + u(x - \Delta x) - 2u(x)}{\Delta x^2} - \frac{\Delta x^2}{12} \frac{d^4 u}{dx^4} + O(\Delta x^4)$$

druga pochodna prawej strony
równania różniczkowego

$$\frac{d^4 u}{dx^4} = \frac{S(x + \Delta x) + S(x - \Delta x) - 2S(x)}{\Delta x^2} - \frac{g(x + \Delta x)u(x + \Delta x) + g(x - \Delta x)u(x - \Delta x) - 2g(x)u(x)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

po wstawieniu wyżej błąd pozostanie rzędu 4

$$\begin{aligned} & \frac{u(x + \Delta x) + u(x - \Delta x) - 2u(x)}{\Delta x^2} - \frac{\Delta x^2}{12} \left[\frac{S(x + \Delta x) + S(x - \Delta x) - 2S(x)}{\Delta x^2} \right. \\ & \left. - \frac{g(x + \Delta x)u(x + \Delta x) + g(x - \Delta x)u(x - \Delta x) - 2g(x)u(x)}{\Delta x^2} \right] + O(\Delta x^4) \\ & = S(x) - g(x)u(x) \end{aligned}$$

Obustronnie mnożymy przez Δx^2 , grupujemy wyrazy

$$\begin{aligned} & \left(1 + \frac{\Delta x^2}{12}g(x + \Delta x)\right)u(x + \Delta x) - 2\left(1 - \frac{5\Delta x^2}{12}g(x)\right)u(x) + \left(1 + \frac{\Delta x^2}{12}g(x - \Delta x)\right)u(x - \Delta x) \\ & = \frac{\Delta x^2}{12}(S(x + \Delta x) + 10S(x) + S(x - \Delta x)) + O(\Delta x^6) \end{aligned}$$

Podstawowa formuła metody Numerowa

wykorzystać – można na podobnie wiele sposobów

tak - jak iloraz centralny drugiej pochodnej:

np. problem brzegowy – z relaksacją

lub jak problem początkowy

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + g(x)y = S(x)$$

$$\frac{d^2 f}{dr^2} = -4\pi r n$$

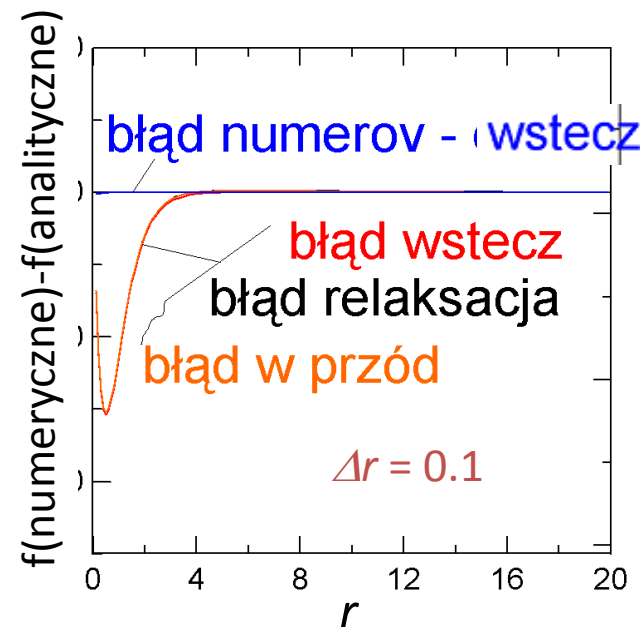
W naszym przykładzie: $g=0$, $S = -4\pi r n$

Metoda Numerowa wstecz:

$$f_{i-1} = \frac{\Delta r^2}{12} (S_{i+1} + 10S_i + S_{i-1}) + 2f_i - f_{i+1} + O(\Delta r^6)$$

Dyskretyzacja bezpośrednia:

$$f_{i-1} = \Delta r^2 S_i + 2f_i - f_{i+1} + O(\Delta r^4)$$

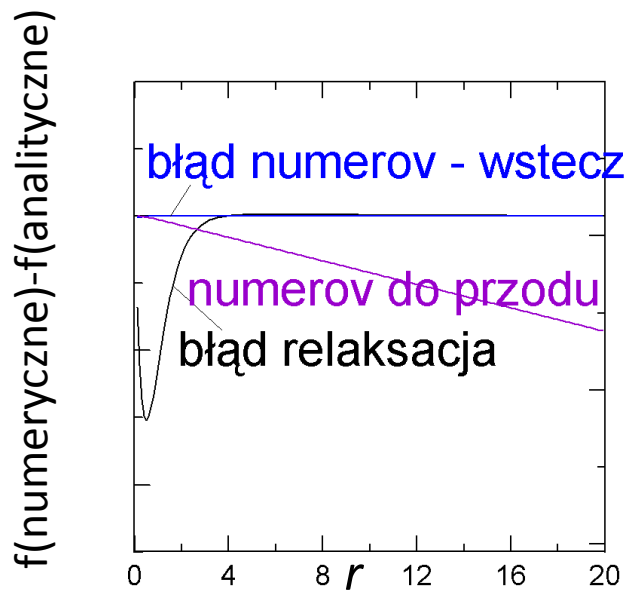


cała różnica w sposobie uwzględniania
niejednorodności (źródeł)

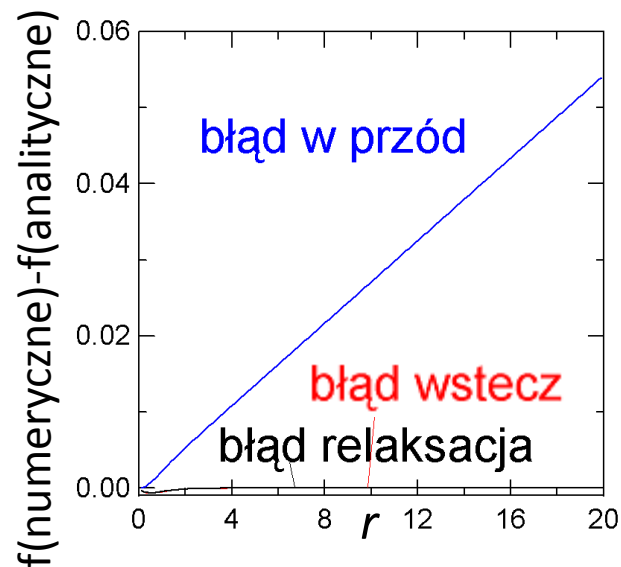
Przy tym samym skoku siatki
błąd Numerowa jest zanedbywalny w porównaniu
z błędem dyskretyzacji bezpośredniej.

$S(n)$ – wzywane trzykrotnie,
lecz można stabilizować,
złożoność obliczeniowa nie rośnie

metoda Numerowa w całkowaniu do przodu z analitycznym f_1



Przypominam wynik przy podejściu poprzednim:




Błąd jest podobnego pochodzenia (numeryczne \leftrightarrow analityczne) i podobnego charakteru (liniowy z r) ale znacznie mniejszy

(błąd popełniony przez Numerowa w obszarze gdzie n nie znika – znacznie mniejszy)

Nie każde równanie różniczkowe zwyczajne można rozwiązać metodą Numerowa, ale każde można w sposób ścisły sprowadzić do układu równań pierwszego rzędu np:

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = S(x) - g(x)u(x)$$

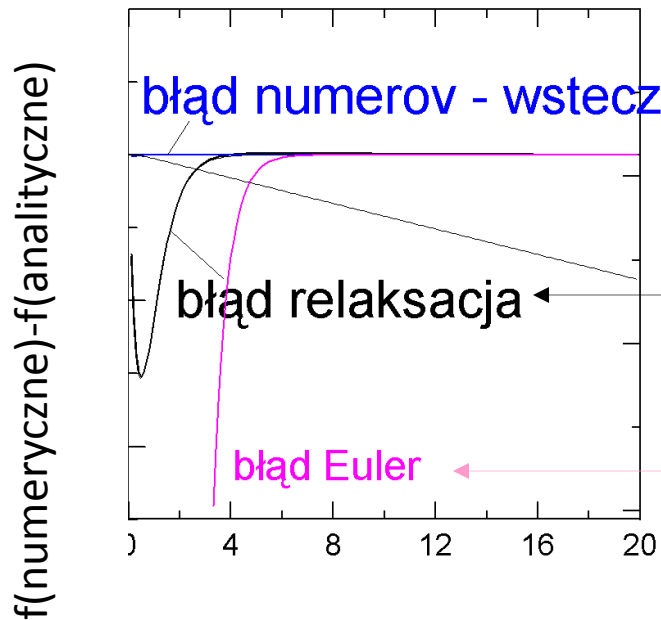


$$\frac{du}{dx} = v$$
$$\frac{dv}{dx} = S(x) - g(x)u(x)$$

Rozwiązywać takie układy równań już potrafimy

rozwiązujemy wstecz: $f(\text{duże } x) = -1$, $df/dx(\text{duże } x) = 0$

Równanie drugiego rzędu a układ równań pierwszego rzędu : dokładność



centralny iloraz różnicowy drugiej pochodnej

Euler: dyskretyzacja pierwszej pochodnej
po sprowadzeniu równania drugiego rzędu
do układu dwóch równań rzędu pierwszego
całkowany wstecz

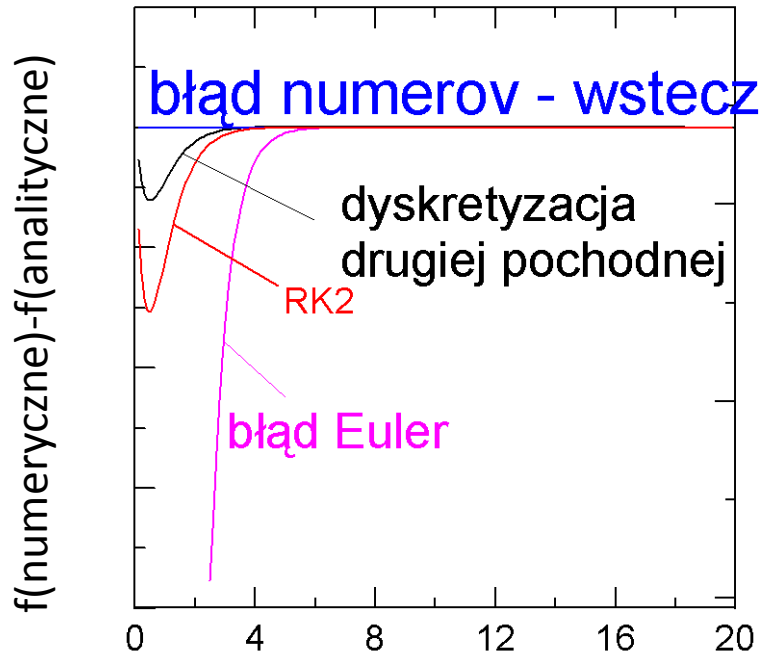
Euler $O(\Delta x^2)$

metoda z centralnym iloraz różnicowy drugiej pochodnej $O(\Delta x^4)$

Numerov $O(\Delta x^6)$

Redukcja rzędu równania przez sprowadzenie
do układu równań pierwszego rzędu ma swoją cenę.

Jak spisuje się RK2 ?



Euler $O(\Delta x^2)$

RK2 $O(\Delta x^3)$

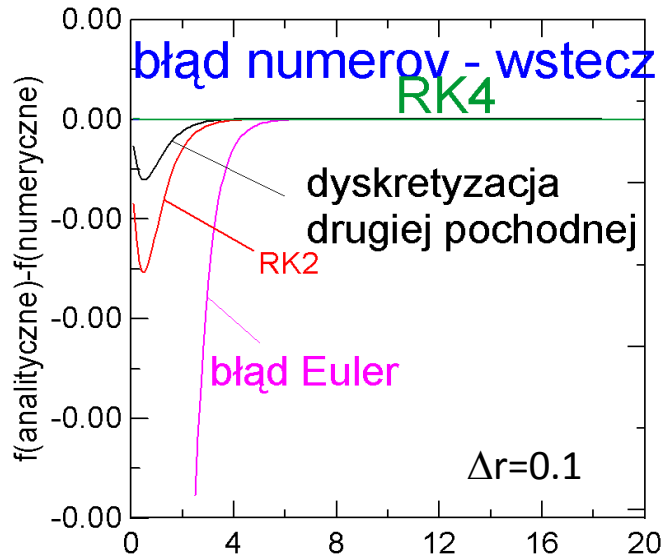
Dyskretyzacja drugiej pochodnej
 $O(\Delta x^4)$

Numerow $O(\Delta x^6)$

Znacznie lepiej niż Euler, ale wciąż gorzej niż dyskretyzacja drugiej pochodnej.

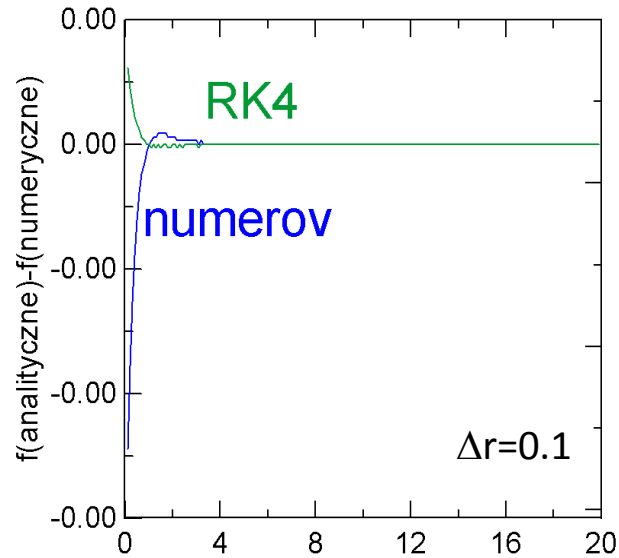
RK4: $O(\Delta x^5)$

Dokładność bliska Numerowa

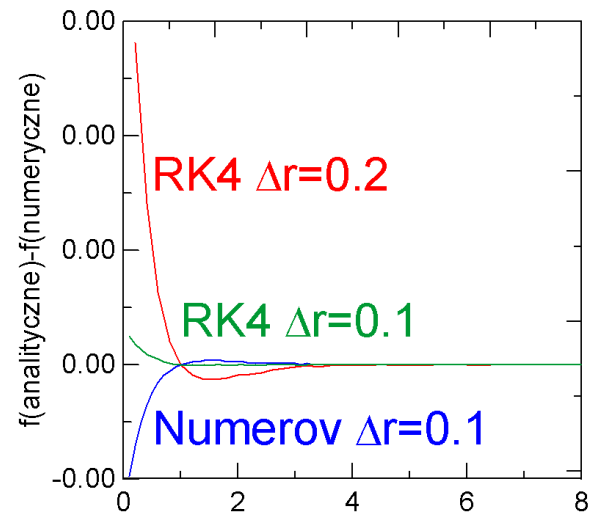


Numerow $O(\Delta x^6)$

a nawet lepsza



Nieco słabsza od Numerowa, gdy wziąć poprawkę na wzywianie prawej strony w punktach pośrednich:



Przykład był nietypowy:

dla prawego brzegu: mogliśmy zadać
w sposób dokładny (analitycznie i numerycznie)
wartość rozwiązania w kroku ostatnim i przedostatnim.

W praktyce:

rzadko tak jest: rozwiązując problem brzegowy
metodami dla problemu początkowego
– musimy wyznaczyć wartość w punkcie
sąsiednim do brzegowego) – **metoda strzałów**

metoda strzałów dla dwupunktowych problemów brzegowych (zastosowanie metod do problemu początkowego)

... rozwiązanie problemu brzegowego przy pomocy metod dedykowanych do zagadnienia początkowego

istota metody: parametryzacja rozwiązań przy pomocy dodatkowego wb na jednym z końców
+ wybór parametru, który daje spełnienie prawego wb.

rozważmy 2-punktowy nieliniowy problem brzegowy drugiego rzędu

$$u''(x) = f(x, u, u') \quad \left| \quad a < x < b \quad \right| \quad \begin{cases} u(a) = A \\ u(b) = B \end{cases}$$

stowarzyszony problem początkowy:

$$\begin{aligned} y_1'(x) &= y_2(x) & y_1(a) &= A \\ y_2'(x) &= f(x, y_1, y_2) & y_2(a) &= \alpha \end{aligned}$$

w metodzie strzałów kluczowa zależność od swobodnego parametru α

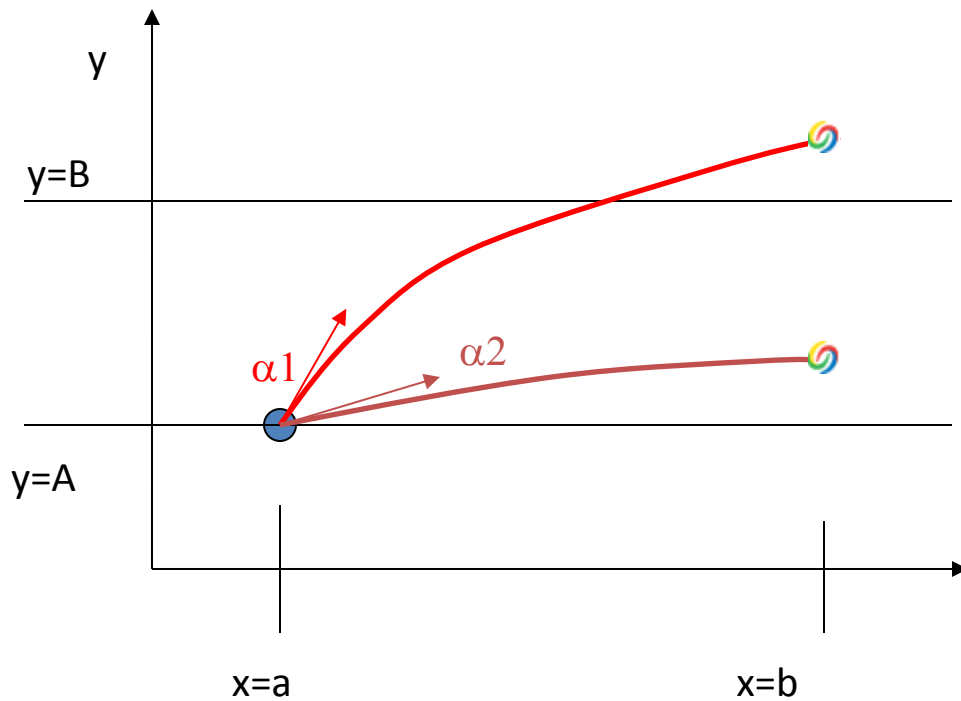
$$y_k(x) = y_k(x; \alpha)$$

rozwiązywać będziemy problem początkowy szukając takiej wartości parametru swobodnego aby

$$y_1(b; \alpha) = B$$

problem sprowadza się do rozwiązania nieliniowego równania na α

metoda strzałów



$$y_1'(x) = y_2(x)$$
$$y_2'(x) = f(x, y_1, y_2)$$

$$y_1(a) = A$$

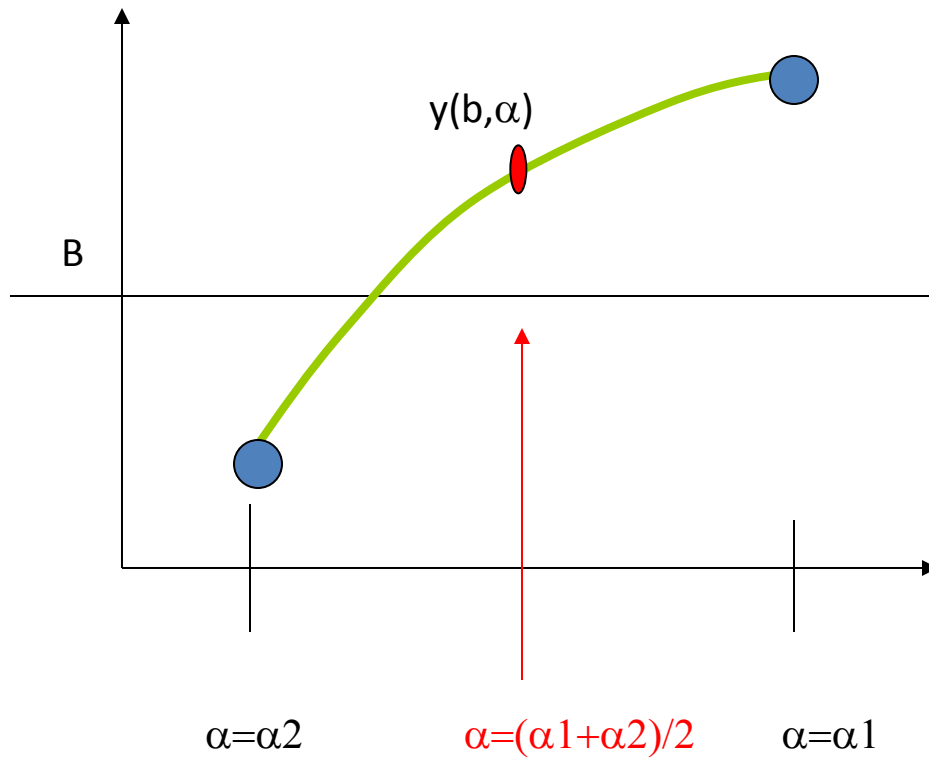
$$y_2(a) = \alpha$$

$$y_1(b; \alpha) = B$$

na rysunku: musimy trafić z pochodną w $x=a$ tak aby na końcu nasz „pocisk” trafił w $y=B$ (stąd nazwa metody)

$y_1(b; \alpha)$ zależy w sposób ciągły od α .
tutaj: α_1 za duża α_2 zbyt mała

metoda strzałów



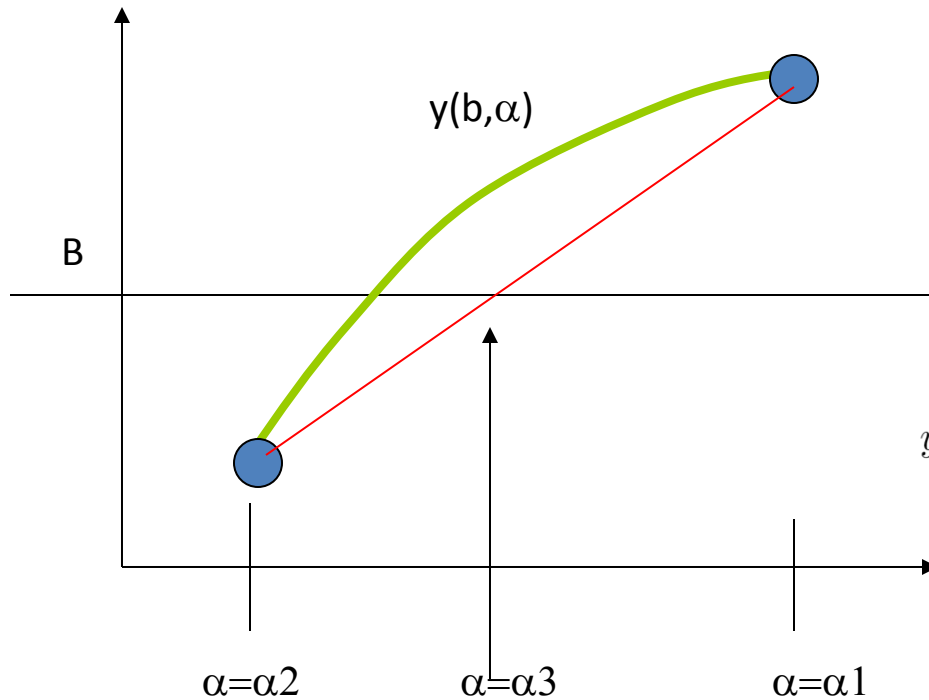
$$y_1(b; \alpha) = B$$

można rozwiązać **bisekcją**: wyliczyć $y_1(b; (\alpha_1 + \alpha_2)/2)$
i zawęzić przedział poszukiwania zera

kończymy gdy przedział wystarczająco zawężony

metoda strzałów

$$y_1(b; \alpha) = B$$



od bisekcja lepsza **metoda siecznych**
zakładamy, że $y(b, \alpha)$ jest liniowa
w okolicy α_1, α_2 prowadzimy interpolację :

$$y(b, \alpha) = y(b, \alpha_1) \frac{\alpha - \alpha_2}{\alpha_1 - \alpha_2} + y(b, \alpha_2) \frac{\alpha - \alpha_1}{\alpha_2 - \alpha_1}$$

B powinno znajdować się w

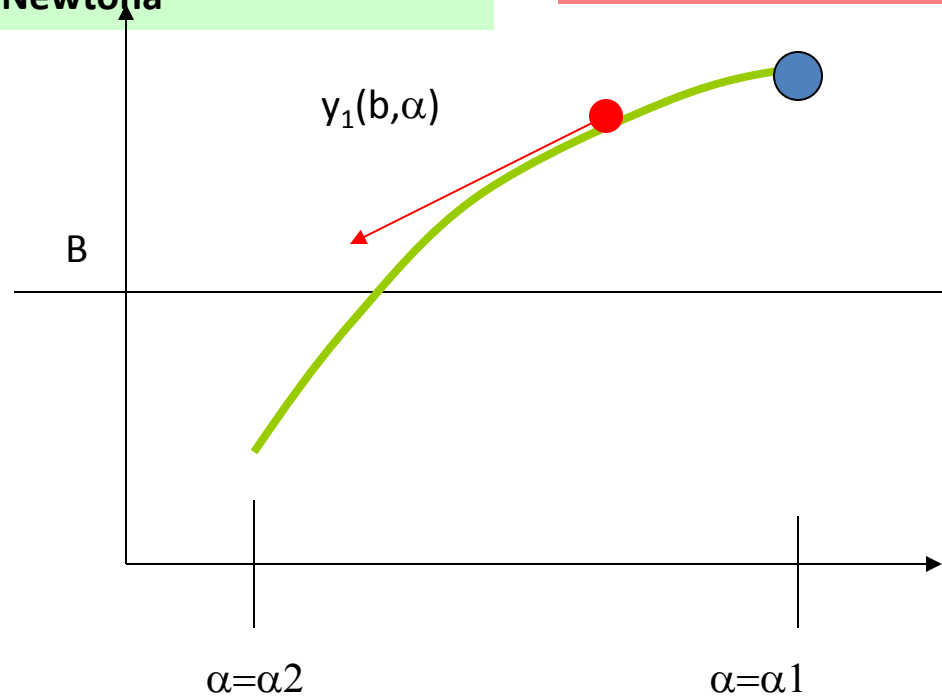
$$\alpha_3 \equiv \alpha := \frac{\alpha_2 y(b; \alpha_1) - \alpha_1 y(b; \alpha_2) + B(\alpha_1 - \alpha_2)}{y(b; \alpha_1) - y(b; \alpha_2)}$$

kończymy np., gdy $|y(b, \alpha_3) - B| < \varepsilon$

możliwe użycie zamiast prostej: wielomianu interpolacyjnego stopnia 2

metoda strzałów z iteracją
Newtona

$y_1(b; \alpha) - B = 0$



można metodą Newtona

$$\alpha^{\mu+1} = \alpha^{\mu} - \frac{y_1(b; \alpha^{\mu}) - B}{\frac{\partial y_1(b; \alpha^{\mu})}{\partial \alpha^{\mu}}}$$

potrzebna pochodna po α
jak wyznaczyć:

zbieżność Newtona / siecznych

zbieżność Newtona (zazwyczaj):

$$|\alpha_{\nu+1} - \alpha_{\infty}| \leq C |\alpha_{\nu} - \alpha_{\infty}|^2, \quad \nu \rightarrow \infty,$$

kwadratowa, ale wykonanie każdego kroku wymaga rozwiązania dodatkowego problemu początkowego

zbieżność siecznych:

$$|\alpha_{\nu+1} - \alpha_{\infty}| \leq C |\alpha_{\nu} - \alpha_{\infty}|^{1.5}, \quad \nu \rightarrow \infty,$$

wolniejsza ale tańsza iteracja

bisekcja:

$$|\alpha_{\nu+1} - \alpha_{\infty}| \leq C |\alpha_{\nu} - \alpha_{\infty}|^1$$

wolniejsza,
ale nie tańsza od siecznych
sensowne użycie, gdy nieróżniczkowalna
zależność od parametru swobodnego

metoda strzałów z iteracją Newtona

$$\alpha^{\mu+1} = \alpha^{\mu} - \frac{y_1(b; \alpha^{\mu}) - B}{\frac{\partial y_1(b; \alpha^{\mu})}{\partial \alpha^{\mu}}} \leftarrow \text{wyznaczyć}$$

$y_1'(x) = y_2(x)$	$y_1(a) = A$
$y_2'(x) = f(x, y_1, y_2)$	$y_2(a) = \alpha$

różniczkujemy po α

$$\frac{d}{d\alpha} \frac{d}{dx} y_1(x; \alpha) = \frac{d}{d\alpha} y_2(x; \alpha) \quad z_1 = \frac{dy_1}{d\alpha} \quad z_1(a) = 0$$

nazywamy:

$$\frac{d}{d\alpha} \frac{d}{dx} y_2(x; \alpha) = \frac{d}{d\alpha} f(x, y_1, y_2) \quad z_2 = \frac{dy_2}{d\alpha} \quad z_2(a) = 1$$

$$\frac{df}{d\alpha} = \frac{df}{dy_1} \frac{dy_1}{d\alpha} + \frac{df}{dy_2} \frac{dy_2}{d\alpha} \quad \longrightarrow \quad \frac{df}{d\alpha} = z_1 \frac{df}{dy_1} + z_2 \frac{df}{dy_2}$$

metoda strzałów z iteracją Newtona

$$\alpha^{\mu+1} = \alpha^{\mu} - \frac{y_1(b; \alpha^{\mu}) - B}{\frac{\partial y_1(b; \alpha^{\mu})}{\partial \alpha^{\mu}}} \leftarrow \text{wyznaczyć}$$

$y_1'(x) = y_2(x)$	$y_1(a) = A$
$y_2'(x) = f(x, y_1, y_2)$	$y_2(a) = \alpha$

różniczkujemy po α

$$z_1 = \frac{dy_1}{d\alpha}$$

$$\frac{d}{d\alpha} \frac{d}{dx} y_1(x; \alpha) = \frac{d}{d\alpha} y_2(x; \alpha)$$

$$\frac{d}{d\alpha} \frac{d}{dx} y_2(x; \alpha) = \frac{d}{d\alpha} f(x, y_1, y_2)$$

$$\frac{df}{d\alpha} = z_1 \frac{df}{dy_1} + z_2 \frac{df}{dy_2}$$

$$z_2 = \frac{dy_2}{d\alpha}$$

$$\frac{d}{dx} z_1(x; \alpha) = z_2(x; \alpha)$$

$$z_1(a) = 0$$

stowarzyszony problem początkowy do rozwiązania w funkcji x

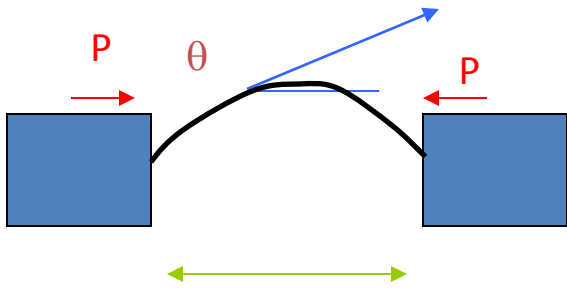
$$\frac{d}{dx} z_2(x; \alpha) = z_1 \frac{df}{dy_1} + z_2 \frac{df}{dy_2}$$

$$z_2(a) = 1$$

$z_1(x=b, \alpha)$ da nam mianownik do metody Newtona

przykład: pręt w imadle (*clamped elastica*)

pręt jednostkowej długości jest zamocowany sztywno pod zadaniem kątem w imadle które zaciskają się z obciążeniem P.



$\theta(s)=?$ s -współrzędna położenia wzdłuż pręta dla pręta jednostkowej długości $0 < s < 1$

znamy kąt $\theta(0)=\beta$, $\theta(1)=-\beta$, Z warunków symetrii: $\theta(1/2)=0$

z teorii elastyczności:
$$\frac{d^2\theta}{ds^2} + P \sin(\theta) = 0 \quad (\text{problem nieliniowy})$$

poszukujemy: 1) kształtu pręta i co za tym idzie 2) rozstawienia szczęk imadła

przygotujmy problem do metody strzałów z metodą Newtona:

$$\begin{array}{l} y_1 = \theta \\ y_2 = \theta' \end{array} \xrightarrow{\text{równania}} \begin{array}{l} y_1' = y_2 \\ y_2' = -P \sin(y_1) \end{array}$$

równanie nieliniowe do rozwiązania:

$$y_1(1/2, \alpha) = 0$$

z wp

$$\begin{array}{l} \text{zadane} \longrightarrow y_1(0; \alpha) = \beta \\ \text{parametr do wyznaczenia} \longrightarrow y_2(0; \alpha) = \alpha \end{array}$$

$$\alpha^{\mu+1} = \alpha^{\mu} - \frac{y_1(1/2; \alpha^{\mu})}{\frac{\partial y_1}{\partial \alpha}(1/2; \alpha^{\mu})}$$

przygotujmy problem do metody strzałów z metodą Newtona:

$$\begin{aligned} y_1' &= y_2 & y_1(0; \alpha) &= \beta & y_1(1/2, \alpha) &= 0 \\ y_2' &= -P \sin(y_1) & y_2(0; \alpha) &= \alpha \end{aligned}$$

$$\alpha^{\mu+1} = \alpha^{\mu} - \frac{y_1(1/2; \alpha^{\mu})}{\frac{\partial y_1}{\partial \alpha}(1/2; \alpha^{\mu})}$$

$$z_1 = \frac{\partial y_1}{\partial \alpha} \quad z_2 = \frac{\partial y_2}{\partial \alpha}$$

pochodna problemu początkowego po α

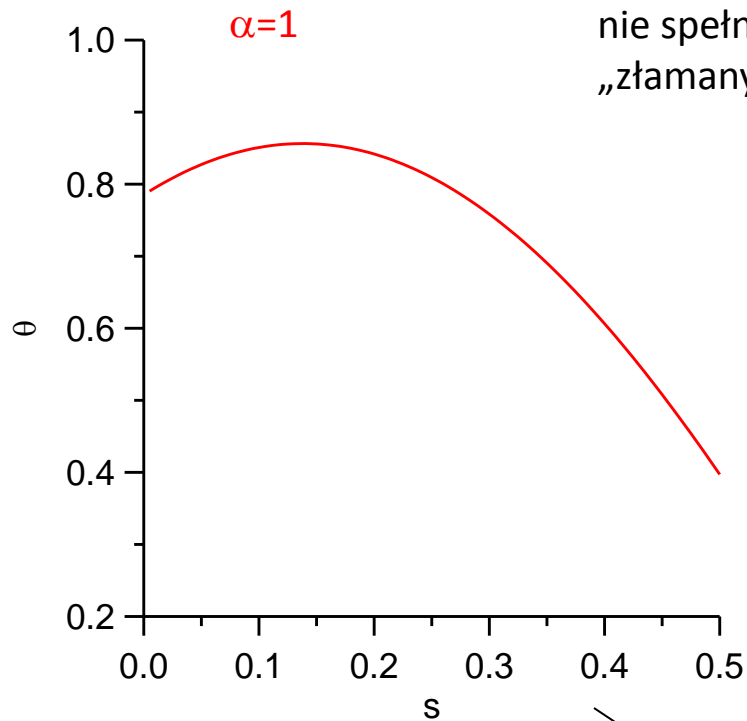
$$\begin{aligned} z_1' &= z_2 \\ z_2' &= -P \cos(y_1) z_1 \\ z_1(0; \alpha) &= 0 \\ z_2(0; \alpha) &= 1 \end{aligned}$$

$$\alpha^{\mu+1} = \alpha^{\mu} - \frac{y_1(1/2; \alpha^{\mu})}{z_1(1/2; \alpha^{\mu})}$$

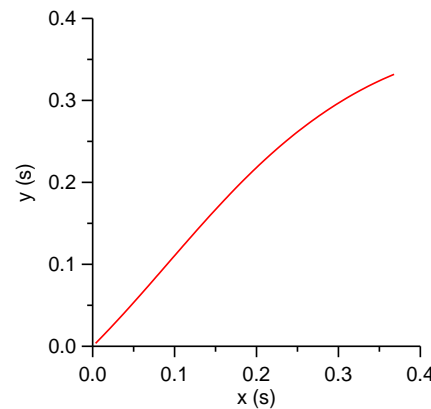
kolejność działań:

- 1) rozwiązujemy problem na y : licznik
- 2) do wyliczenia mianownika rozwiązujemy problem na z :
[z_2' wykorzystuje policzone w 1) y_1]
- 3) znajdujemy poprawione α

zaciśnięty pręt $\beta=\pi/4$, na starcie pochodna kąta θ po s : $\alpha=1$, $P=10$,
obydwa problemy początkowe rozwiązane jawnym schematem Eulera z $ds=0.5/100$

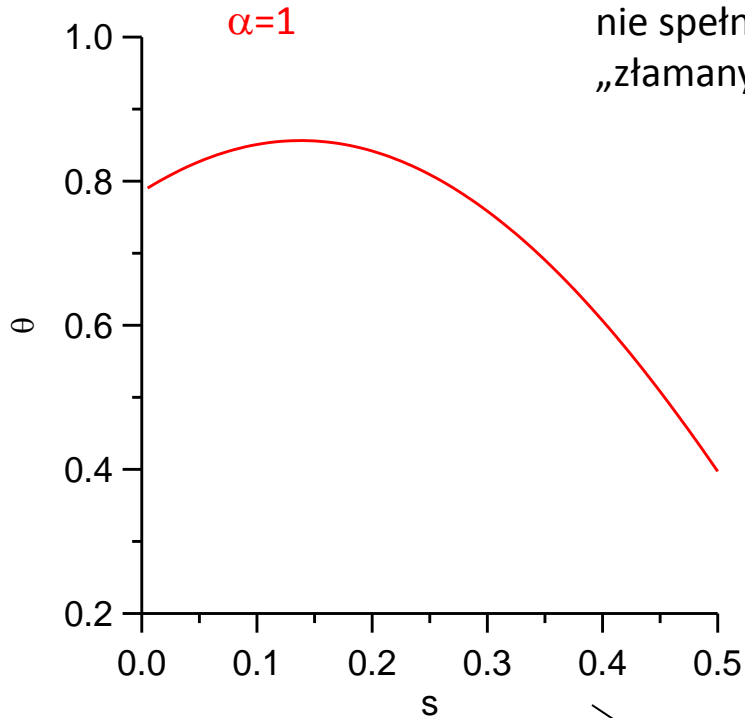


nie spełnia warunku brzegowego w połowie pręta
„złamany” pręt

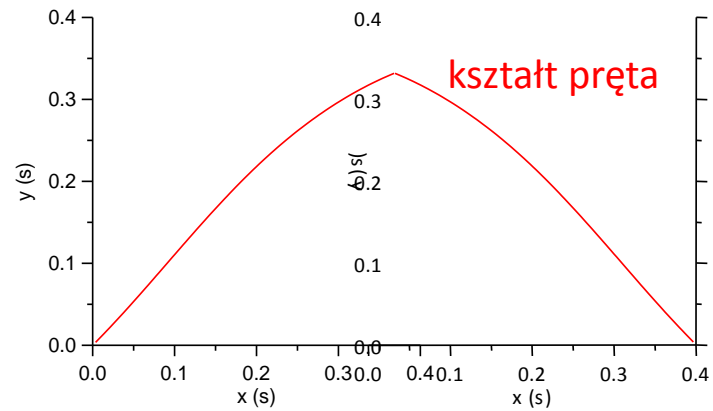


$$x(s) = \int_0^s \cos(\theta(u)) du$$
$$y(s) = \int_0^s \sin(\theta(u)) du$$

zaciśnięty pręt $\beta=\pi/4$, na starcie pochodna kąta θ po s : $\alpha=1$, $P=10$,
problemy własne rozwiązane jawnym schematem Eulera z $ds=0.5/100$



nie spełnia warunku brzegowego w połowie pręta
„złamany” pręt



$$x(s) = \int_0^s \cos(\theta(u)) du$$

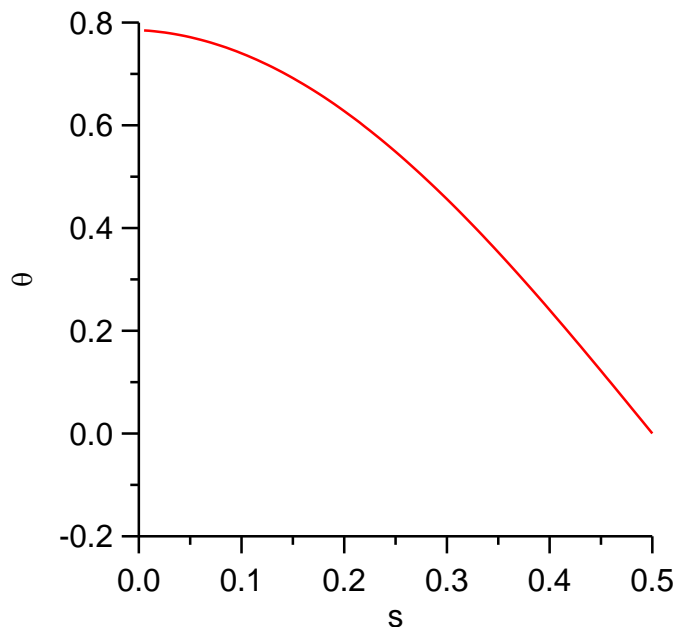
$$y(s) = \int_0^s \sin(\theta(u)) du$$

iteracja Newtona

	α	$\theta(1/2, \alpha)$
1	1.000000	0.3970441
2	-0.8177086E-01	0.1302912E-01
3	-0.1195772	0.1138412E-04
4	-0.1196103	0.8602074E-11
5	-0.1196103	-0.3694961E-15
6	-0.1196103	-0.4510281E-16
7	-0.1196103	0.6591949E-16

znaleźliśmy wartość parametru α która daje właściwy kształt pręta

możemy teraz sobie odległość między szczękami wyliczyć



$$x(s) = \int_0^s \cos(\theta(u)) du$$

$$y(s) = \int_0^s \sin(\theta(u)) du$$

