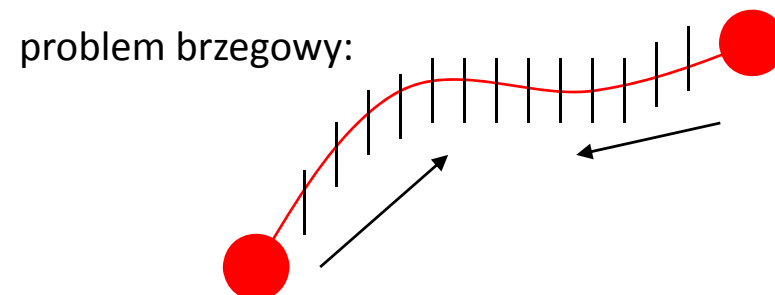
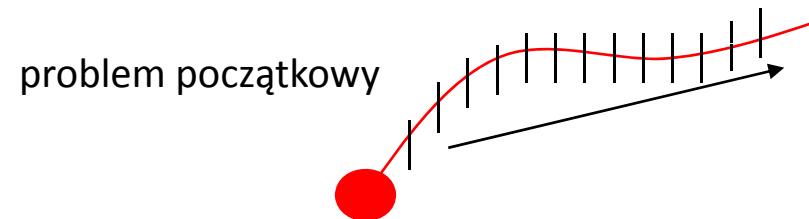


Równania różniczkowe zwyczajne: problem brzegowy [1D]

- 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 $u(x,t)$:

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

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

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

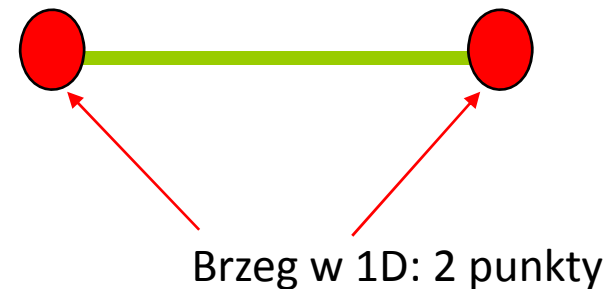
$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x)$$

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.

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

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



warunki brzegowe w 1D:

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

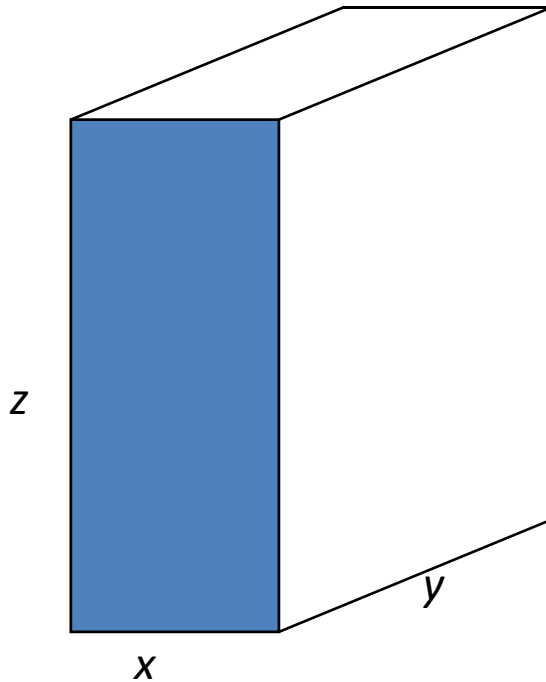
- 1) na wartość funkcji (Dirichleta) $u(0)=a$, $u(L)=b$
- 2) na pochodną funkcji (Neumanna) $u'(0)=a$, $u'(L)=b$
- 3) mieszane (Robina) $u(0)+cu'(0)=a$, $u(L)+du'(L)=b$

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 kąpielu cieplnej*



układ jednorodny i rozległy
w (y, z)

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

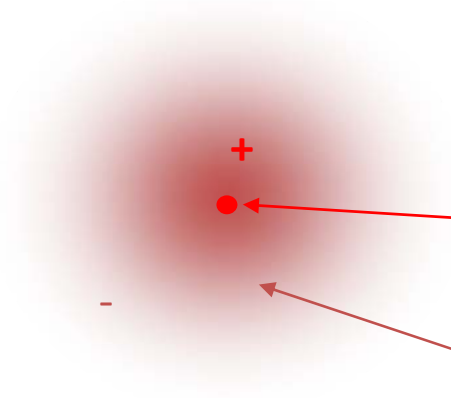
interesuje nas rozkład potencjału w środku
układu

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

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

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

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

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

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

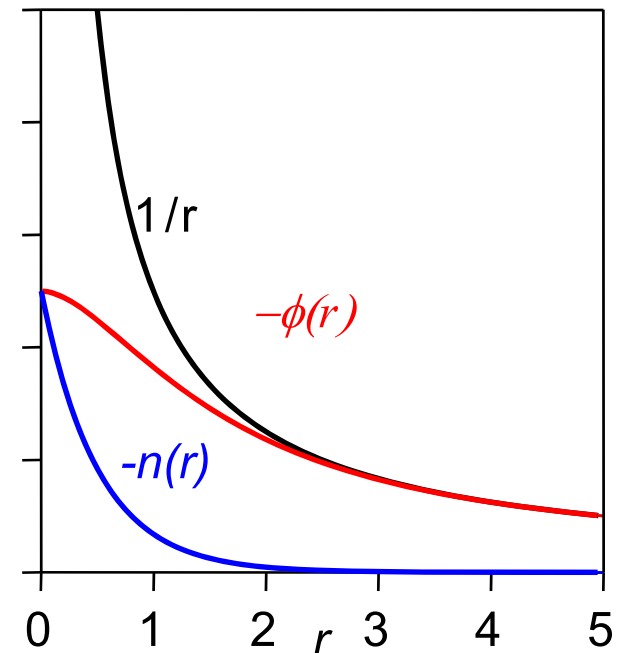
$$\phi_+ = 1/r$$

składowa od gęstości
elektronowej

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

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

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

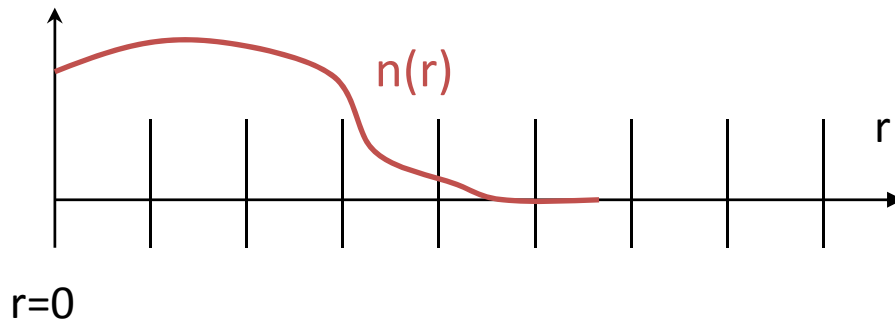


$$\nabla^2 \phi = -4\pi n(r) \quad n(r) = -\exp(-2r)/\pi.$$

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

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

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



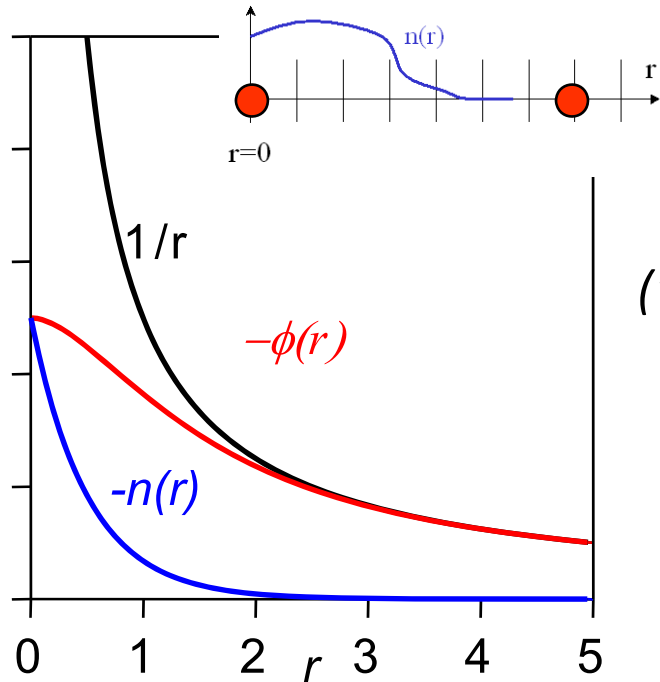
$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\phi}{dr} \right) = -4\pi n$$

zdykretyzować 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

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

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

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

jakobian

r. Poissona

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

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 punkowego ładunku

gdy rozkład gęstości rozciągnięty:

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

3) jego pochodna znika w $r=0$ [$E=0$ 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

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

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

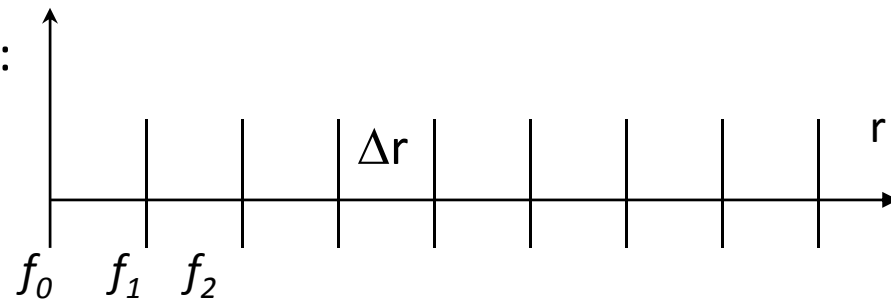
(1) plus (2) trójpunktowy iloraz drugiej pochodnej

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

do rozwiązania problem algebraiczny:

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

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



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

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

Układ równań liniowych rozwiązać i po sprawie.

ale: dokładność rachunku ograniczona dokładnością ilorazu różnicowego drugiej pochodnej
 poznaliśmy świetne metody do rozwiązywania 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]

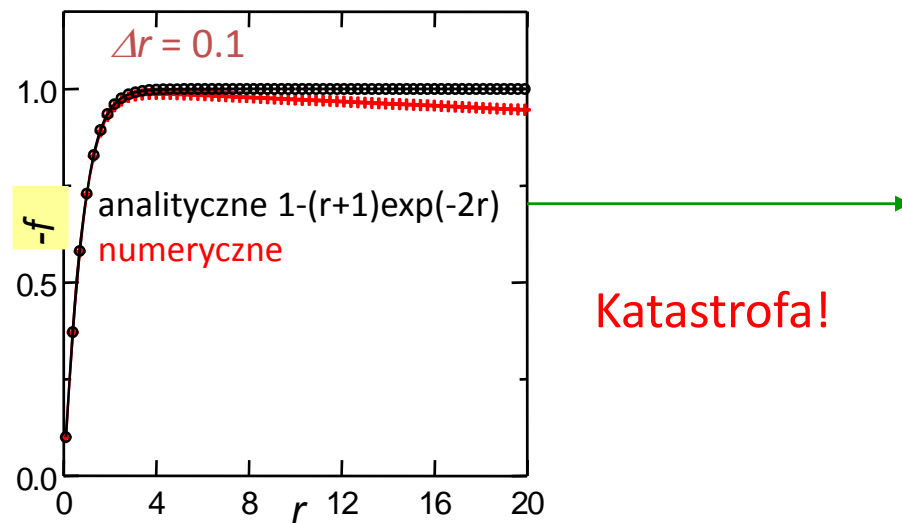
możemy wyliczyć f_2 i następne.

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

Jeśli tak – problem rozwiązany

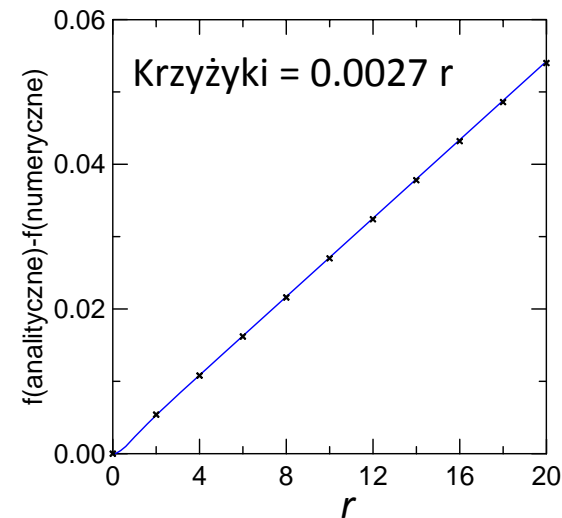
$$f_{i+1} = 2f_i - f_{i-1} - 4\pi\Delta r^2 r_i n_i$$

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



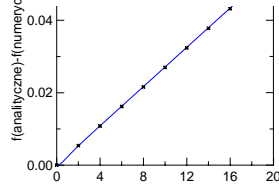
Katastrofa!

(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:
(równanie Laplace'a)

$$\frac{d^2 g}{dr^2} = 0 \longrightarrow g(r) = ar + b.$$

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:
$$\frac{d^2(f + g)}{dr^2} = -4\pi r n$$

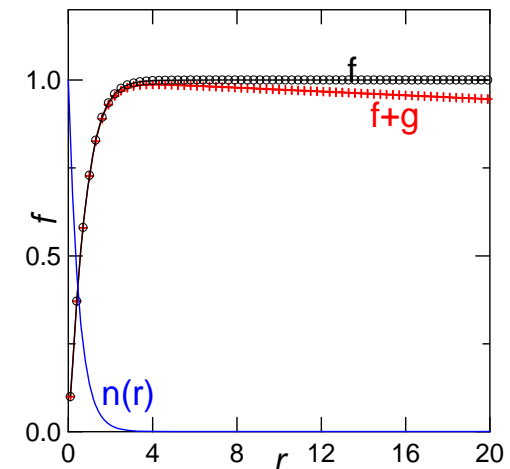
rozwiązanie równania Laplace'a g (jednorodnego) możemy zawsze dodać do rozwiązania równania Poissona f

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

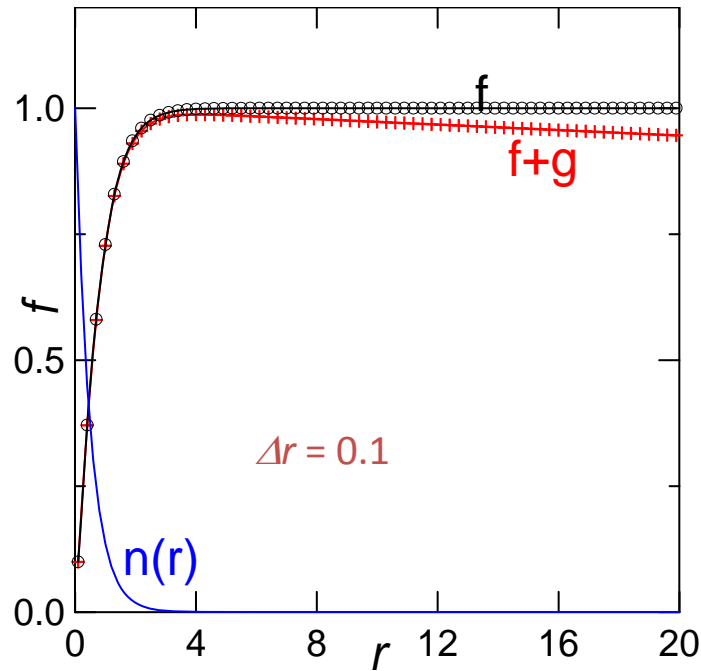
W naszym wyniku: błąd polega na niezerowej wartości a .
Skąd się ona bierze?

Trójpunktowy schemat różnicowy drugiej pochodnej dokładnie różniczkuje 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 $n(r)$

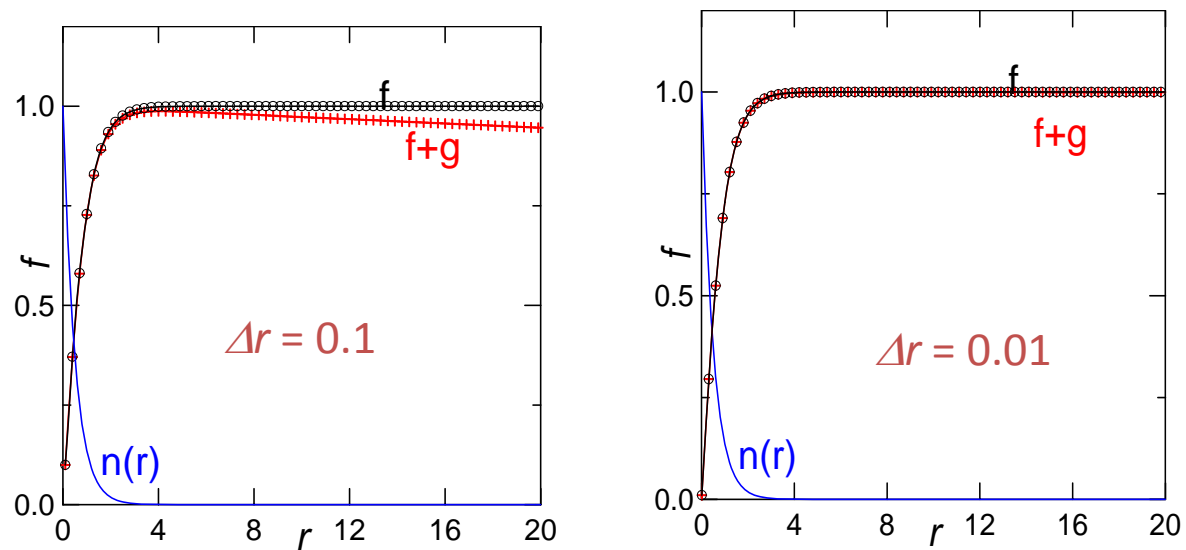


Cóż można poradzić żeby rozwiązanie numeryczne nie odklejało się od dokładnego dla dużych r ?



- 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:

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

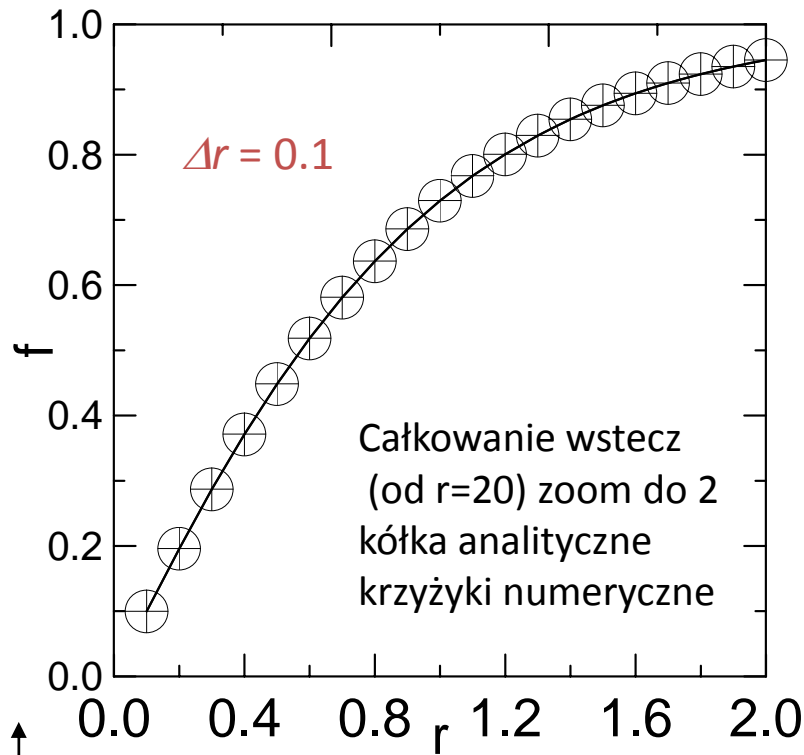
scąkujemy wstecz:

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

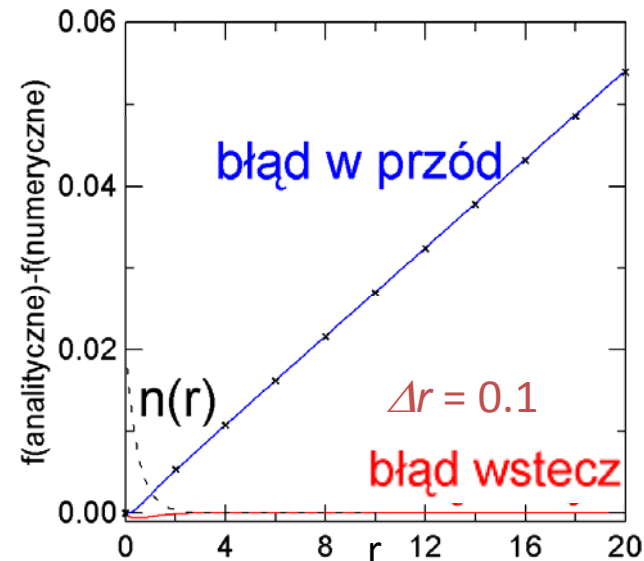
$$f_0 = 1, f_1 = \text{analityczne}$$

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

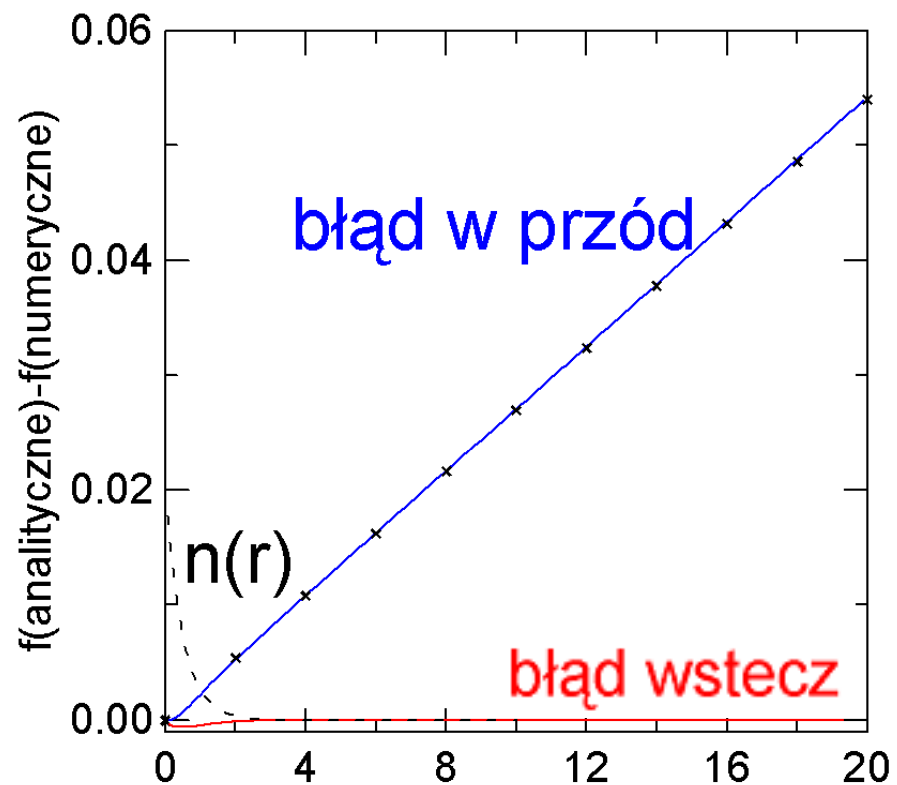
znamy potrzebne
2 wartości!



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



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

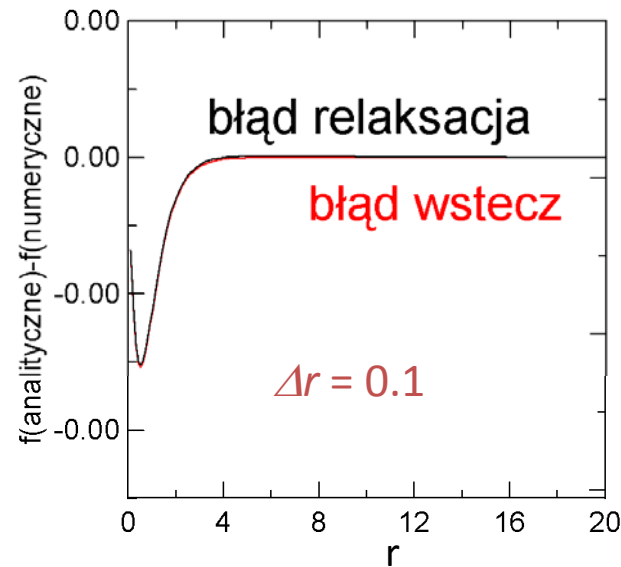
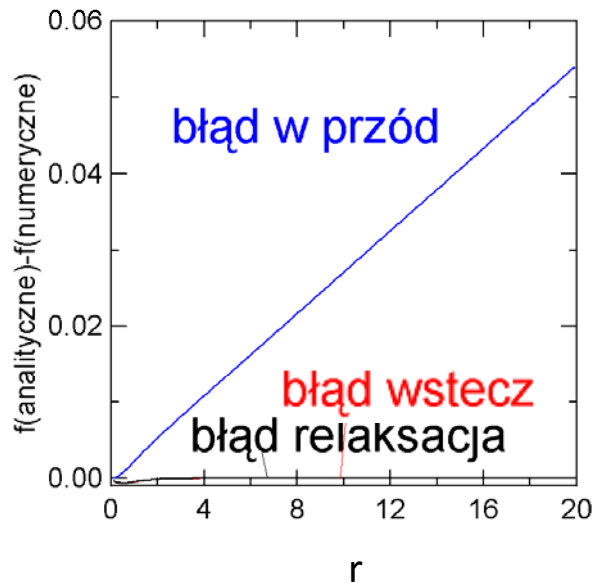
błąd pojawia się tam gdzie
ładunek, ale zbytnio nie rośnie

metoda różnic skończonych dla ustalonych WB

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

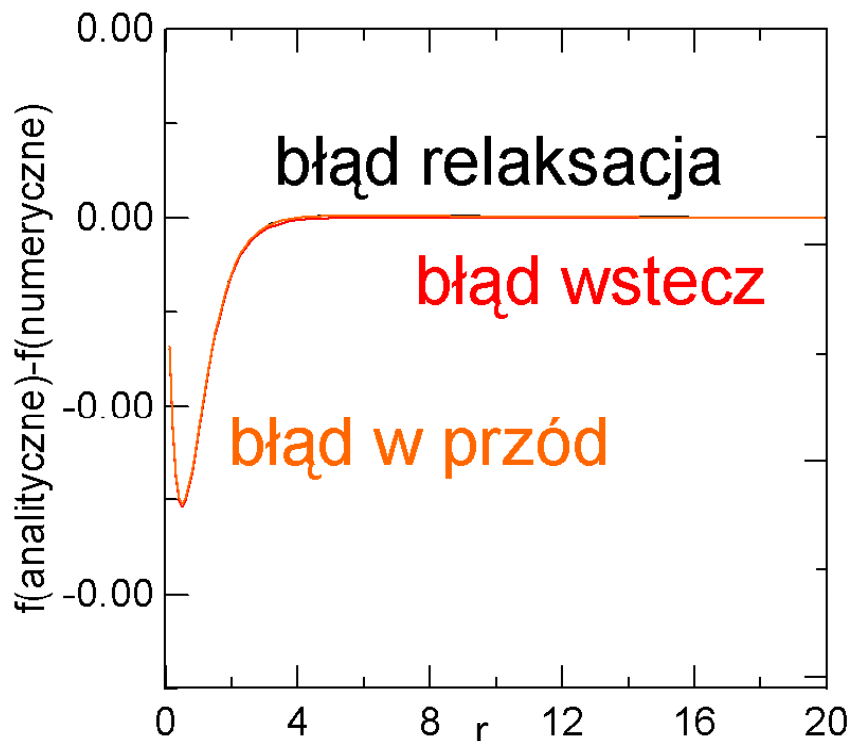
$$f_i := (f_{i+1} + f_{i-1} + 4\pi \Delta r^2 r_i n_i) / 2$$

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.
dłaczego 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:

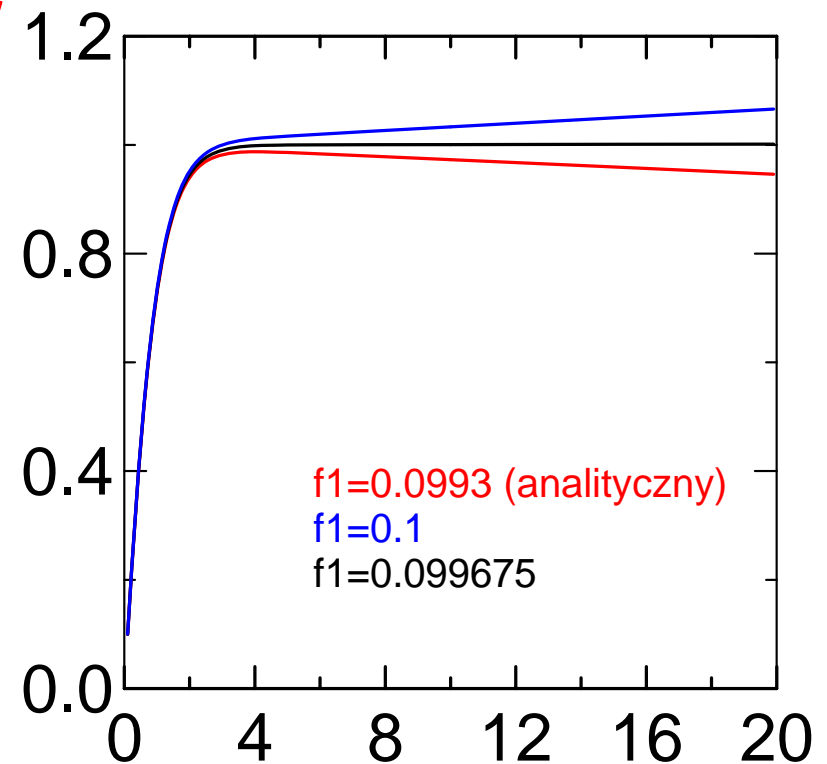
$$f_{i+1} = -4\pi r_i \Delta r^2 n_i + 2f_i - f_{i-1}$$

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

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

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:

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

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

oryginalne równanie Poissona

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

występuje pochodna – nie podejmiemy
Numerowem

srowadzone do wersji odpowiedniej dla Numerowa przez podstawienie

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

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

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

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

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

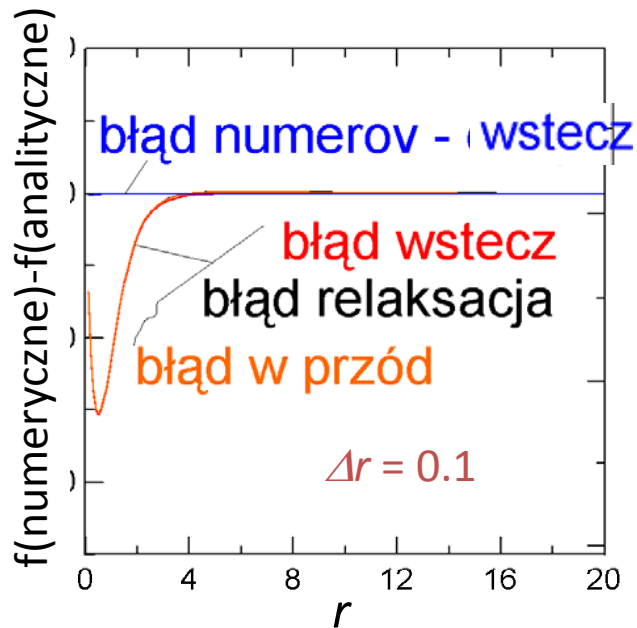
W naszym przykładzie: $g=0, S= -4\pi r n$

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:

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

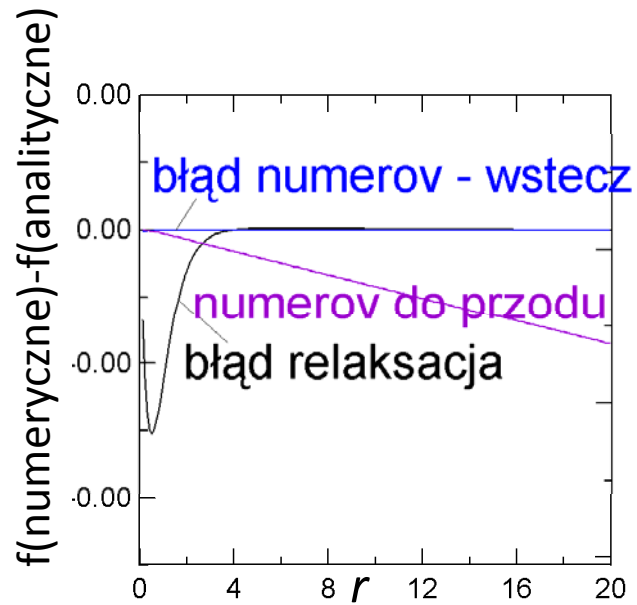


cała różnica w sposobie uwzględniania
niejednorodności (źródła)

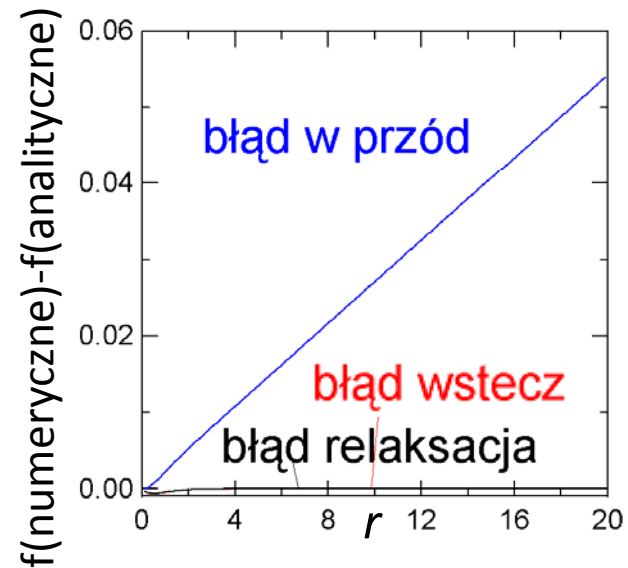
Przy tym samym skoku siatki
błąd Numerowa jest zanedbywalny w porównaniu
z błędem dyskretyzacji bezpośredniej.

$S(n)$ – 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:

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

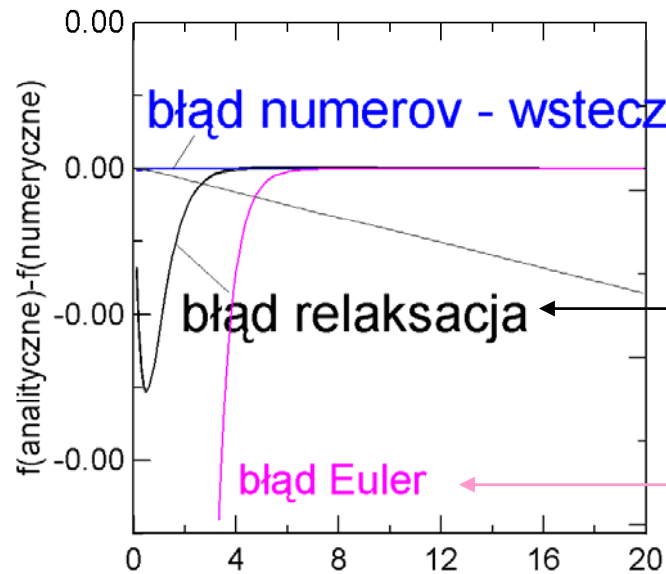


$$\begin{aligned} \frac{du}{dx} &= v \\ \frac{dv}{dx} &= S(x) - g(x)u(x) \end{aligned}$$

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

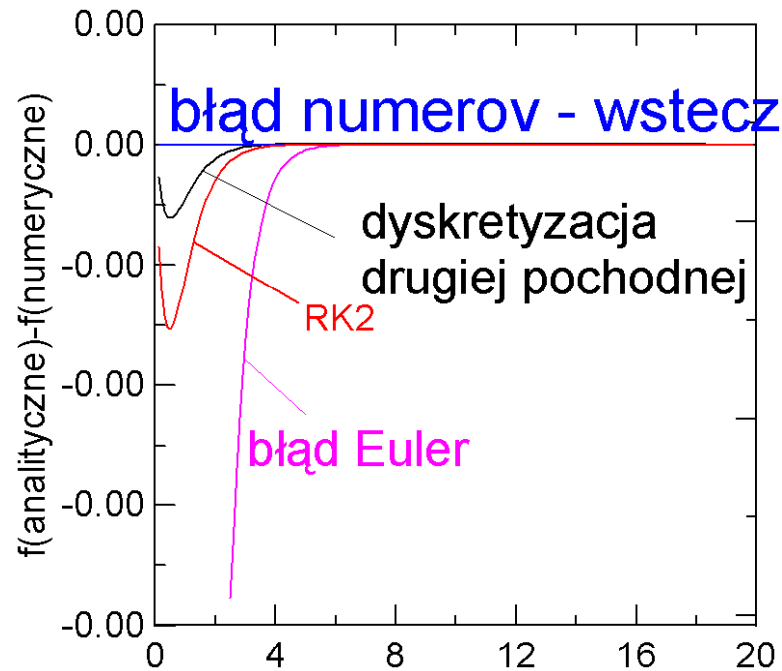
Euler $O(\Delta x^2)$

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

Numerow $O(\Delta x^6)$

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
 $O(\Delta x^4)$

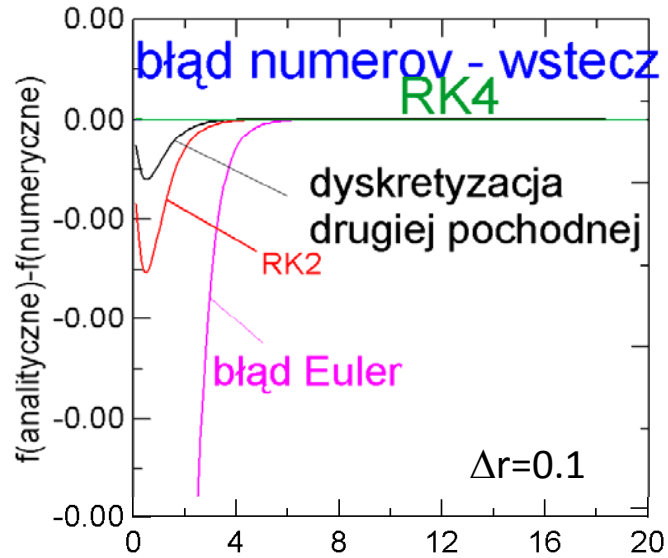
Numerow $O(\Delta x^6)$

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

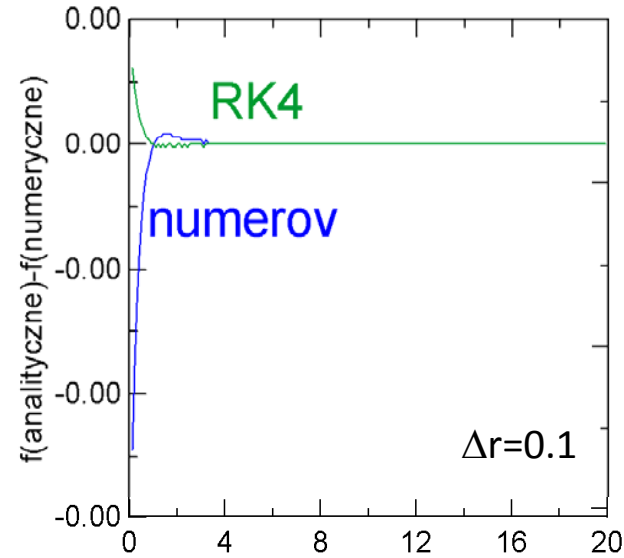
RK4: $O(\Delta x^5)$

Numerow $O(\Delta x^6)$

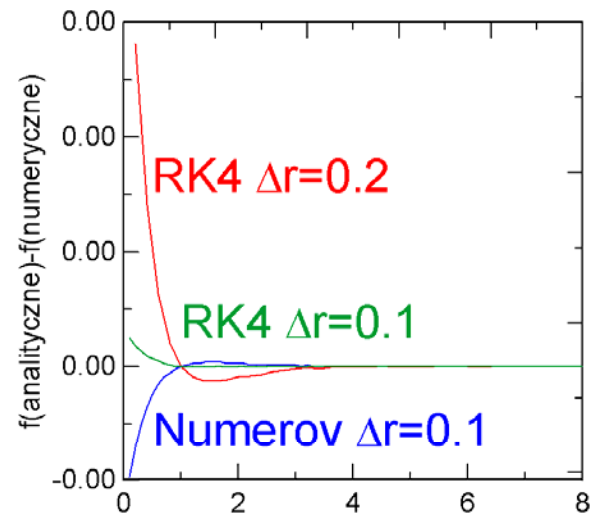
Dokładność bliska Numerowa



a nawet lepsza



Nieco słabsza od Numerowa, gdy wziąć poprawkę na wzywanie 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

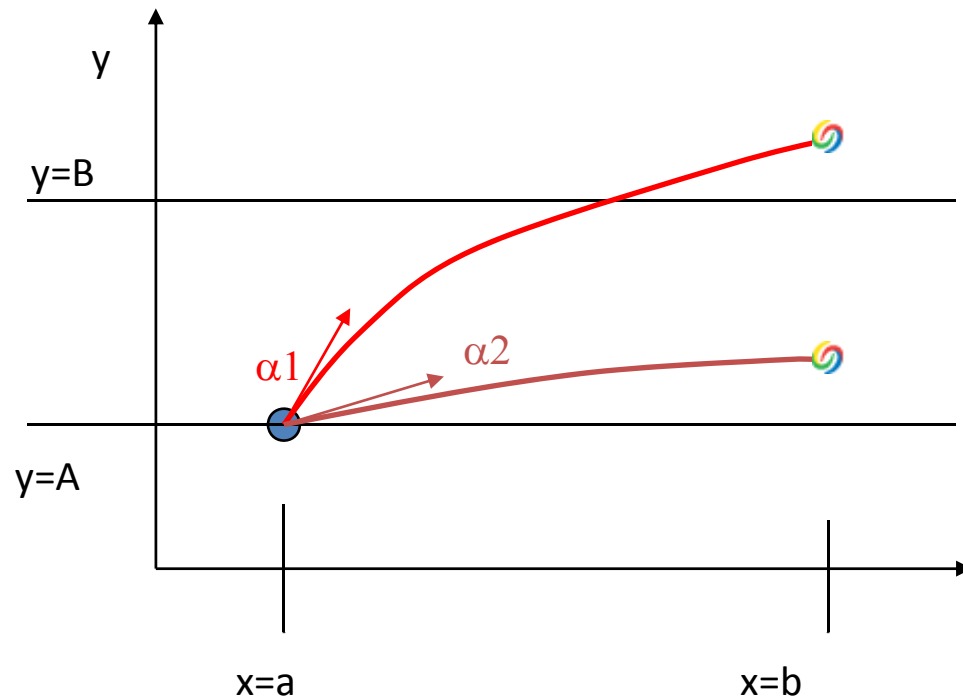
$$y_k(x) = y_k(x; \alpha)$$

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



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

$$y_1(a) = A$$

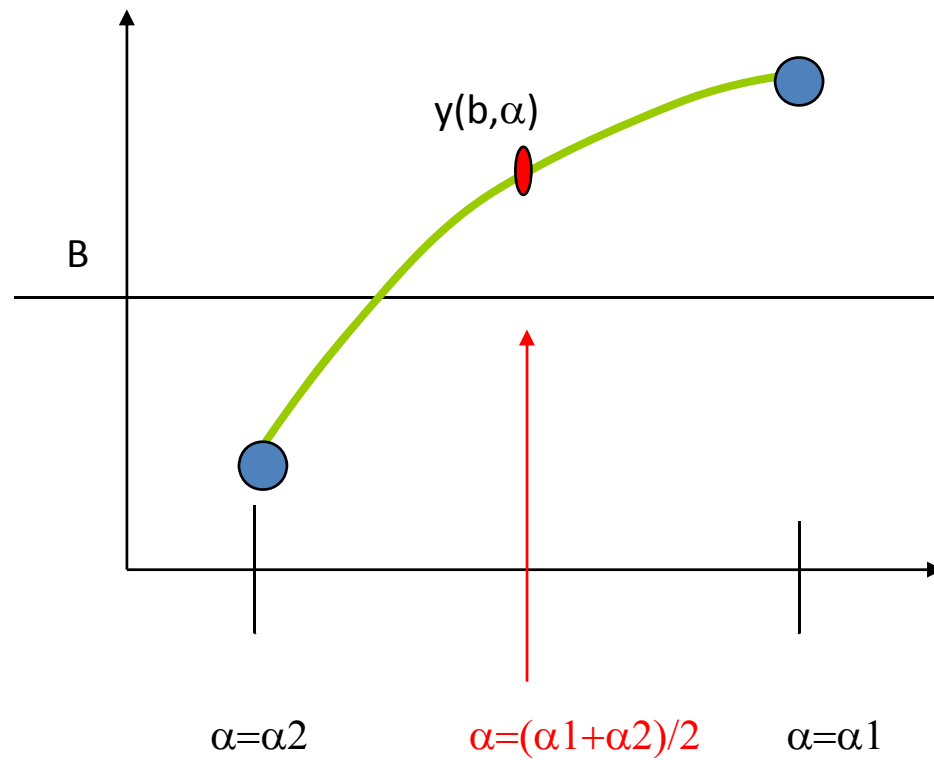
$$y_2(a) = \alpha$$

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

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

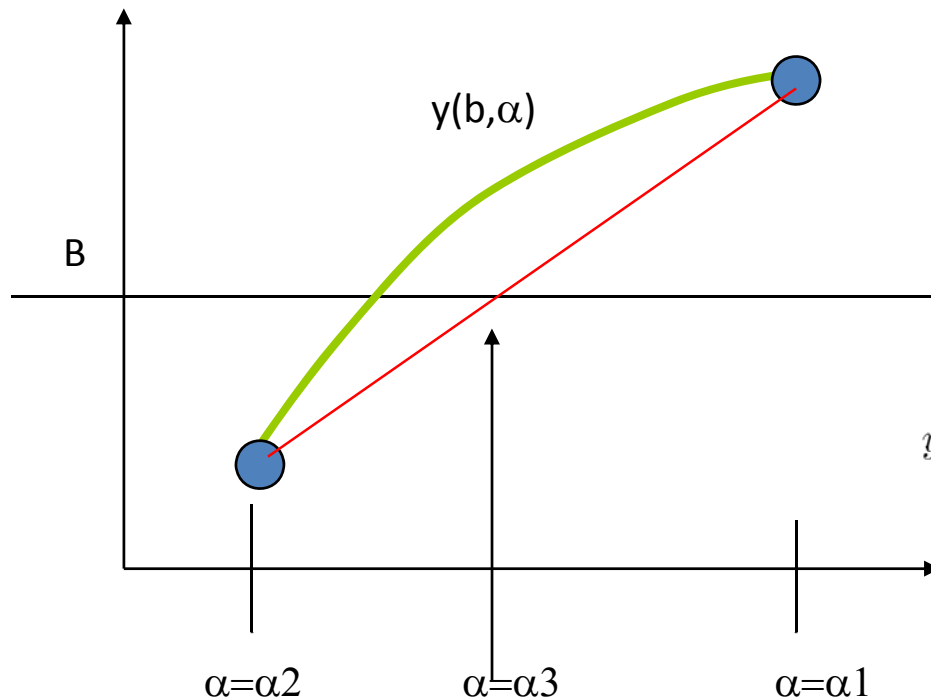


$$y_1(b; \alpha) = B$$

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 interpolacje :

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

B powinno znajdować się w

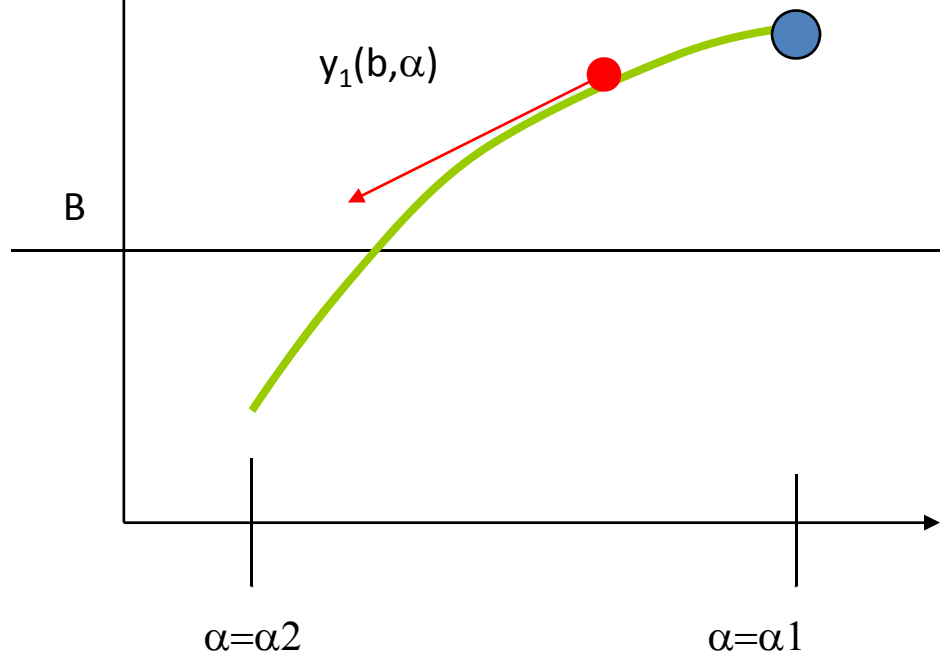
$$\alpha_3 \equiv \alpha := \frac{\alpha_2 y(b; \alpha_1) - \alpha_1 y(b; \alpha_2) + B(\alpha_1 - \alpha_2)}{y(b; \alpha_1) - y(b; \alpha_2)}$$

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

$\frac{d}{d\alpha} \frac{d}{dx} y_1(x; \alpha) = \frac{d}{d\alpha} y_2(x; \alpha)$	$z_1 = \frac{dy_1}{d\alpha}$	$z_1(a) = 0$
nazywamy:		
$\frac{d}{d\alpha} \frac{d}{dx} y_2(x; \alpha) = \frac{d}{d\alpha} f(x, y_1, y_2)$	$z_2 = \frac{dy_2}{d\alpha}$	$z_2(a) = 1$

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

**metoda strzałów z iteracją
Newtona**

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

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

różniczkujemy po α

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

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

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

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

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

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

$$z_1(a) = 0$$

stowarzyszony
problem początkowy
do rozwiązania w funkcji x

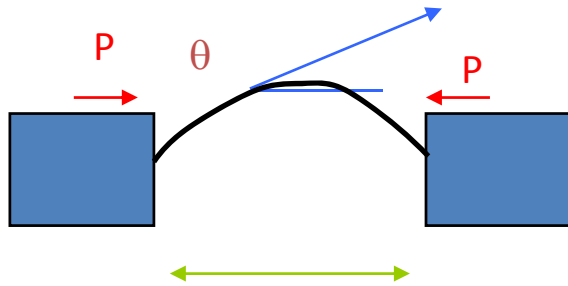
$$\frac{d}{dx} z_2(x; \alpha) = z_1 \frac{df}{dy_1} + z_2 \frac{df}{dy_2}$$

$$z_2(a) = 1$$

$z_1(x=b, \alpha)$ 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: $\frac{d^2\theta}{ds^2} + P \sin(\theta) = 0$ (problem nieliniowy)

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

przygotujemy 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

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

$$z_1(0; \alpha) = 0$$

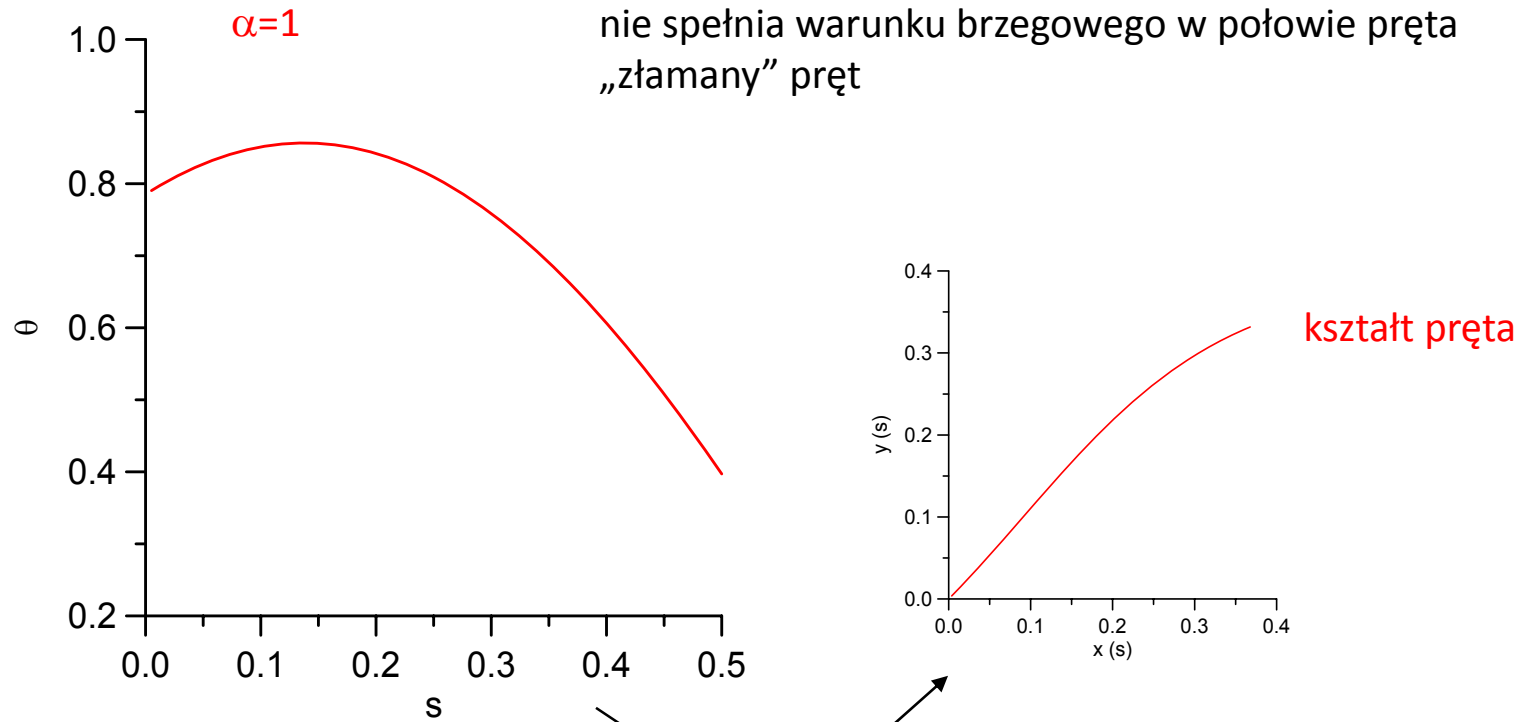
$$z_2(0; \alpha) = 1$$

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

kolejność działań:

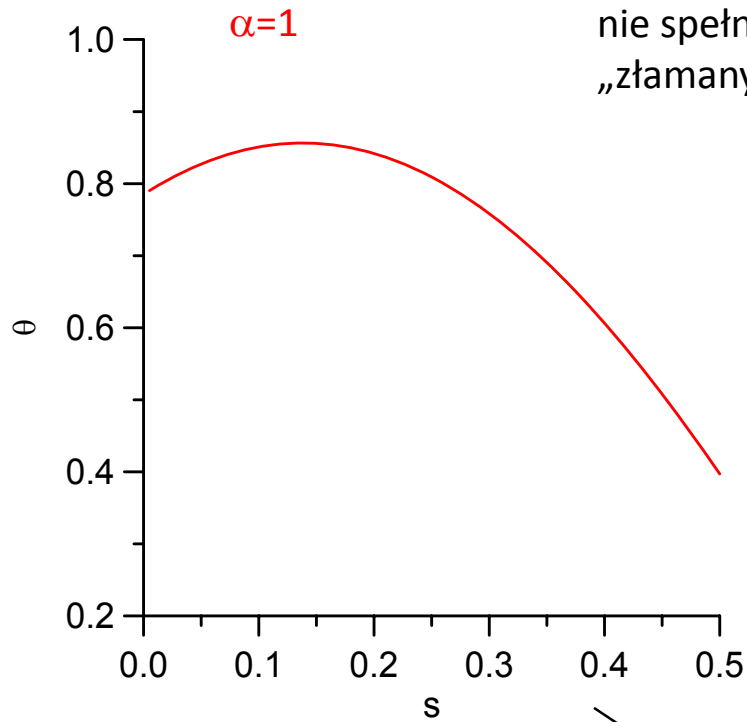
- 1) rozwiązujemy problem na y : licznik
- 2) do wyliczenia mianownika
rozwiązujemy problem na z :
[z_2' wykorzystuje policzone w 1) y_1]
- 3) znajdujemy poprawione α

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

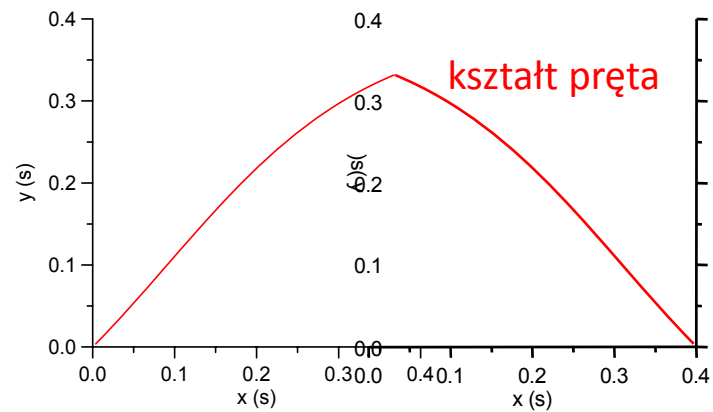


$$x(s) = \int_0^s \cos(\theta(u)) du$$
$$y(s) = \int_0^s \sin(\theta(u)) du$$

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



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

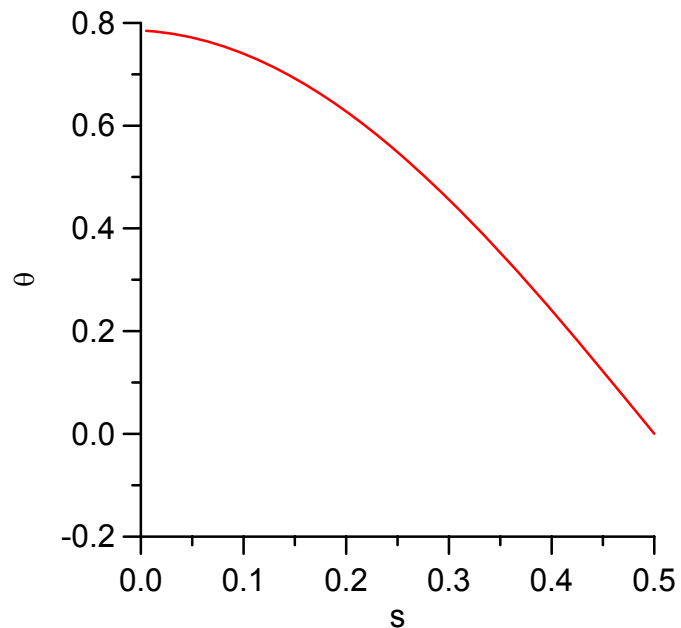
$$y(s) = \int_0^s \sin(\theta(u)) du$$

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

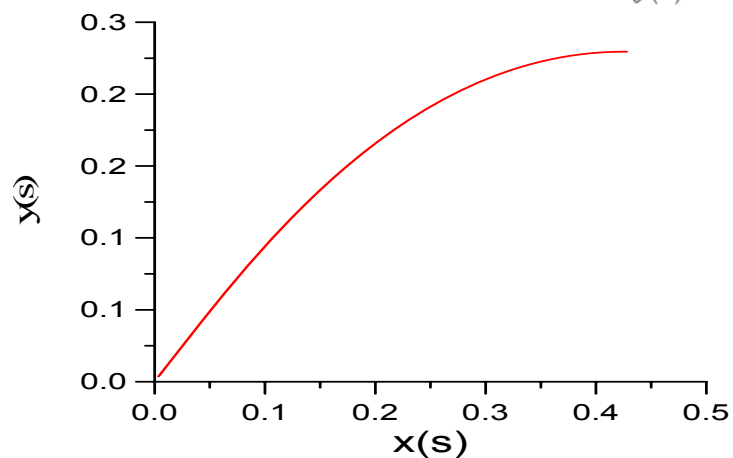
znaleźliśmy wartość parametru α która daje właściwy kształt pręta

możemy teraz sobie odległość między szczękami wyliczyć



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

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



b) metoda różnic skończonych

nadal problem nieliniowy 2-go rzędu
z warunkiem Dirichleta

$$u''(x) = f(x, u, u') \quad a < x < b$$

$$u(a) = A$$

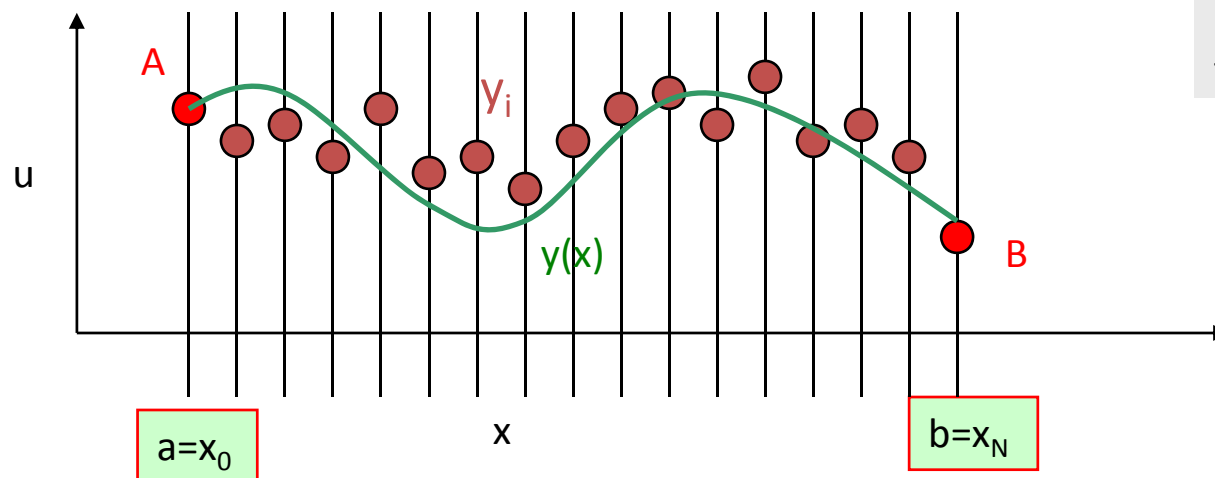
$$u(b) = B$$

przedział (a,b) dzielimy na siatkę, powiedzmy o stałym kroku:

$$\Delta x = \frac{b - a}{N}$$

punkty siatki:

$$x_i = a + \Delta x i, \quad i = 0, 1, \dots, N$$



w metodzie strzałów
używamy metod dla
problemu początkowego,
możemy sobie pozwolić
na adaptację kroku itd.
- w MRS raczej nie.

b) metoda różnic skończonych

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

zastępujemy pochodne **ilorazami różnicowymi** – problem różniczkowy sprowadzony do algebraicznego

wykorzystujemy rozwinięcie Taylora:

$$u(x + \Delta x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\Delta x)^k}{k!} \frac{d^k u(x)}{dx^k}$$

$$u(x + \Delta x) = u(x) + \Delta x \frac{du}{dx} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{\Delta x^3}{6} \frac{d^3 u}{dx^3} + \dots$$

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

← pamiętamy, że całą obciętą sumę można zastąpić wyrażeniem z k-tą pochodną policzoną gdzieś w przedziale $(x, x+\Delta x)$

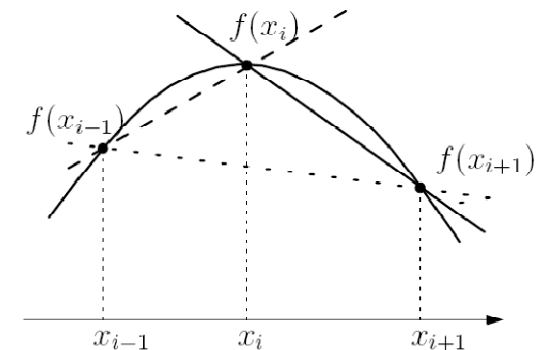
$$u'(x) = \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2} u''(\xi)$$

$$u'(x) = \frac{u(x) - u(x - \Delta x)}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{2} u''(\xi)$$

dwupunktowy przedni i wsteczny iloraz różnicowy pochodnej (widzimy, że będą dokładne dla wielomianów stopnia 1)

odjąć stronami r.T. (iloraz centralny, trójpunktowy)

$$u'(x) = \frac{u(x + \Delta x) - u(x - \Delta x)}{2\Delta x} - \frac{\Delta x^2}{6} u'''(\xi)$$



b) metoda różnic skończonych

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

iloraz centralny drugiej pochodnej:

$$\frac{u(x + \Delta x) + u(x - \Delta x) - 2u(x)}{\Delta x^2} = u''(x) + \frac{\Delta x^2}{12} u^{iv}(\xi)$$

ilorazy, które poznaliśmy wystarczą aby rozwiązać problem modelowy:

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

... lecz pozostaniemy jeszcze chwilę przy ilorazach

Wyższy iloraz różnicowy pierwszej pochodnej – wykorzystać więcej punktów

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

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

(1) minus (2) – zachowujemy wyrażenie z trzecią pochodną

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

$$u(x + 2\Delta x) = u(x) + 2\Delta x \frac{du}{dx} + 4 \frac{\Delta x^2}{2} \frac{d^2u}{dx^2} + 8 \frac{\Delta x^3}{6} \frac{d^3u}{dx^3} + O(\Delta x^4) \quad (4)$$

$$u(x - 2\Delta x) = u(x) - 2\Delta x \frac{du}{dx} + 4 \frac{\Delta x^2}{2} \frac{d^2u}{dx^2} - 8 \frac{\Delta x^3}{6} \frac{d^3u}{dx^3} + O(\Delta x^4) \quad (5)$$

(4) minus (5)

$$u(x + 2\Delta x) - u(x - 2\Delta x) = 4\Delta x \frac{du}{dx} + \frac{8}{3} \Delta x^3 \frac{d^3u}{dx^3} + O(\Delta x^5) \quad (6)$$

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

$$u(x + 2\Delta x) - u(x - 2\Delta x) = 4\Delta x \frac{du}{dx} + \frac{8}{3}\Delta x^3 \frac{d^3u}{dx^3} + O(\Delta x^5) \quad (6)$$

Wyrzucamy trzecią pochodną (6) minus 8 razy (3)

$$u(x + 2\Delta x) - u(x - 2\Delta x) - 8u(x + \Delta x) + 8u(x - \Delta x) = -12\Delta x \frac{du}{dx} + O(\Delta x^5)$$

$$\frac{du}{dx} = \frac{1}{12\Delta x} (8u(x + \Delta x) - 8u(x - \Delta x) + u(x - 2\Delta x) - u(x + 2\Delta x)) + O(\Delta x^4)$$

wyższa dokładność – informacje z kolejnych sąsiadów $u(x)$

Analiza błędu ilorazu du/dx dla jednomianów $u(x)=x^k$ czyli co oznacza $O(\Delta x^N)$?

oznacza: $C \Delta x^N u^{(N+1)}(\xi)$

wyprowadzone

C=1/2

C=1/6

$u(x)$	$u'(x)$	$\frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x} + O(\Delta x)$	$\frac{u(x + \Delta x) - u(x - \Delta x)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$	$\frac{(8u(x + \Delta x) - 8u(x - \Delta x) + u(x - 2\Delta x) - u(x + 2\Delta x))/(12\Delta x) + O(\Delta x^4)}$
x	1	1	1	1
x^2	2x	$2x + \Delta x$	2x	2x
x^3	3x ²	$3x^2 + 3x\Delta x + \Delta x^2$	$3x^2 + \Delta x^2$	3x ²
x^4	4x ³	$4x^3 + 6x^2\Delta x + 4x\Delta x^2 + \Delta x^3$	$4x^3 + 4x\Delta x^2$	4x ³
x^5	5x ⁴	$5x^4 + 10x^3\Delta x + 10x^2\Delta x^2 + 5x\Delta x^3 + \Delta x^4$	$5x^4 + 10x^2\Delta x^2 + \Delta x^4$	$5x^4 - 4\Delta x^4$

(błąd na czerwono)

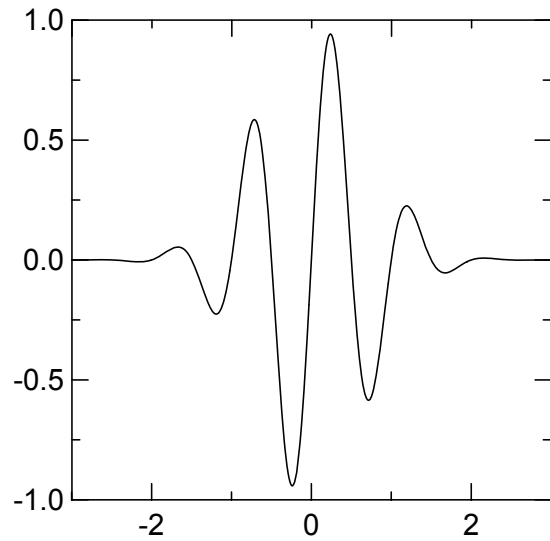
domyślamy się, że C= -1/30

$O(\Delta x^N)$ nie tylko podaje rząd zbieżności ilorazu do wartości dokładnej z Δx ,
 lecz również oznacza, że iloraz jest dokładny dla różniczkowania wielomianów rzędu N .

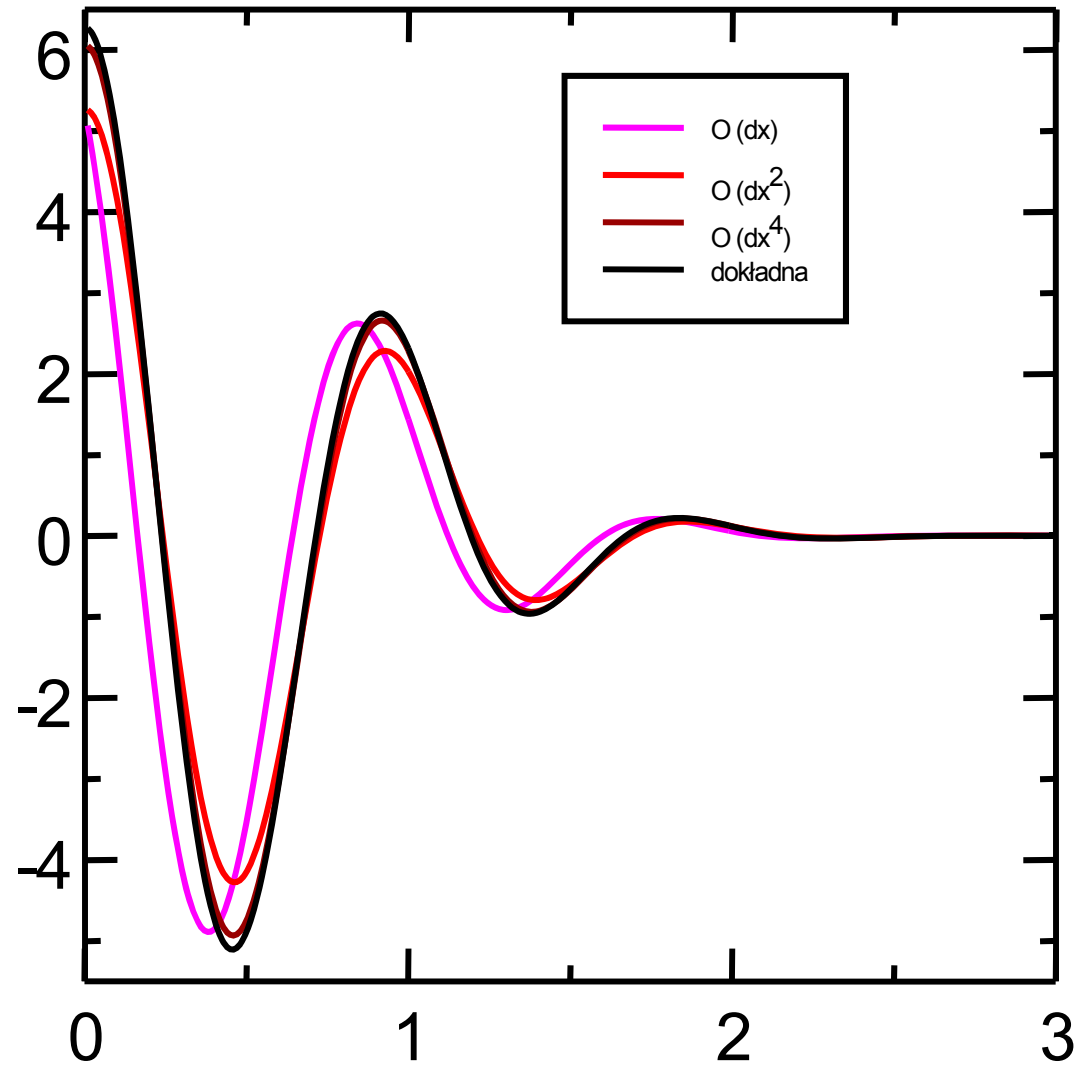
Metoda elementów skończonych = rozwiązanie lokalne dane przez wielomianowe funkcje kształtu. Liczenie analityczne pochodnych kłopotliwe, ale zbędne jeśli dobrać odpowiedni iloraz.

Przykład:

$$u(x) = \exp(-x^2) \sin(2\pi x)$$



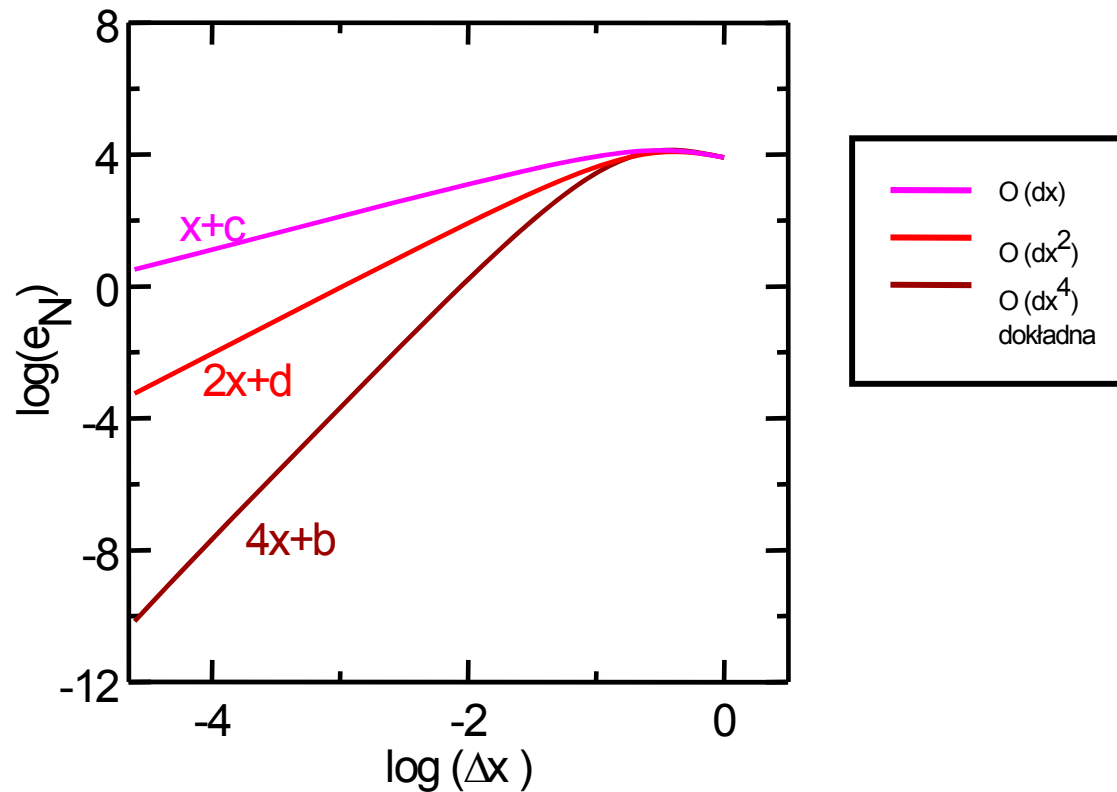
Pochodna dokładna i ilorazy dla $dx=0.15$



Zbieżność wartości pochodnej wyliczonej z ilorazu różnicowego do wartości dokładnej z $dx \rightarrow 0$.

$$e_N(\Delta x) = \sqrt{\sum_{i=-300}^{300} (u'(i \times dx) - v_N(\Delta x, i \times dx))^2}$$

$v_N(\Delta x, x)$ jest ilorazem różnicowym nominalnie rzędu $O(\Delta x^N)$



mamy dokładny wzór na pochodną!

$$\frac{du}{dx} = \frac{1}{12\Delta x} (8u(x + \Delta x) - 8u(x - \Delta x) + u(x - 2\Delta x) - u(x + 2\Delta x)) + O(\Delta x^4)$$



może wykorzystać wielopunktowy iloraz różnicowy do rozwiązania problemu Cauchy ?

$$u(n + 4) = 8u(n + 3) - 8u(n + 1) + u(n) - 12\Delta x f(n + 2)$$

$$\rho(\zeta) = z^4 - 8z^3 + 8z - 1$$

$$\rho(1)=0$$
$$\rho'(1)-\sigma(1)=0$$

spójny

$$\sigma(\zeta) = -12z^2$$

zera : $z^4 - 8z^3 + 8z - 1 = 0$: $z=+1$ (główne), 0.12 (OK.), -1 (słabo stabilny), **7.87** ☹️

niestabilny

Ilorazy drugiej pochodnej

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

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

(1) plus (2) trójpunktowy iloraz drugiej pochodnej [pojawił się już wcześniej]

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

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

Rozpisujemy do Δx^6 bo będziemy musieli wydzielić przez Δx^2

$$u(x+2\Delta x) = u(x) + 2\Delta x \frac{du}{dx} + \frac{4\Delta x^2}{2} \frac{d^2u}{dx^2} + \frac{8\Delta x^3}{6} \frac{d^3u}{dx^3} + \frac{16\Delta x^4}{24} \frac{d^4u}{dx^4} + \frac{32\Delta x^5}{120} \frac{d^5u}{dx^5} + O(\Delta x^6)$$

$$u(x-2\Delta x) = u(x) - 2\Delta x \frac{du}{dx} + \frac{4\Delta x^2}{2} \frac{d^2u}{dx^2} - \frac{8\Delta x^3}{6} \frac{d^3u}{dx^3} + \frac{16\Delta x^4}{24} \frac{d^4u}{dx^4} - \frac{32\Delta x^5}{120} \frac{d^5u}{dx^5} + O(\Delta x^6)$$

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

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

Zadanie: zlikwidować piątą, czwartą i trzecią pochodną. Piątą i trzecią wyrzucimy dodając wzory parami

$$u(x+2\Delta x) + u(x-2\Delta x) = 2u(x) + \frac{8\Delta x^2}{2} \frac{d^2u}{dx^2} + \frac{32\Delta x^4}{24} \frac{d^4u}{dx^4} + O(\Delta x^6)$$

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

Drugą sumę przemnożyć przez 16, odjąć od tego pierwszą, wyliczyć drugą pochodną, wynik:

$$\frac{d^2u}{dx^2} = \frac{16u(x+\Delta x) + 16u(x-\Delta x) - u(x+2\Delta x) - u(x-2\Delta x) - 30u(x)}{12\Delta x^2} + O(\Delta x^4)$$

Wyższe ilorazy drugiej pochodnej cd.

$$\frac{d^2u}{dx^2} = \frac{1}{\Delta x^2} \sum_{n=-N}^N c_n u(x + n\Delta x) + O(\Delta x^{2N})$$

N	c_0	$c_{\pm 1}$	$c_{\pm 2}$	$c_{\pm 3}$	$c_{\pm 4}$	$c_{\pm 5}$	$c_{\pm 6}$
1	-2	1					
2	-5/2	4/3	-1/12				
3	-49/18	3/2	-2/20	1/90			
4	-205/72	8/5	-1/5	8/315	-1/560		
5	-5269/1800	5/3	-5/21	5/126	-5/1008	1/3150	
6	-5369/1800	12/7	-15/56	10/189	-1/112	2/1925	-1/16632

ilorazy na nierównomiernej siatce

Iloraz różnicowy pochodnej dla nierównej siatki:



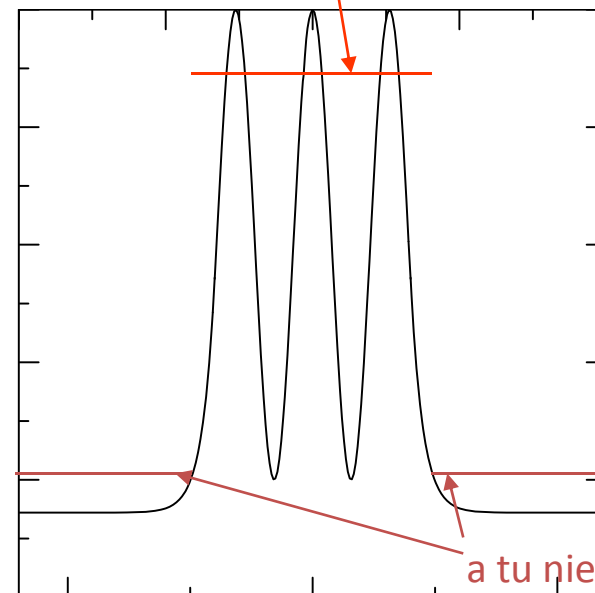
$$u(x + \Delta p) = u(x) + \Delta p \frac{du}{dx} + \frac{\Delta p^2}{2} \frac{d^2u}{dx^2} + \frac{\Delta p^3}{6} \frac{d^3u}{dx^3} + O(\Delta p^4)$$

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

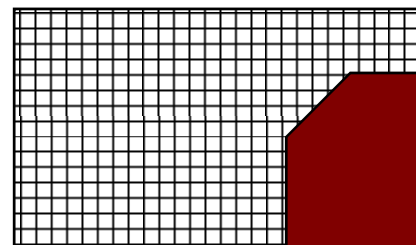
każdy z tych wzorów wygeneruje nam
iloraz pochodnej rzędu $O(\Delta x)$

na siatce równomiernej potrafiliśmy wygenerować
iloraz $O(\Delta x^2)$ korzystając z obydwu sąsiadów
= wycinaliśmy wyrażenie z $u''(x)$ odejmując stronami
teraz się nie uda!

Tutaj dużo się dzieje
(gęstsza siatka przydałaby się)



przydatne również:
2 i więcej D
brzegi nieregularne



Iloraz różnicowy drugiej pochodnej dla nierównej siatki:

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

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

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



Wzór trójpunktowy

tracimy jeden rząd
dokładności w porównaniu
z siatką równomierną

Metoda różnic skończonych działa najkorzystniej na równomiernej siatce.

Zazwyczaj nie stać nas (i nie tylko nas) na równomierną siatkę w 3D.

Często wyklucza to MRS w realnych zastosowaniach.

wracamy do metody RS

$$u(a) = A$$

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

$$u(b) = B$$

$$\Delta x = \frac{b-a}{N}$$

$$x_i = a + \Delta x i, \quad i = 0, 1, \dots, N$$

problem algebraiczny:

$$\frac{u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i}{\Delta x^2} = f\left(x_i, u_i, \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x}\right) \quad \text{dla } i=1, \dots, N-1$$

$$u_0=A, u_N=B$$

problem jest zbyt ogólny dla rozważań wstępnych,
zauważmy uwagę do problemu liniowego:

$$u''(x) = -p(x)u'(x) - q(x)u(x) + r(x)$$

$$u''(x) = -p(x)u'(x) - q(x)u(x) + r(x) \quad u(a) = A$$

$$u(b) = B$$

wersja zdyskretyzowana:

$$\frac{u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i}{\Delta x^2} + p_i \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + q_i u_i - r_i = 0$$

$$\mathcal{L}u(x) = 0 \quad \text{równanie różniczkowe}$$

$$\mathcal{L}_{\Delta x} u_i = 0 \quad \text{jego przybliżenie algebraiczne}$$

błąd dyskretyzacji metody różnic skończonych w punkcie x_i (przypomnienie definicji dla RRZ)

$$\tau_i = \mathcal{L}_{\Delta x} u(x_i)$$

błąd dyskretyzacji w przypadku równania liniowego:

$$\tau_i = \frac{u(x_{i+1}) + u(x_{i-1}) - 2u(x_i)}{\Delta x^2} + p_i \frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1})}{2\Delta x} + q_i u(x_i) - r_i$$

szacujemy błąd dyskretyzacji

$$\tau_i = \frac{u(x_{i+1}) + u(x_{i-1}) - 2u(x_i)}{\Delta x^2} + p_i \frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1}))}{2\Delta x} + q_i u(x_i) - r_i$$

wiedząc, że:

$$\frac{u(x + \Delta x) + u(x - \Delta x) - 2u(x)}{\Delta x^2} = u''(x) + \frac{\Delta x^2}{12} u^{iv}(\xi)$$

$$u'(x) = \frac{u(x + \Delta x) - u(x - \Delta x)}{2\Delta x} - \frac{\Delta x^2}{6} u'''(\xi)$$

$$\tau_i = u''(x_i) - \frac{\Delta x^2}{12} u^{iv}(\xi) + p(x_i) \left(u'(x_i) + \frac{\Delta x^2}{6} u'''(\xi_1) \right) + q(x_i)u(x_i) - r(x_i)$$

$$u''(x) = -p(x)u'(x) - q(x)u(x) + r(x)$$

$$\tau_i = \pm \frac{\Delta x^2}{12} u^{iv}(\xi) + p(x_i) \frac{\Delta x^2}{6} u'''(\xi_1)$$

użyliśmy ilorazów
dokładności Δx^2
błąd dyskretyzacji tego samego
rzędu

można pozbyć się pierwszego i ostatniego równania

$$b_i u_{i-1} + a_i u_i + c_i u_{i+1} = \Delta x^2 r_i$$

$i=1$

$$a_1 u_1 + c_1 u_2 = \Delta x^2 r_1 - b_1 A$$

$i=N-1$

$$b_{N-1} u_{N-2} + a_{N-1} u_{N-1} = \Delta x^2 r_{N-1} - c_{N-1} B$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_1 & c_1 & & & & & \\ & b_2 & a_2 & c_2 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & & b_{N-2} & a_{N-2} & c_{N-2} \\ & & & & & b_{N-1} & a_{N-1} \end{pmatrix}$$

najlepiej zamiast np. eliminacji Gaussa
rozwiązać problem algorytmem trójprzekątniowym

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} \Delta x^2 r_1 - b_1 A \\ \Delta x^2 r_2 \\ \Delta x^2 r_3 \\ \vdots \\ \Delta x^2 r_{N-1} - c_{N-1} B \end{pmatrix}$$

zmodyfikowane wg wzoru

dla $n=N-1$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_1 & c_1 & & & & \\ b_2 & a_2 & c_2 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & b_n & a_n & c_n \end{pmatrix}$$

rozwiązać $\mathbf{A}\mathbf{u}=\mathbf{f}$

dekompozycja

$$\mathbf{A}=\mathbf{L}\mathbf{U}$$
$$\mathbf{L}\mathbf{U}\mathbf{u}=\mathbf{f}$$

$$\mathbf{U}\mathbf{u}=\mathbf{z}$$
$$\mathbf{L}\mathbf{z}=\mathbf{f}$$

$$z_1 = f_1$$

$$z_2 = f_2 - \beta_2 z_1$$

\vdots

$$z_i = f_i - \beta_i z_{i-1}$$

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ \beta_2 & 1 & & & & \\ & \beta_3 & 1 & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & \beta_n & 1 & \end{bmatrix}, \quad \mathbf{U} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \gamma_1 & & & & \\ & \alpha_2 & \gamma_2 & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & \alpha_{n-1} & \gamma_{n-1} & \\ & & & & \alpha_n & \end{bmatrix}$$

$$u_n = z_n / \alpha_n$$
$$u_{n-1} = \frac{z_{n-1} - \gamma_{n-1} u_n}{\alpha_{n-1}}$$

itd..

$$\gamma_i = c_i$$

$$\alpha_1 = a_1,$$

$$\beta_i = b_i / \alpha_{i-1}$$

$$\alpha_i = a_i - \beta_i \gamma_{i-1}$$

5n mnożeń / dzieleń
3n dodawań / odejmowań

podczas gdy eliminacja Gaussa
 $n^3/3$ operacji

Błąd globalny dla dwupunktowego problemu brzegowego

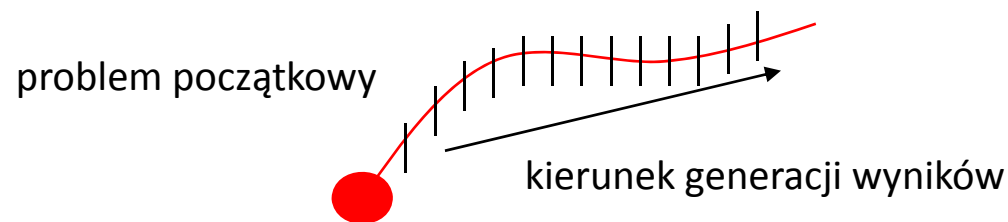
definiowany (jak dla problemów początkowych) jako odchylenie od wartości dokładnej

w problemie początkowym = widzieliśmy akumulację błędów lokalnych,
w której wyniku rzęd błędu globalnego był mniejszy o jeden niż błędu lokalnego

lokalny := $O(dt^n)$ (w jednym kroku)

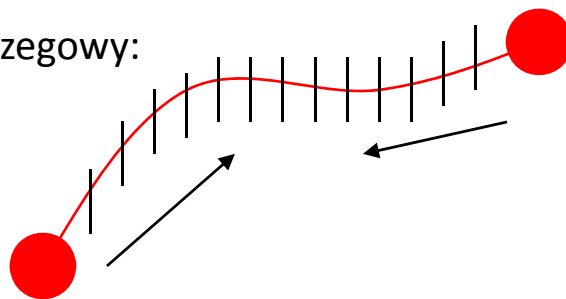
globalny w chwili t := zakumulowany w N krokach, gdzie $N=t/dt$

$O(dt^n) t/dt$ daje błąd globalny rzędu $O(dt^{n-1})$



jak jest w problemie brzegowym? Czy następuje akumulacja błędu od brzegów??

problem brzegowy:



wartości z wewnątrz obszaru całkowania
wyliczane przy zafiksowanych
wartościach na obydwu końcach przedziału

warunki brzegowe przenoszone do wewnątrz
obszaru całkowania.

czy punkt ze środka jest policzony z gorszą (o jeden rząd dokładnością) niż punkt z brzegu ???

Problem akumulacji błędu.

Rząd błędu globalnego w zagadnieniu brzegowym

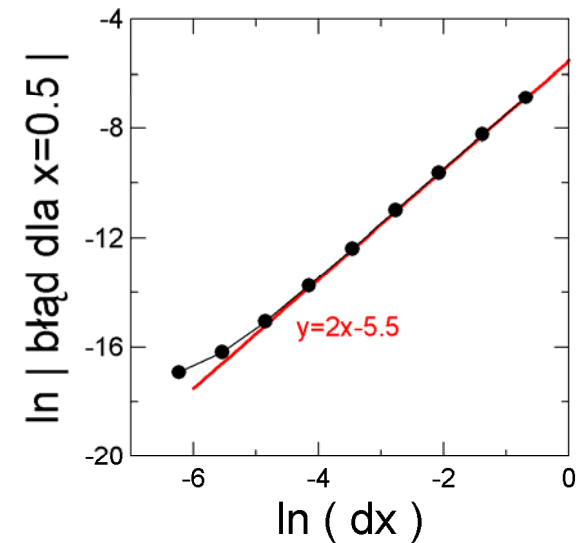
[ten sam czy niższy niż błąd lokalny ?] – eksperyment numeryczny

$$u''(x)=u, u(0)=0, u(1) \rightarrow u(x)=\sinh(x)/\sinh(1), \sinh(x)=(\exp(x)-\exp(-x))/2$$

rachunek na $N=2^{j+1}$ punktach z $\Delta x=1/N, j=1,9$

stosujemy iloraz centralny z błędem lokalnym $O(\Delta x^2)$

widzimy, że błąd globalny
jest również rzędu 2
odchylenie = tam gdzie błędy arytmetyki



wniosek: dla problemu brzegowego (dla zmiennej przestrzennej)

błąd globalny jest tego samego rzędu co błąd lokalny → nie ma akumulacji błędu dla przestrzennych stopni swobody (błędy akumulują się tylko z t)

ważne dla r.r. cząstkowych z $(x$ oraz $t)$: błędy w t się akumulują, w x nie:
większa dokładność będzie wymagana dla t niż dla x

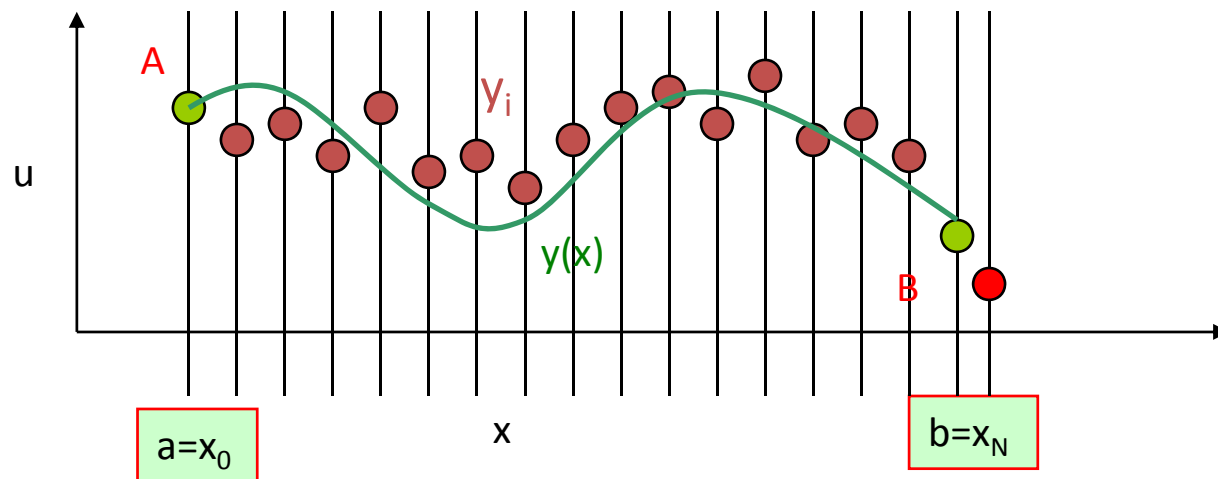
mieszany WB (Robina) dla równania liniowego

$$u''(x) = -p(x)u'(x) - q(x)u(x) + r(x)$$

$$\begin{aligned} u(a) &= A \\ u'(b) + Cu(b) &= B \end{aligned}$$

pochodna z w prawym brzegu: mamy dostępne tylko punkty na lewo od niego:

- 1) możemy zastosować wsteczną pochodną,
ale – wprowadzimy w ten sposób błąd $O(\Delta x)$ do całego rachunku
- 2) możemy zastosować wzór wsteczny z 3-ma punktami,
ale – zakłócimy trójkątną strukturę problemu
- 3) wyjście – fikcyjny punkt u_{N+1} w $b+\Delta x$



$$u(a) = A$$

$$u'(b) + Cu(b) = B$$

fikcyjny

WB: $\frac{u_{N+1} - u_{N-1}}{2\Delta x} + Cu_N = B$

równanie na punkt ostatni z punktem fikcyjnym

$$b_N u_{N-1} + a_N u_N + c_N u_{N+1} = \Delta x^2 r_N$$

fikcyjny punkt eliminowany z WB

$$u_{N+1} = 2B\Delta x - C2\Delta x u_N + u_{N-1}$$

do równania:

$$\frac{(b_N + c_N)u_{N-1} + (a_N - 2Cc_N\Delta x)u_N = \Delta x^2 r_N - 2Bc_N\Delta x}{2}$$

2

$$A = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ a_1 & c_1 & & & & & & \\ b_2 & a_2 & c_2 & & & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & & b_{N-1} & a_{N-1} & c_{N-1} & & \\ & & & & 2 & a_N - 2\Delta x C c_n & & \end{pmatrix}$$

p. trójp.

$$f = \begin{pmatrix} \Delta x^2 r_1 - b_1 A \\ \Delta x^2 r_2 \\ \Delta x^2 r_3 \\ \vdots \\ \Delta x^2 r_N - 2Bc_N\Delta x \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ a_1 & c_1 & & & & & \\ b_2 & a_2 & c_2 & & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & b_{N-1} & a_{N-1} & c_{N-1} & \\ & & & & 2 & a_N - 2\Delta x C c_n & \end{pmatrix} \quad \text{p. trójp.} \quad \mathbf{f} = \begin{pmatrix} \Delta x^2 r_1 - b_1 A \\ \Delta x^2 r_2 \\ \Delta x^2 r_3 \\ \vdots \\ \Delta x^2 r_N - 2B c_N \Delta x \end{pmatrix}$$

uwaga: dla Dirichleta – modyfikujemy prawą stronę (tzw. naturalny wb)
: dla Neumanna i Robina – modyfikujemy macierz A (tzw. istotny wb)

problem algebraiczny z dyskretyzacji równania nieliniowego

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

układ równań nieliniowych:

$$F_i(\mathbf{u}) = u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1} - \Delta x^2 f\left(x_i, u_i, \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x}\right) = 0$$

metoda Newtona dla układu równań: $\mathbf{F}_{\mathbf{u}}(\mathbf{u}^{(\mu)}) \left(\mathbf{u}^{(\mu+1)} - \mathbf{u}^{(\mu)} \right) = -\mathbf{F}(\mathbf{u}^{(\mu)})$

$$\mathbf{F}_{\mathbf{u}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial u_1} & \frac{\partial F_1}{\partial u_2} & \cdots & \frac{\partial F_1}{\partial u_N} \\ \frac{\partial F_2}{\partial u_1} & \frac{\partial F_2}{\partial u_2} & \cdots & \frac{\partial F_2}{\partial u_N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_N}{\partial u_1} & \frac{\partial F_N}{\partial u_2} & \cdots & \frac{\partial F_N}{\partial u_N} \end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial u_j} = \left(1 + \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial f}{\partial u'} \right) \delta_{i,j+1} + \left(-2 - \Delta x^2 \frac{\partial f}{\partial u} \right) \delta_{i,j} + \left(1 - \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial f}{\partial u'} \right) \delta_{i,j-1}$$

funkcja i pochodne
liczone w

$$\left(x_i, u_i^\mu, \frac{u_{i+1}^\mu - u_{i-1}^\mu}{2\Delta x} \right)$$

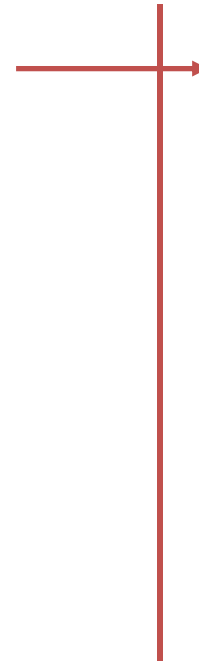
$$\mathbf{F}_{\mathbf{u}}(\mathbf{u}^{(\mu)}) \left(\mathbf{u}^{(\mu+1)} - \mathbf{u}^{(\mu)} \right) = -\mathbf{F}(\mathbf{u}^{(\mu)})$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial u_j} = \left(1 + \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial f}{\partial u'} \right) \delta_{i,j+1} + \left(-2 - \Delta x^2 \frac{\partial f}{\partial u} \right) \delta_{i,j} + \left(1 - \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial f}{\partial u'} \right) \delta_{i,j-1}$$

$$c_i^\mu = \left(1 - \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial f}{\partial u'} \left(x_i, u_i^\mu, \frac{u_{i+1}^\mu - u_{i-1}^\mu}{2\Delta x} \right) \right)$$

$$a_i^\mu = - \left(2 + \Delta x^2 \frac{\partial f}{\partial u} \left(x_i, u_i^\mu, \frac{u_{i+1}^\mu - u_{i-1}^\mu}{2\Delta x} \right) \right)$$

$$b_i^\mu = \left(1 + \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial f}{\partial u'} \left(x_i, u_i^\mu, \frac{u_{i+1}^\mu - u_{i-1}^\mu}{2\Delta x} \right) \right)$$



w każdej iteracji Newtona układ równań z macierzą trójkątną do rozwiązania

Przykład: - problem pręta w imadle: zmieniamy oznaczenia $s \rightarrow x$, $\theta \rightarrow u$

$$\frac{d^2 u}{dx^2} = f(x, u, u') = -P \sin(u)$$

$$u(0) = -u(1) = \beta, u(1/2) = 0$$

u – na siatce od 0 do $\frac{1}{2}$

wzory ogólne: $F_i(\mathbf{u}) = u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1} - \Delta x^2 f(x_i, u_i, \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x}) = 0$

$$\mathbf{F}_{\mathbf{u}}(\mathbf{u}^{(\mu)}) \left(\mathbf{u}^{(\mu+1)} - \mathbf{u}^{(\mu)} \right) = -\mathbf{F}(\mathbf{u}^{(\mu)})$$

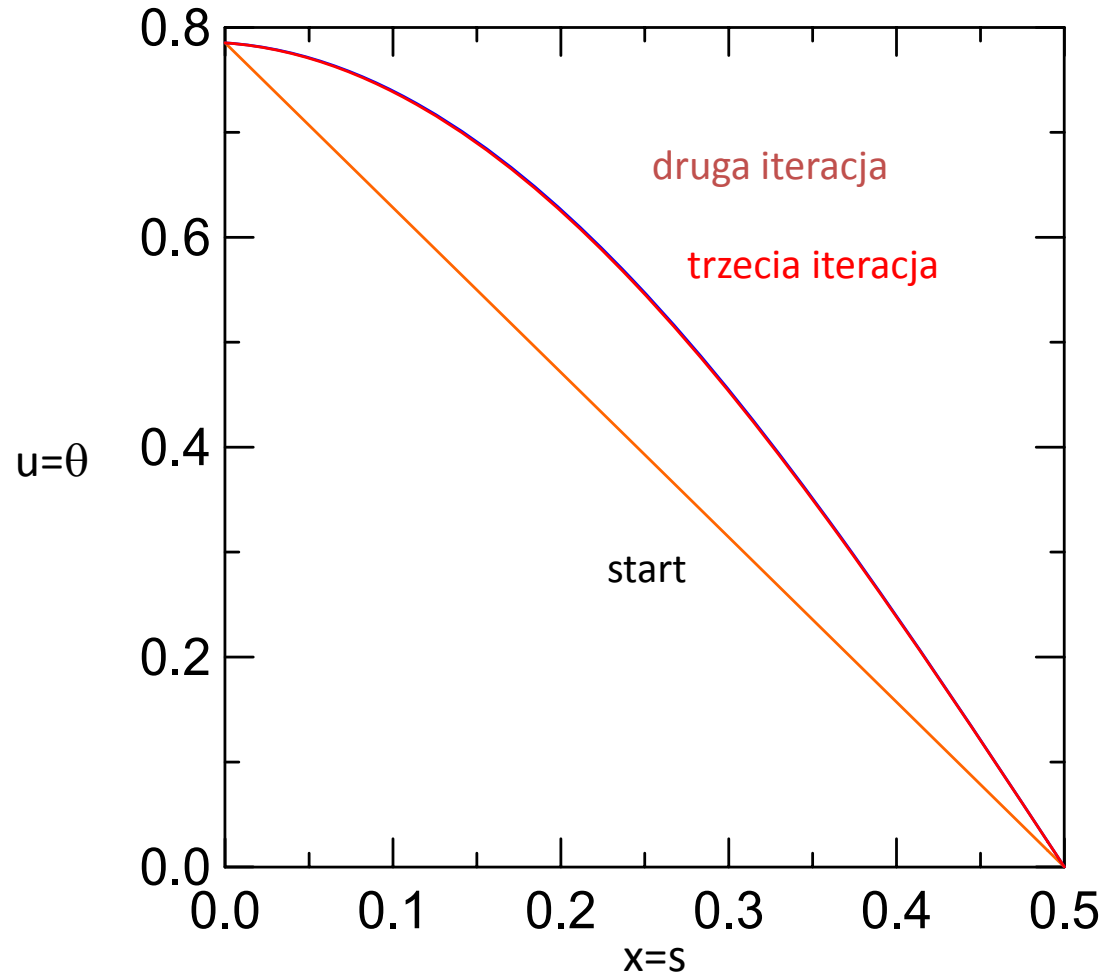
$$c_i^\mu = \left(1 - \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial f}{\partial u'}(x_i, u_i^\mu, \frac{u_{i+1}^\mu - u_{i-1}^\mu}{2\Delta x}) \right) \quad 1$$

$$a_i^\mu = - \left(2 + \Delta x^2 \frac{\partial f}{\partial u}(x_i, u_i^\mu, \frac{u_{i+1}^\mu - u_{i-1}^\mu}{2\Delta x}) \right) \quad a_i^\mu = -2 + P\Delta x^2 \cos(u_i)$$

$$b_i^\mu = \left(1 + \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial f}{\partial u'}(x_i, u_i^\mu, \frac{u_{i+1}^\mu - u_{i-1}^\mu}{2\Delta x}) \right) \quad 1$$

Przykład: - problem pręta w imadle

Wyniki



Przykład: - problem pręta w imadle

Wyniki

