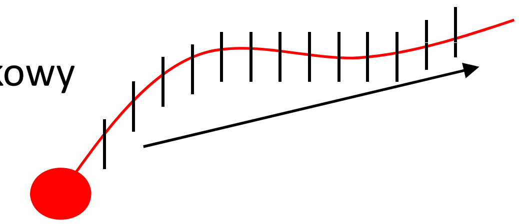
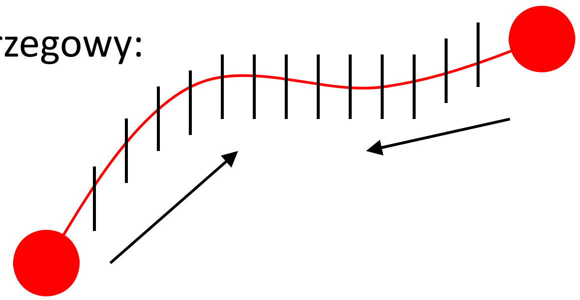
Równania różniczkowe zwyczajne: problem brzegowy [1D]

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

problem początkowy



problem brzegowy:



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)*:

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

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

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

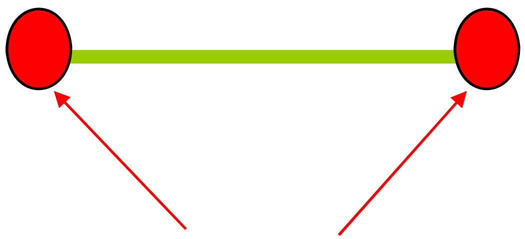
$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x)$$

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.

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

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



Brzeg w 1D: 2 punkty

warunki brzegowe w 1D:

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

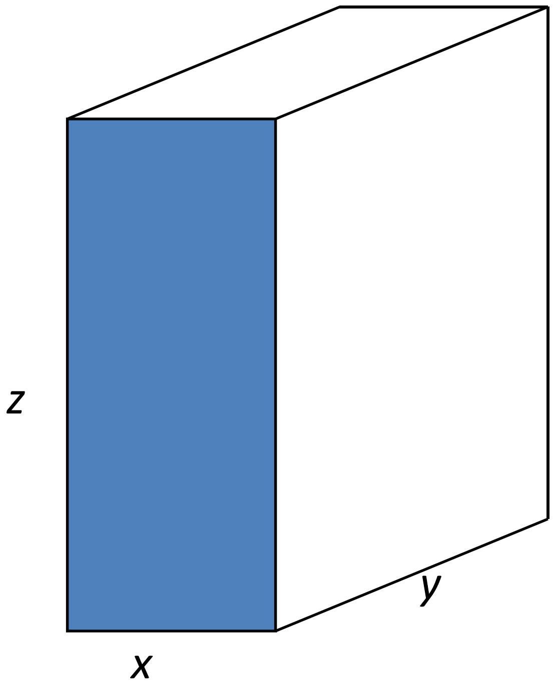
1) na wartość funkcji (Dirichleta) *u(0)=a, u(L)=b*
2) na pochodną funkcji (Neumanna) *u'(0)=a, u'(L)=b*
3) mieszane (Robina) *u(0)+cu'(0)=a, u(L)+du'(L)=b*

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 kąpieli cieplnej



układ jednorodny i rozległy w (*y*,*z*)

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

interesuje nas rozkład potencjału w środku układu

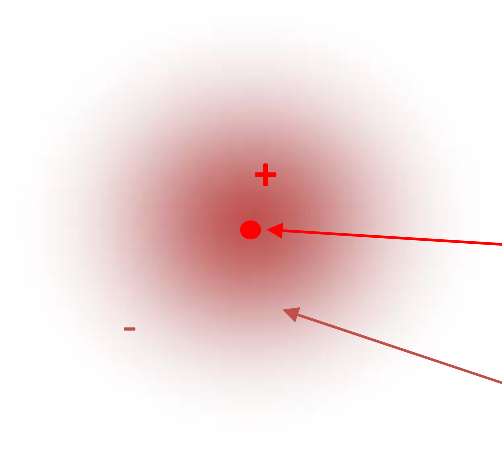
$$u(x,y,z) = u(x)$$

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

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: $p(r)=+\delta^3(r)$ (jednostki atomowe)

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

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

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

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

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

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

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

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

„punktowy ładunek
o nieskończonej gęstości w r=0”

ϕ_+=1/r

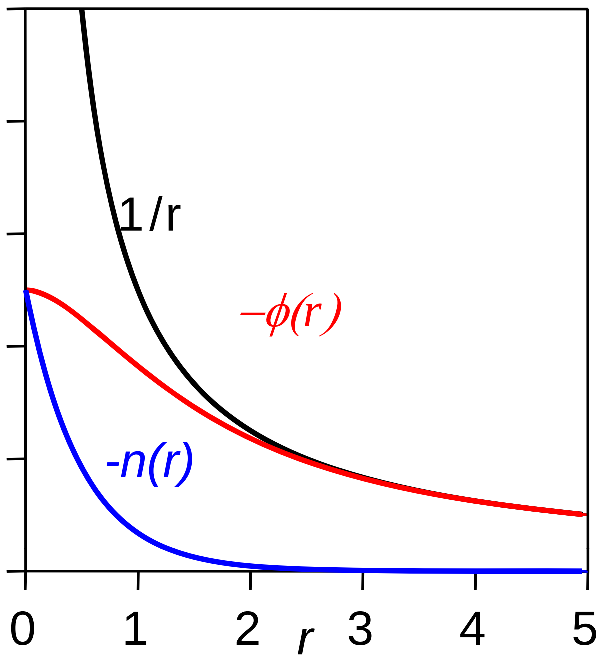
---

składowa od gęstości
elektronowej

n(r)=- exp(-2r)/π.

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

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



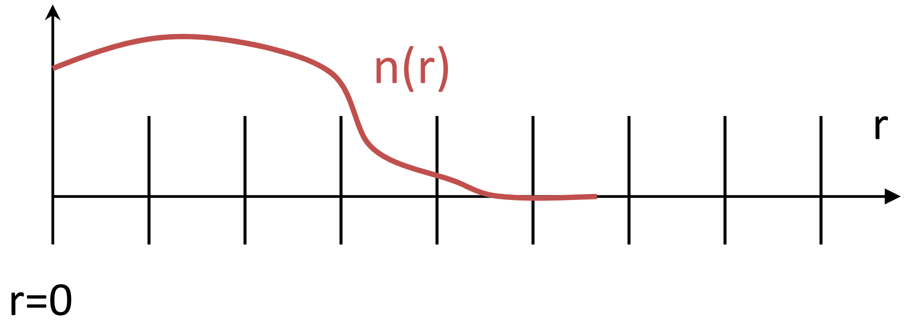
$$\nabla^2\phi = -4\pi n(r)$$

n(r)=- exp(-2r)/π.

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

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

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



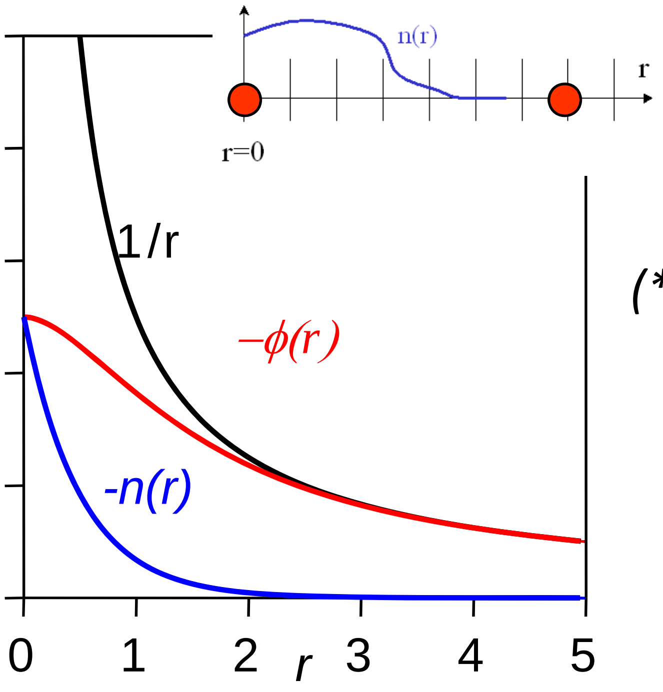
$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\phi}{dr}\right) = -4\pi n$$

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

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

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

r. Poissona

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

jakobian

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

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 rozciągły:
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 *ϕ(0)* skończone, *f* (*r=duże*)= -1 bo *ϕ (r=duże) -1/r.*

spróbujmy ten problem rozwiązać numerycznie

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

+ f(0)=0, f(R)=-1, gdzie R promień pudła obliczeniowego obejmujący całe *n*

Iloraz różnicowy drugiej pochodnej

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

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

(1) plus (2) trójpunktowy iloraz drugiej pochodnej

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

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):

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

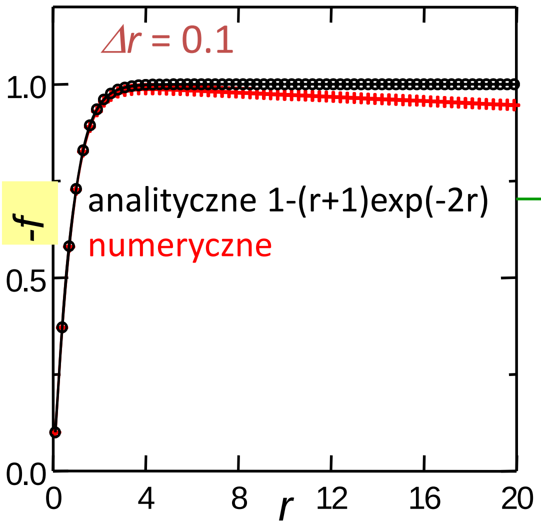
nasz problem początkowy - drugiego rzędu
dla warunku początkowego: potrzebna funkcja+pochodna
tzn. f_0 i f_1

Powiedzmy, że znamy
1) f_0 [bo znamy]
2) f_1 [to powiedzmy]
możemy wyliczyć f_2 i następne.

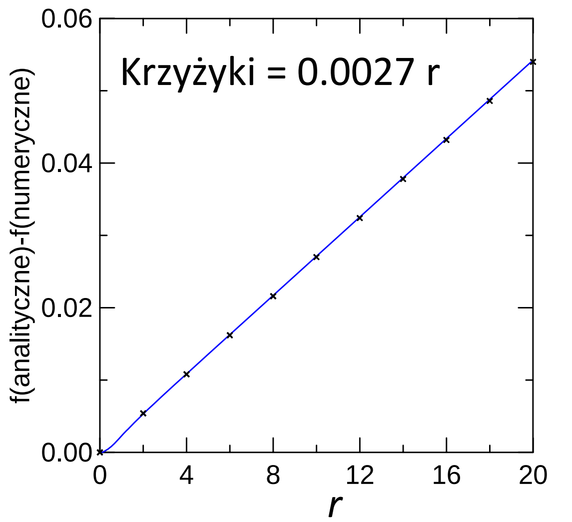
następnie: sprawdzimy, czy f_N spełni WB na prawym końcu.
Jeśli tak – problem rozwiązany

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

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



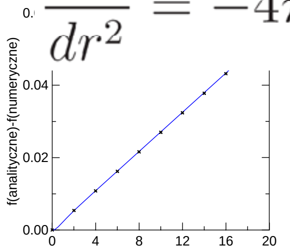
Katastrofa!



(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 linowy 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)

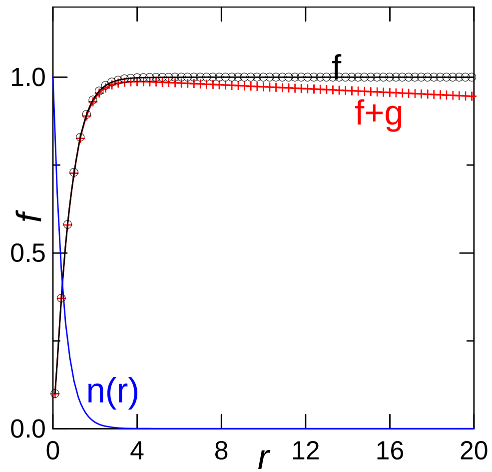
Z drugiej strony:

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

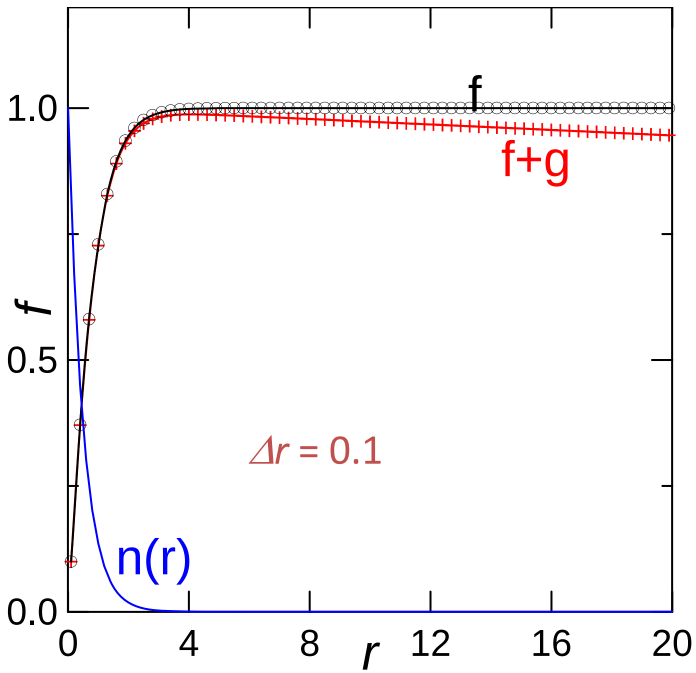
rozwiązanie równania Laplace'a *g* (jednorodnego) możemy zawsze dodać do rozwiązania równania Poissona *f*

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

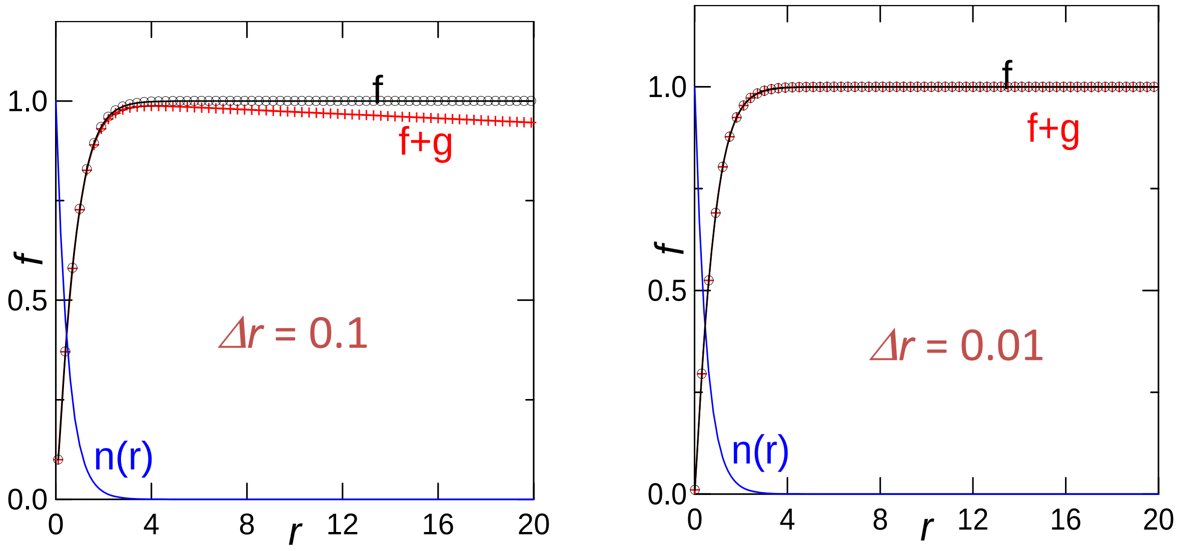
- zagęścić siatkę

- 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: **scałkować równanie wstecz**

Zamiast do przodu:

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

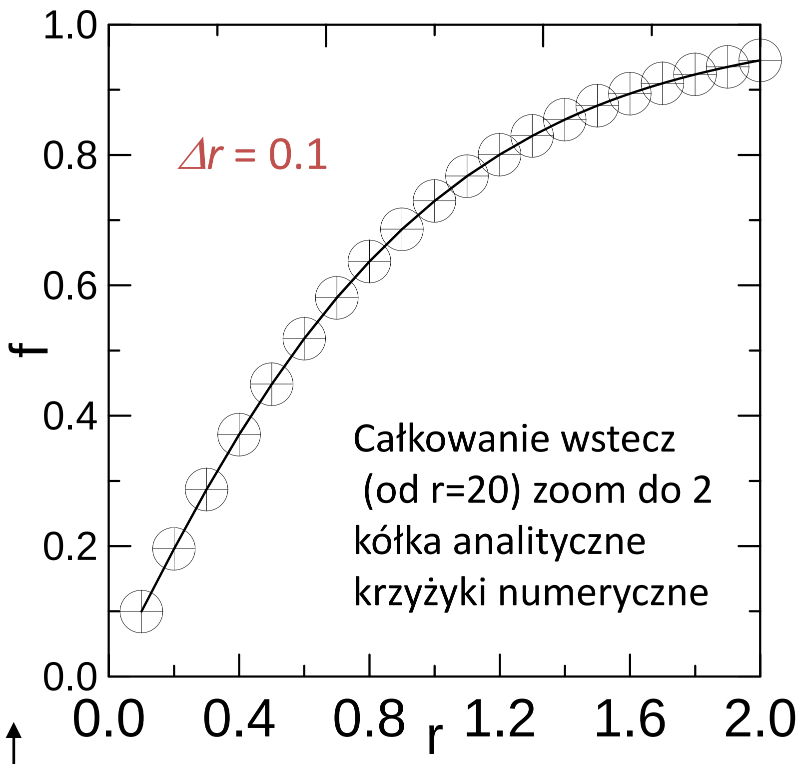
scałkujemy wstecz:

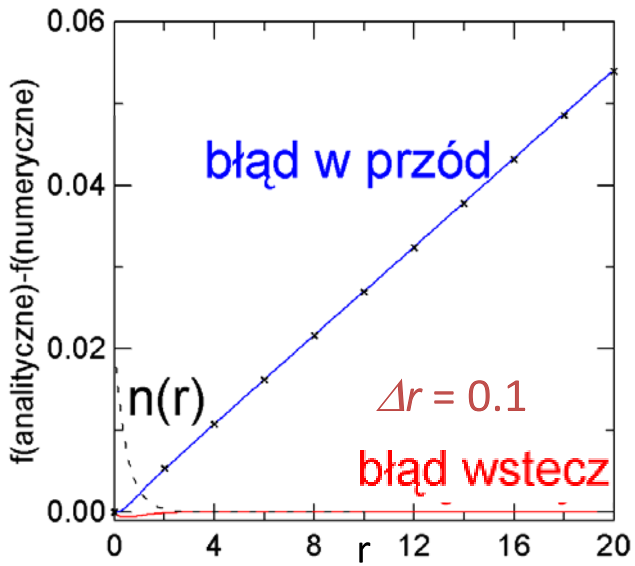
$$f_{i-1} = -4\pi r_i \Delta r^2 n_i + 2f_i - f_{i+1}$$

f_0 = 1, f_1=analityczne

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

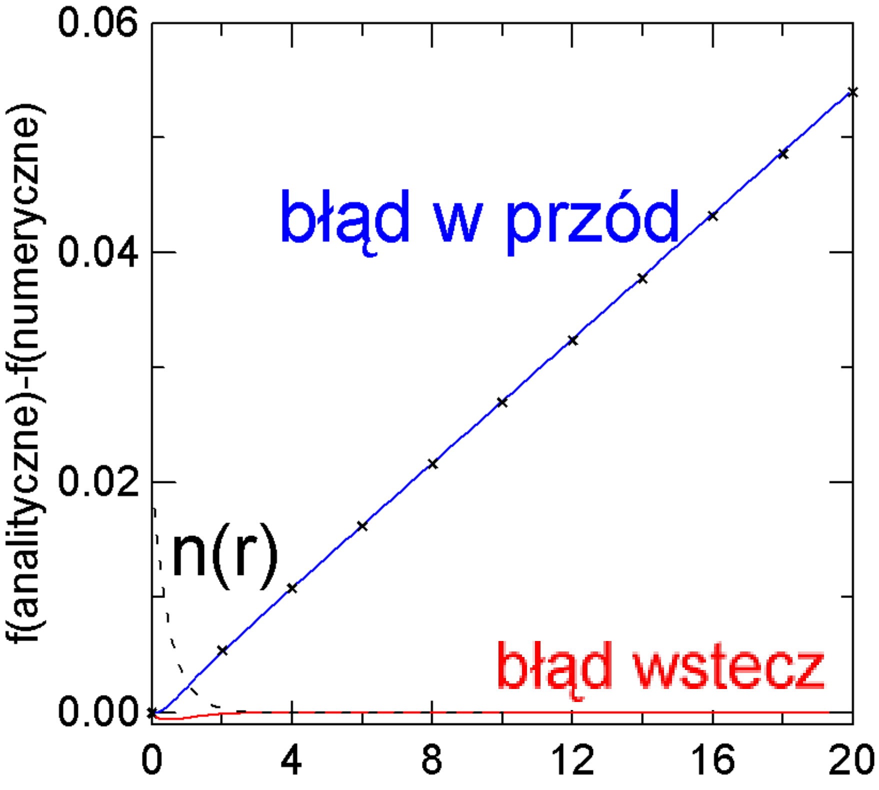
znamy potrzebne 2 wartości!





dla r=0 : f (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

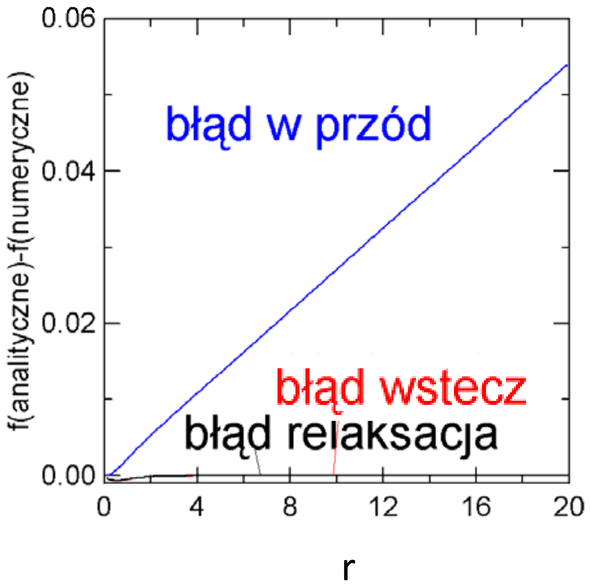
metoda różnic skończonych dla ustalonych WB

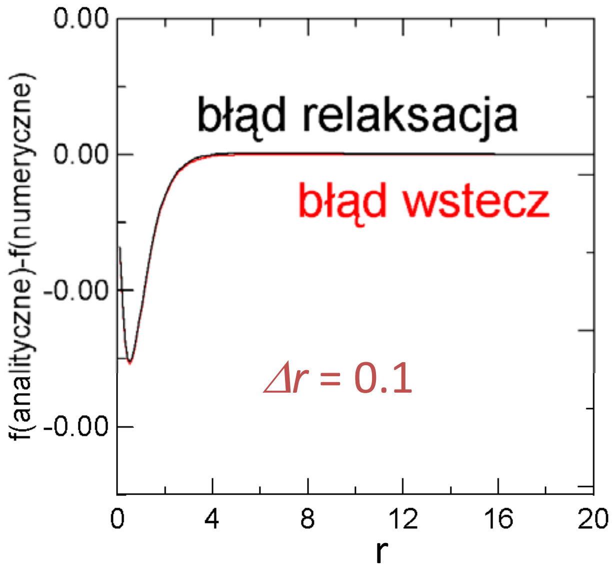
$$\frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta r^2} = -4\pi r_i n_i$$

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)

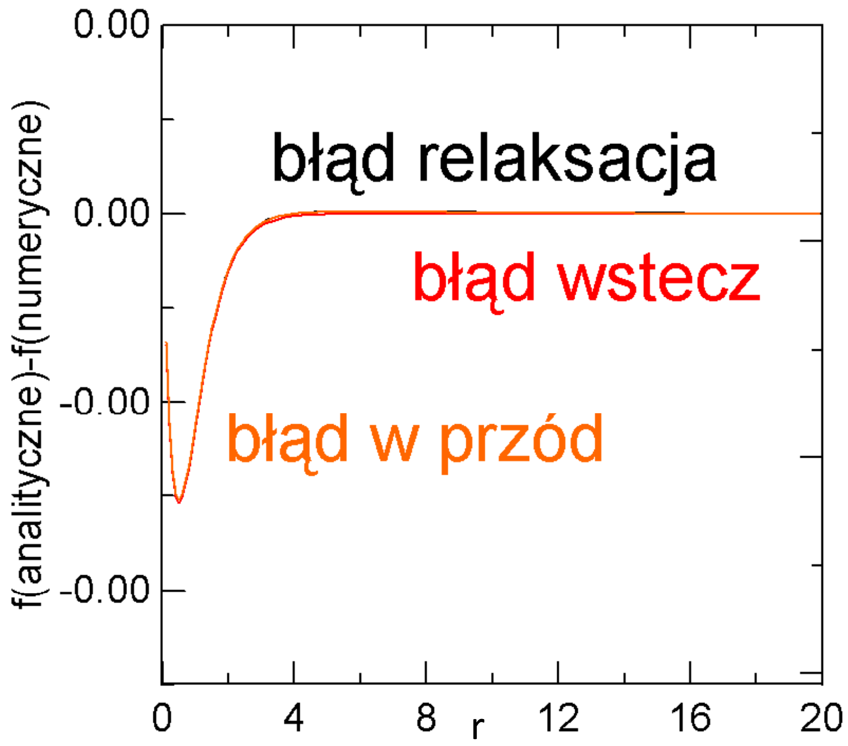




rozwiązanie wstecz (gdzie właściwy WB w r=0 został odnaleziony) nie gorsze od relaksacji, gdzie spełnienie obydwu WB jest wymuszone.

dlaczego 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 *Δr=0.1* „dokładne" rozwiązanie numeryczne jest nieco inne niż analityczne.

(dokładne numeryczne: 0.0996
dokładne analityczne: 0.0993)

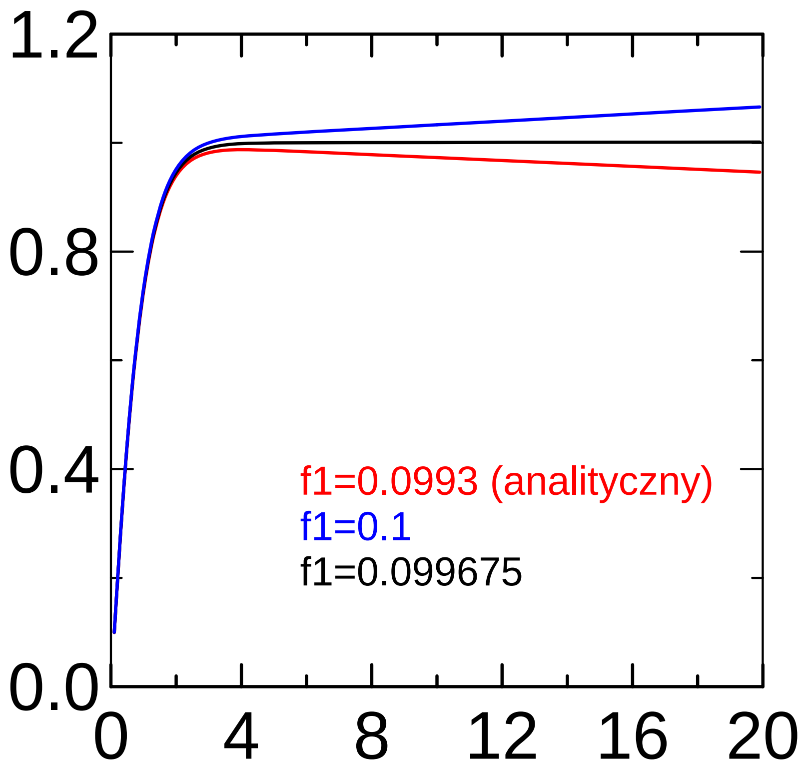
wniosek: błąd pierwszego podejścia polegał na zastosowaniu analitycznego wyniku na f_1 !

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.

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

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

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

można lepiej = metoda Numerowa
błąd lokalny rzędu 6

metoda Numerowa:
[przepis na kolejne wartości rozwiązania liczone z błędem O(Δx^6) zamiast O(Δx^4)**]:**

Stosowana do równania typu:

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

[równanie liniowe II rzędu, bez pierwszej pochodnej] równanie traktowalne 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 podejdziemy Numerowem

sprowadzone do wersji odpowiedniej dla Numerowa przez podstawienie

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

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

Metoda Numerowa – wyprowadzenie:

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

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

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

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

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

druga pochodna prawej strony równania różniczkowego

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

po wstawieniu wyżej błąd pozostanie rzędu 4

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

Obustronnie mnożymy przez $\Delta x^{2,}$ grupujemy wyrazy

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

Podstawowa formuła metody Numerowa

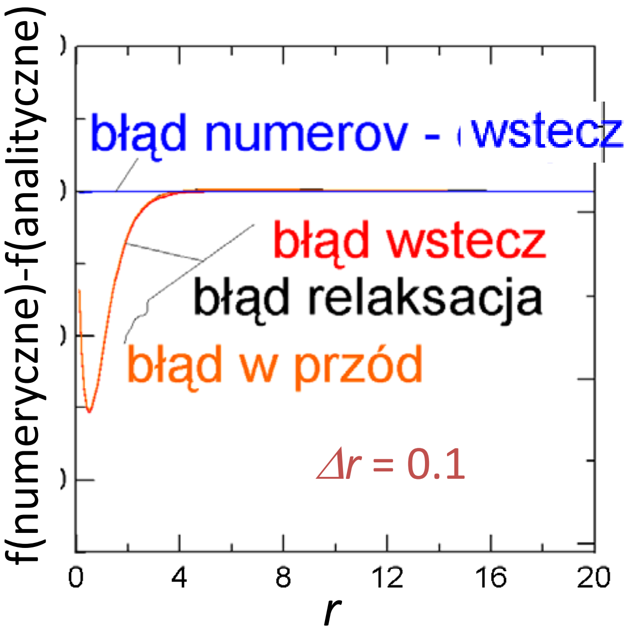
wykorzystać – można na podobnie wiele sposobów
tak - jak iloraz centralny drugiej pochodnej:
np. problem brzegowy – z relaksacją
lub jak problem początkowy

$$\frac{d^2y}{dx^2} + g(x)y = S(x) \qquad\qquad \frac{d^2f}{dr^2} = -4\pi r n$$

W naszym przykładzie: *g*=0, *S*= -4π*rn*

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



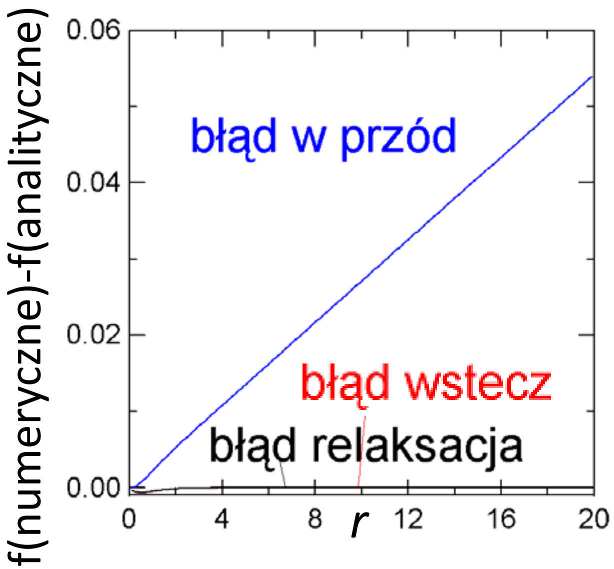
cała różnica w sposobie uwzględniania niejednorodności (źródeł)

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

S (*n*) – wzywane trzykrotnie,
lecz można stablicować,
złożoność obliczeniowa nie rośnie

metoda Numerowa w całkowaniu do przodu z analitycznym f_1

Przypominam wynik przy podejściu poprzednim:



Błąd jest podobnego pochodzenia (numeryczne<>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:

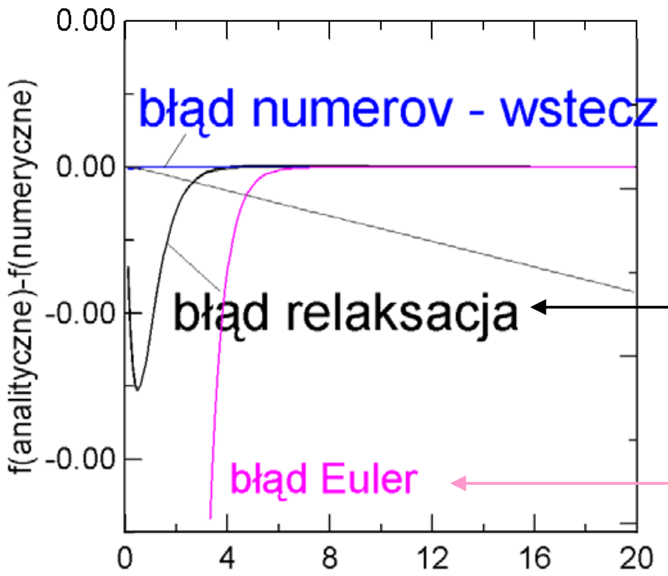
$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} = S(x) - g(x)u(x)$$

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

Rozwiązywać takie układy równań już potrafimy

rozwiązujemy wstecz: f(duże x)=-1, df/dx(duże x)=0

Równanie drugiego rzędu a układ równań pierwszego rzędu : dokładność



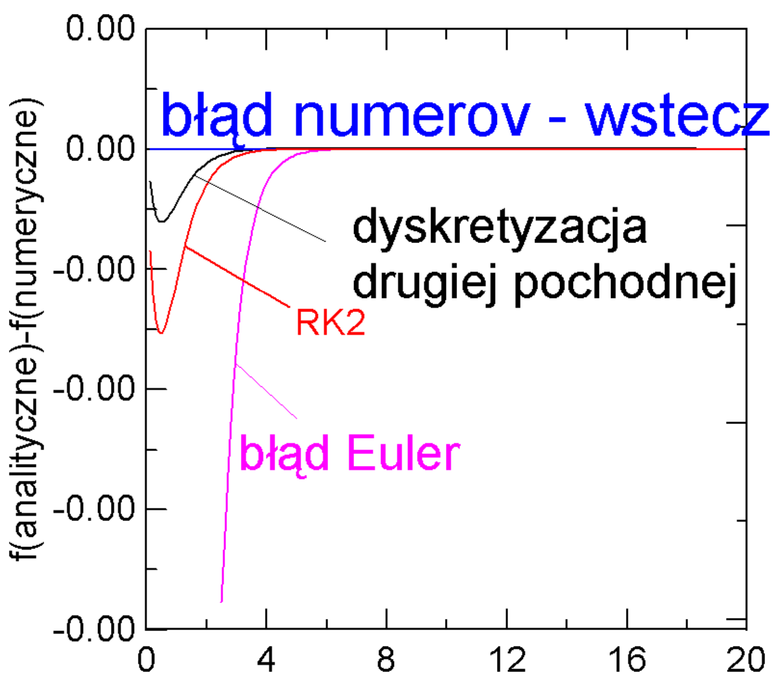
centralny iloraz różnicowy drugiej pochodnej

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 $O(\Delta x^6)$

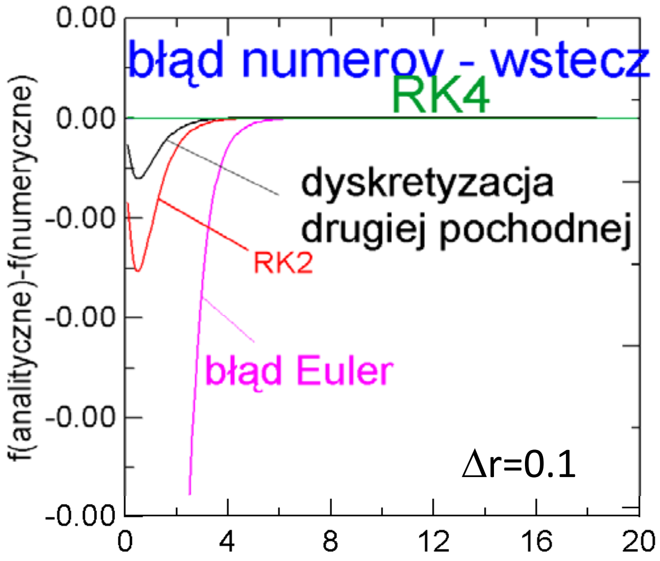
Znacznie lepiej niż Euler, ale wciąż gorzej niż dyskretyzacja drugiej pochodnej.

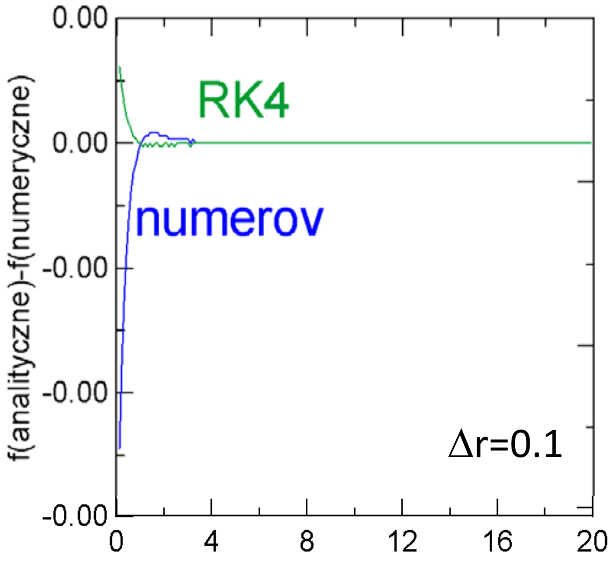
RK4: $O(\Delta x^5)$

Numerow $O(\Delta x^6)$

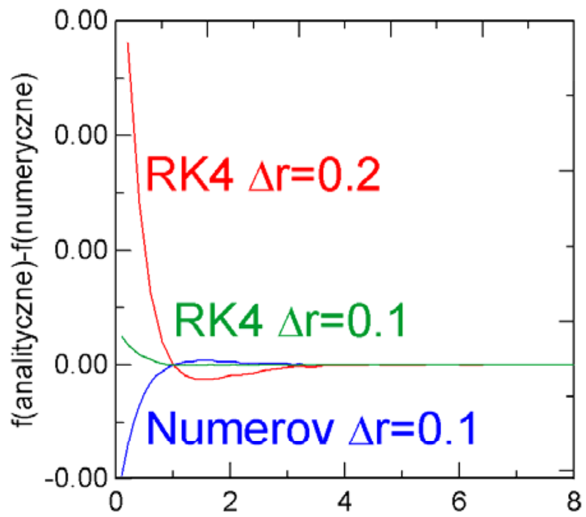
Dokładność bliska Numerowa

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

$$u''(x) = f(x, u, u') \quad \Big| \quad a < x < b \quad \Big| \quad \begin{array}{l} u(a) = A \\ u(b) = B \end{array}$$

stowarzyszony problem początkowy:

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

w metodzie strzałów kluczowa zależność od swobodnego parametru α

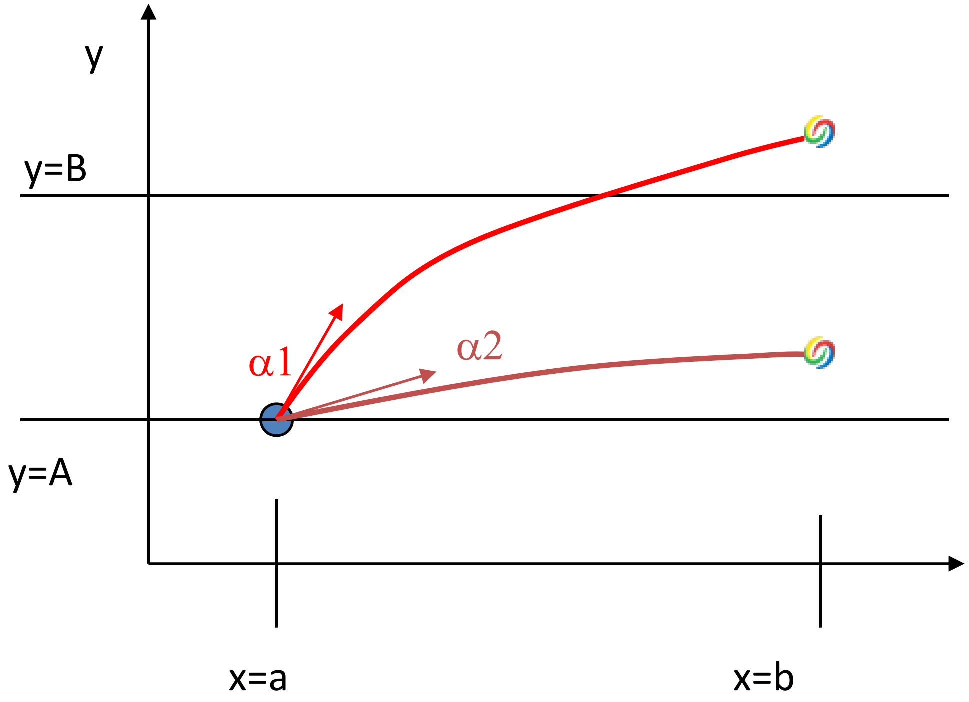
$$y_k(x) = y_k(x; \alpha)$$

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



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

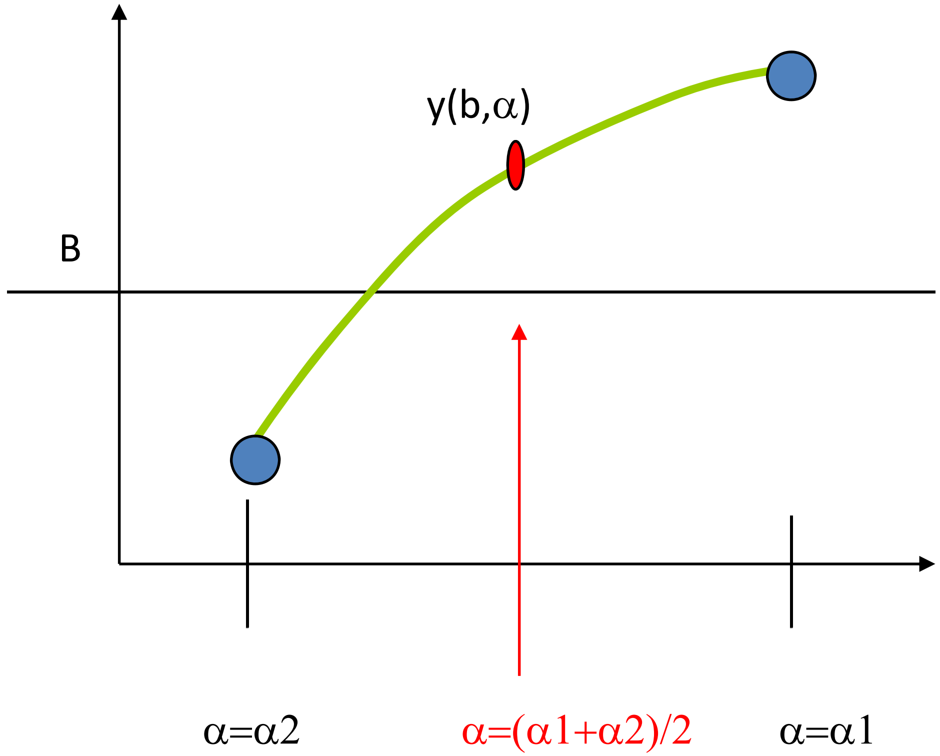
$$
\begin{aligned}
y_1(a) &= A \\
y_2(a) &= \alpha
\end{aligned}
$$

$y_1(b;\alpha)=B$

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: $\alpha 1$ za duża $\alpha 2$ zbyt mała

metoda strzałów



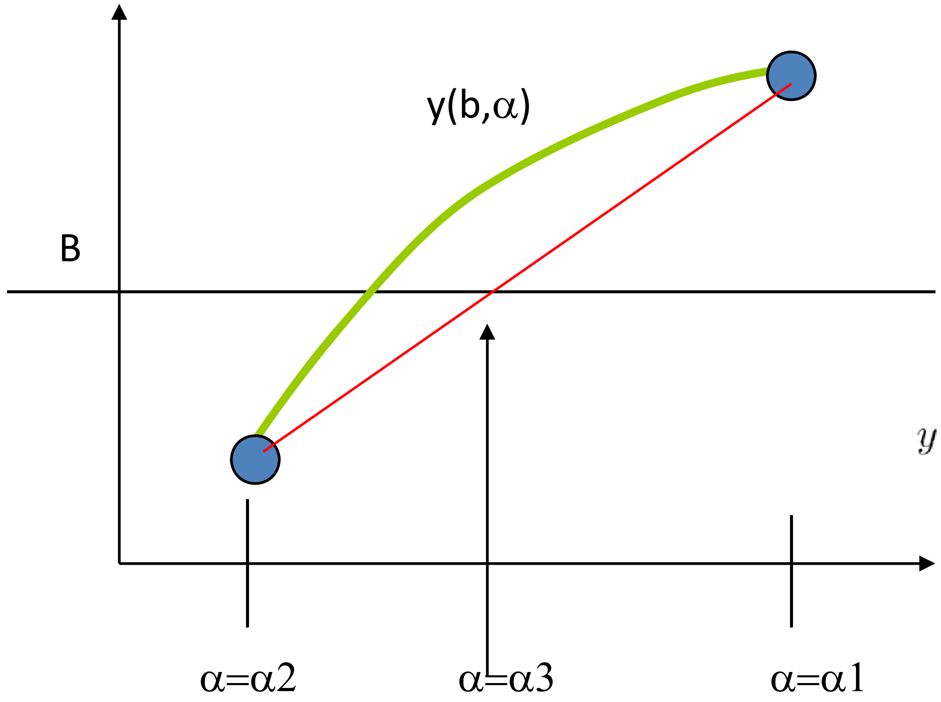
$y_1(b;\alpha)=B$

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,α) jest liniowa
w okolicy α1,α2 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

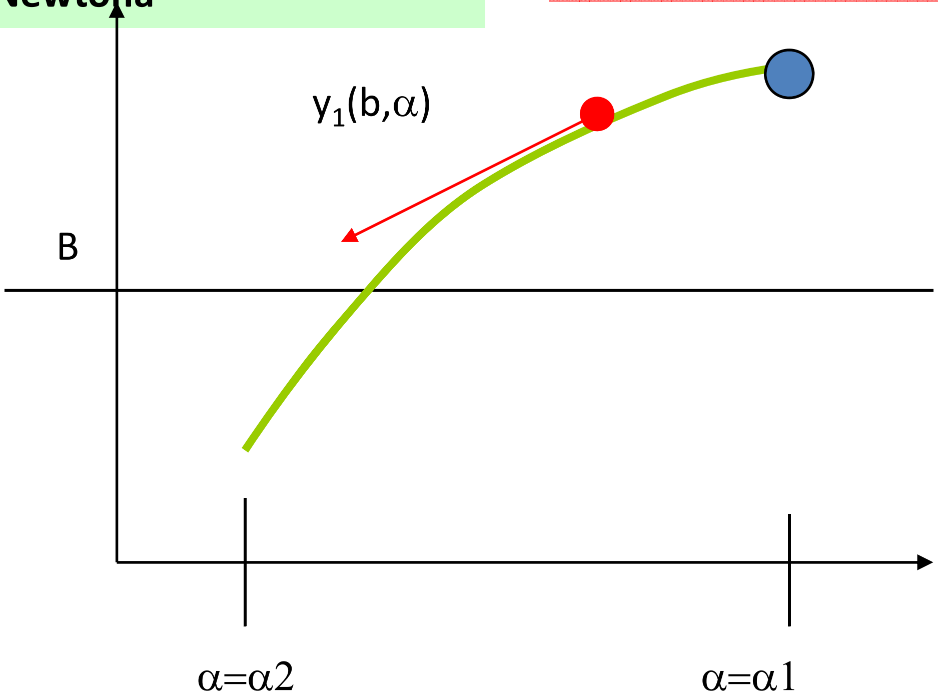
$$\alpha_3 \equiv \alpha := \frac{\alpha_2 y(b;\alpha_1) - \alpha_1 y(b;\alpha_2) + B(\alpha_1-\alpha_2)}{y(b;\alpha_1)-y(b;\alpha_2)}$$

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):

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

kwadratowa, ale wykonanie każdego kroku
wymaga rozwiązania dodatkowego problemu początkowego

zbieżność siecznych:

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

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

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

wyznaczyć

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

różniczkujemy po α

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

nazywamy:

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

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

metoda strzałów z iteracją Newtona

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

wyznaczyć

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

różniczkujemy po α

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

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

$$\frac{d}{d\alpha}\frac{d}{dx}y_2(x;\alpha) = \frac{d}{d\alpha}f(x, y_1, y_2) \qquad \frac{df}{d\alpha} = z_1\frac{df}{dy_1} + z_2\frac{df}{dy_2}$$

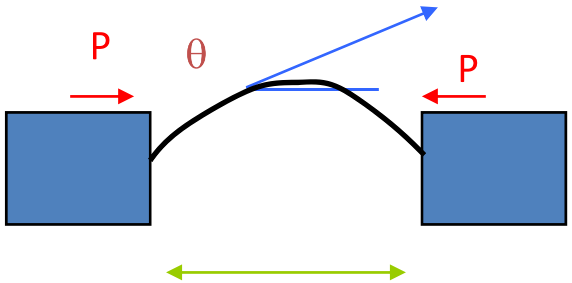
$$z_2 = \frac{dy_2}{d\alpha}$$

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{d}{dx}z_1(x;\alpha) &= z_2(x;\alpha) \qquad & z_1(a) &= 0 \\ \frac{d}{dx}z_2(x;\alpha) &= z_1\frac{df}{dy_1} + z_2\frac{df}{dy_2} \qquad & z_2(a) &= 1 \end{aligned}}$$

stowarzyszony problem początkowy do rozwiązania w funkcji *x*

$z_1(x=b,\alpha)$ da nam mianownik do metody Newtona przykład: pręt w imadle (*clamped elastica*)

pręt jednostkowej długości jest zamocowany sztywno pod zadanym 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

---

przygotujmy problem do metody strzałów z metodą Newtona:

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

równanie nieliniowe do rozwiązania:

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

z wp

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

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

przygotujmy problem do metody strzałów z metodą Newtona:

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

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

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

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

pochodna problemu początkowego po α

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

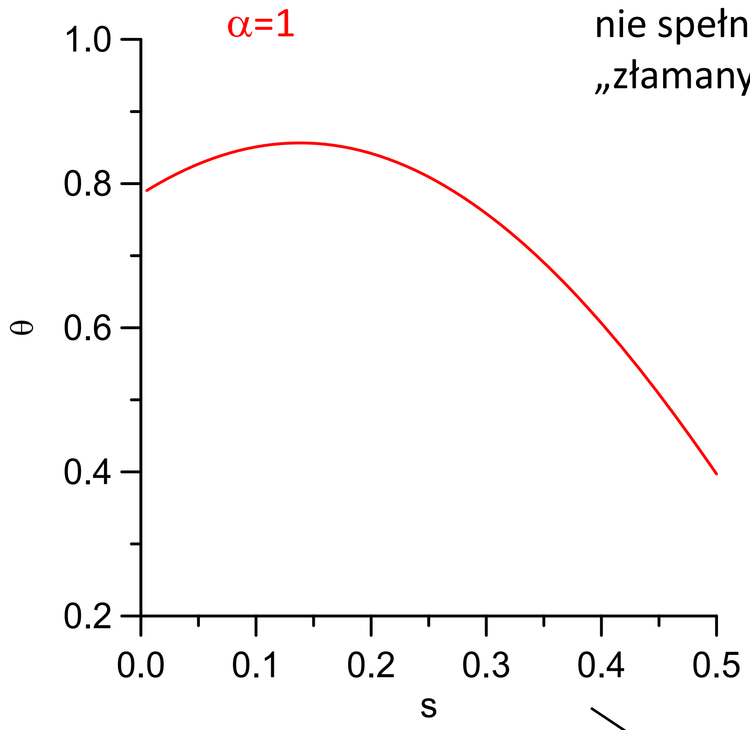
$$\begin{aligned} z_1(0;\alpha) &= 0 \\ z_2(0;\alpha) &= 1 \end{aligned}$$

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

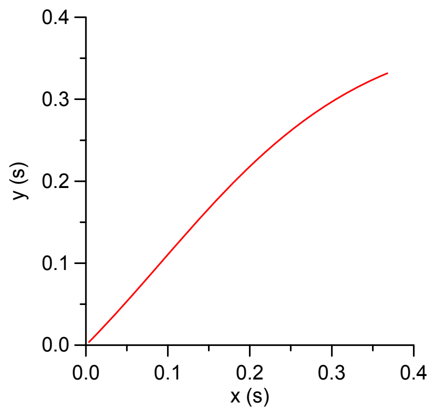
kolejność działań:

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



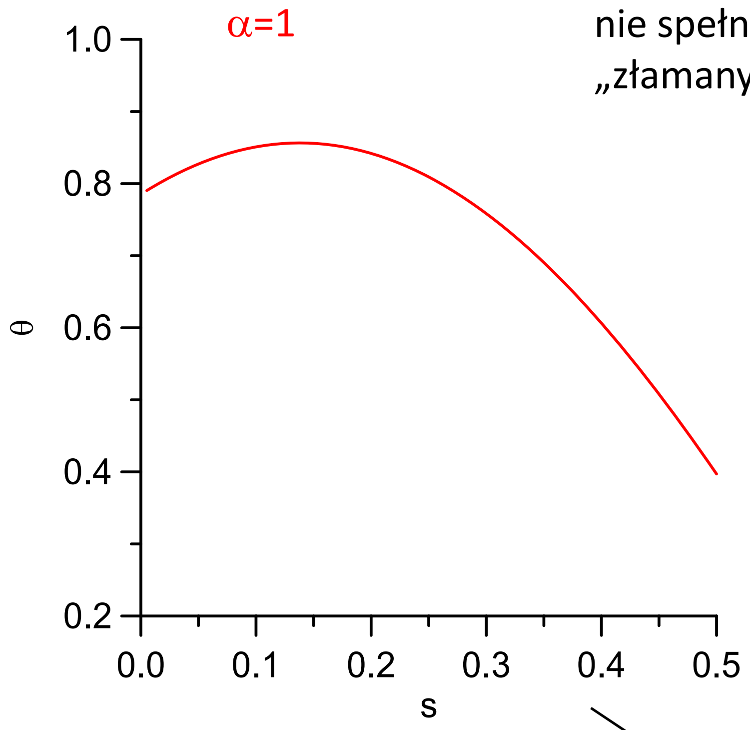
nie spełnia warunku brzegowego w połowie pręta
„złamany" pręt



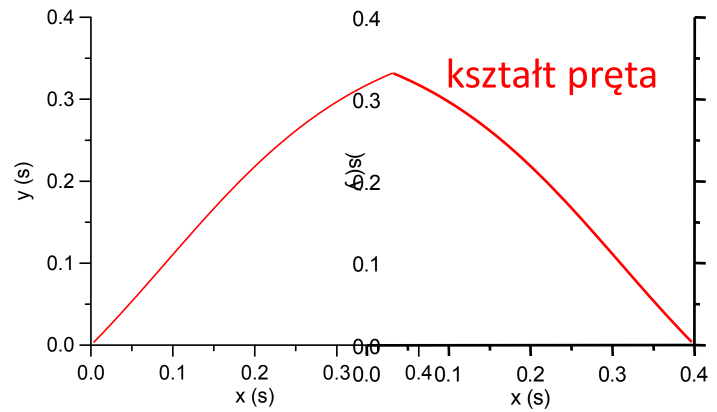
kształt pręta

$$
\begin{aligned}
x(s) &= \int_0^s \cos(\theta(u))du \\
y(s) &= \int_0^s \sin(\theta(u))du
\end{aligned}
$$

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



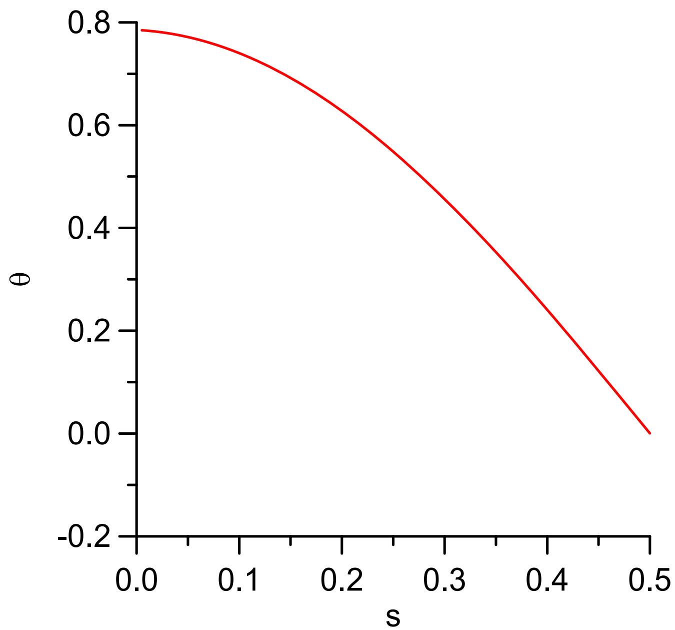
nie spełnia warunku brzegowego w połowie pręta
„złamany" pręt



$$
\begin{aligned}
x(s) &= \int_0^s \cos(\theta(u))du \\
y(s) &= \int_0^s \sin(\theta(u))du
\end{aligned}
$$

iteracja Newtona

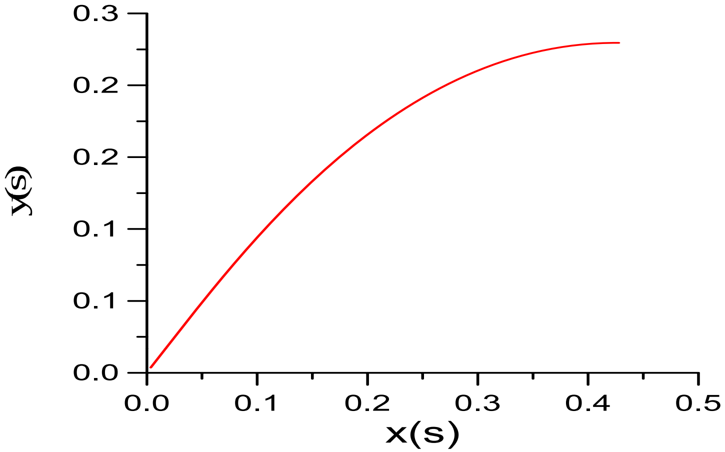
	α	$\theta(1/2,\alpha)$
1	1.000000	0.3970441
2	-0.8177086E-01	0.1302912E-01
3	-0.1195772	0.1138412E-04
4	-0.1196103	0.8602074E-11
5	-0.1196103	-0.3694961E-15
6	-0.1196103	-0.4510281E-16
7	-0.1196103	0.6591949E-16



$$
\begin{aligned}
x(s) &= \int_0^s \cos(\theta(u))du \\
y(s) &= \int_0^s \sin(\theta(u))du
\end{aligned}
$$

znaleźliśmy wartość parametru
α która daje
właściwy kształt pręta

możemy teraz sobie odległość
między szczękami wyliczyć



b) metoda różnic skończonych

nadal problem nieliniowy 2-go rzędu
z warunkiem Dirichleta

$$u(a) = A$$

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

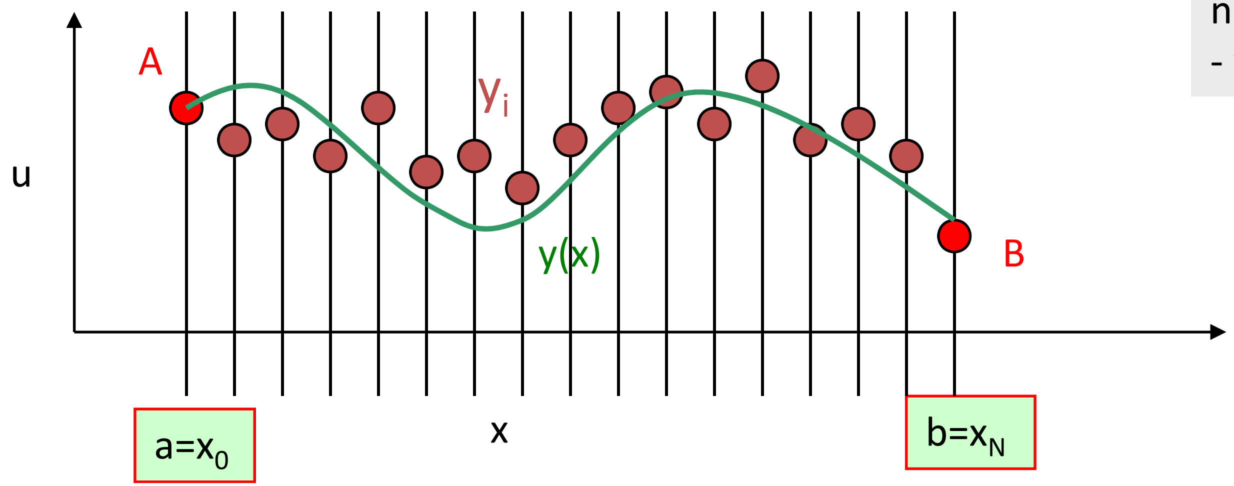
$$u(b) = B$$

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

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

punkty siatki:

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



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

$$\begin{aligned} u(x+\Delta x) &= u(x) + \Delta x \frac{du}{dx} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{\Delta x^3}{6} \frac{d^3 u}{dx^3} + \ldots \\ u(x-\Delta x) &= u(x) - \Delta x \frac{du}{dx} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{d^2 u}{dx^2} - \frac{\Delta x^3}{6} \frac{d^3 u}{dx^3} + \ldots \end{aligned}$$

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

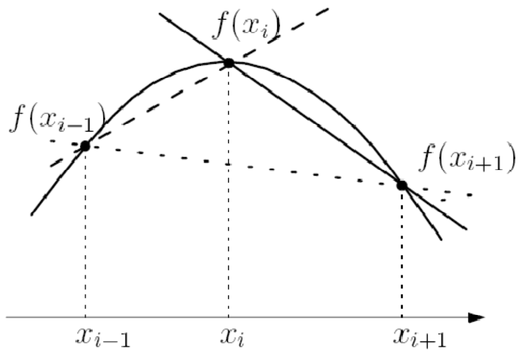
$$u'(x) = \frac{u(x+\Delta x) - u(x)}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2} u''(\xi)$$

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

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

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

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

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 pozostańmy jeszcze chwilę przy ilorazach

Wyższy iloraz różnicowy pierwszej pochodnej – wykorzystać więcej punktów

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

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

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

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

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

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

(4) minus (5)

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

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

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

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

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

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

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

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

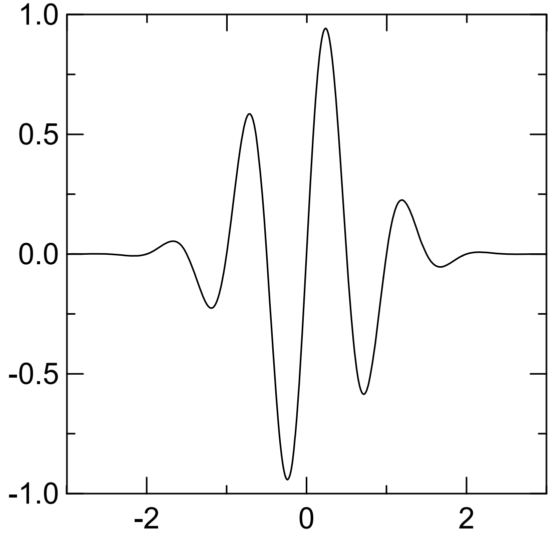
domyślamy się, że C= -1/30

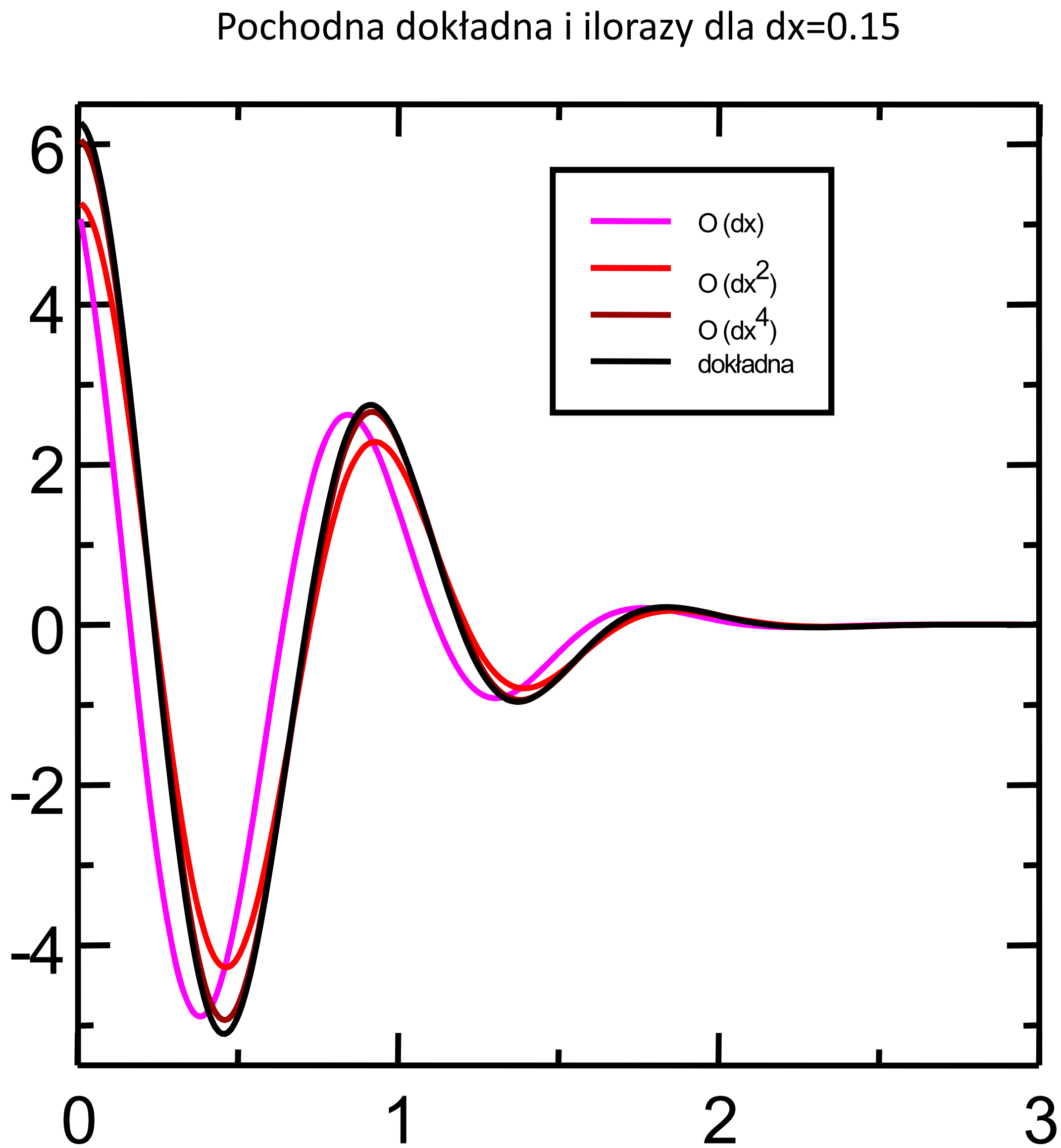
$O(\Delta x^N)$ nie tylko podaje rząd zbieżności ilorazu do wartości dokładnej z Δx, lecz również oznacza, że iloraz jest dokładny dla różniczkowania wielomianów rzędu *N*.

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

Przykład:

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

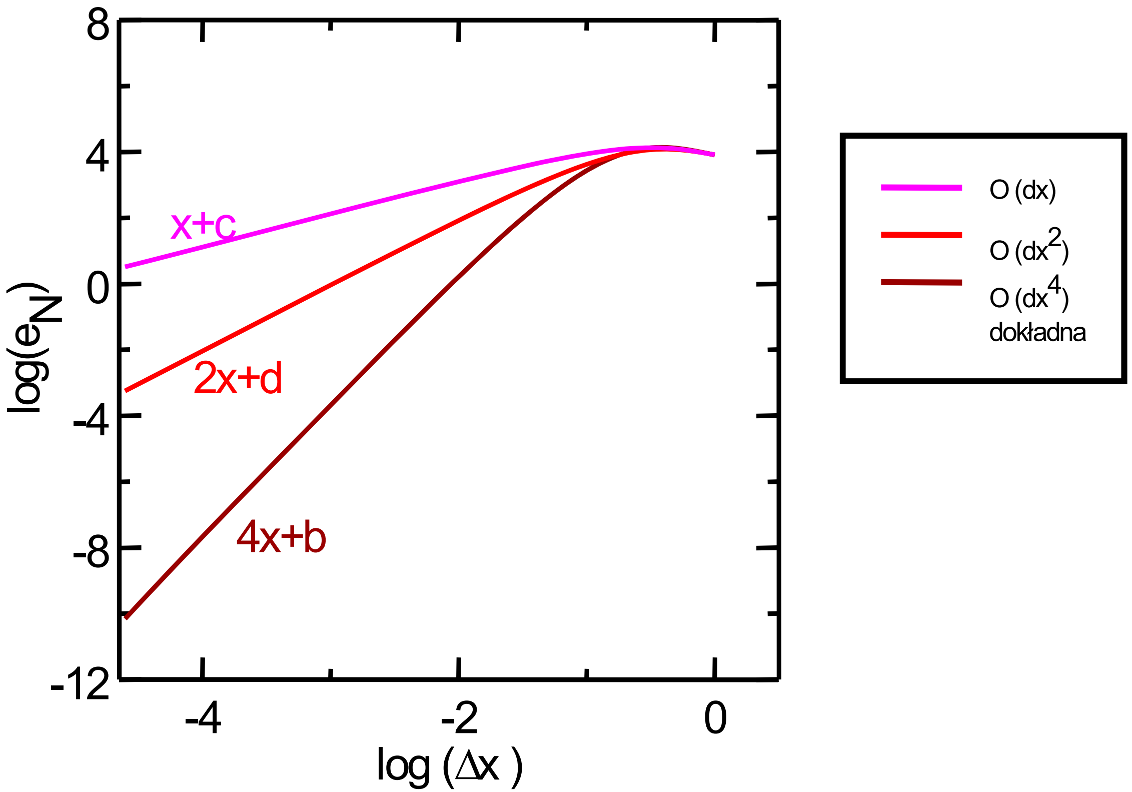




Zbieżność wartości pochodnej wyliczonej z ilorazu różnicowego do wartości dokładnej z dx→0.

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

$v_N(\Delta x, x)$ 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

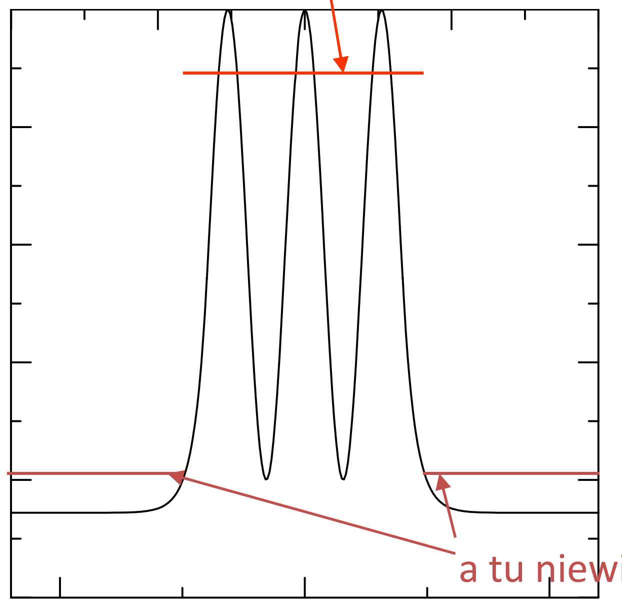
ilorazy na nierównomiernej siatce

Iloraz różnicowy pochodnej dla nierównej siatki:

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

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

Tutaj dużo się dzieje
(gęstsza siatka przydałaby się)

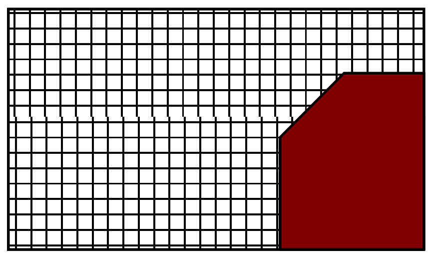


a tu niewiele
(rzadsza
siatka wystarczy)

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!

przydatne również:
2 i więcej D
brzegi nieregularne



Iloraz różnicowy drugiej pochodnej dla nierównej siatki:

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

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

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

$$u(a) = A$$

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

$$u(b) = B$$

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

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

problem algebraiczny:

$$\frac{u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i}{\Delta x^2} = f(x_i, u_i, \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x})$$

dla *i=1,...,N-1*

$u_0=A$, $u_N=B$

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

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

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

$$u(b) = B$$

wersja zdyskretyzowana:

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

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

$$\mathcal{L}_{\Delta x} u_i = 0$$ 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:

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

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

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

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

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

użyliśmy ilorazów dokładności Δx^2
błąd dyskretyzacji tego samego rzędu

problem algebraiczny:

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

$$b_iu_{i-i}+a_iu_i+c_iu_{i+1}=\Delta x^2r_i$$

$$\begin{aligned} a_i &= -2+q_i\Delta x^2 \\ b_i &= 1-\frac{p_i\Delta x}{2} \\ c_i &= 1+\frac{p_i\Delta x}{2} \end{aligned}$$

dla *i=1,...,N-1* [dla *i=0,N* nie stosujemy równania
tylko wb. punkty na brzegu *nie spełniają rr*]

równanie różniczkowe liniowe → algebraiczny układ równań liniowych

Au=f

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} 1 &&&&&& \\ b_1 & a_1 & c_1 &&&& \\ & b_2 & a_2 & c_2 &&& \\ && \ddots & \ddots & \ddots && \\ &&& b_{N-2} & a_{N-2} & c_{N-2} & \\ &&&& b_{N-1} & a_{N-1} & c_{N-1} \\ &&&&&& 1 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{u}=\begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{pmatrix} \qquad \mathbf{f}=\begin{pmatrix} A \\ \Delta x^2r_1 \\ \Delta x^2r_2 \\ \Delta x^2r_3 \\ \vdots \\ \Delta x^2r_{N-1} \\ B \end{pmatrix}$$

macierz trójprzekątniowa bo centralne ilorazy
równań: N+1 – pierwsze i ostatnie wymuszają WB.
można pozbyć się pierwszego i ostatniego równania

można pozbyć się pierwszego i ostatniego równania

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

i=1

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

i=N-1

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

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_1 & c_1 & & & & \\ & b_2 & a_2 & c_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & b_{N-2} & a_{N-2} & c_{N-2} \\ & & & & b_{N-1} & a_{N-1} \end{pmatrix} \qquad \mathbf{f} = \begin{pmatrix} \Delta x^2 r_1 - b_1 A \\ \Delta x^2 r_2 \\ \Delta x^2 r_3 \\ \vdots \\ \Delta x^2 r_{N-1} - c_{N-1} B \end{pmatrix}$$

najlepiej zamiast np. eliminacji Gaussa
rozwiązać problem algorytmem trójprzekątniowym

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 **Au=f** $\xrightarrow{\text{dekompozycja}}$ **A=LU** **LUu=f**

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

$$\begin{aligned} \gamma_i &= c_i \\ \alpha_1 &= a_1, \\ \beta_i &= b_i/\alpha_{i-1} \\ \alpha_i &= a_i - \beta_i\gamma_{i-1} \end{aligned}$$

Uu=z
Lz=f

$$\begin{aligned} z_1 &= f_1 \\ z_2 &= f_2 - \beta_2 z_1 \\ &\vdots \\ z_i &= f_i - \beta_i z_{i-1} \end{aligned}$$

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

itd..

5n mnożeń /dzieleń
3n dodawań / odejmowań

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

Błąd globalny dla dwupunktowego problemu brzegowego

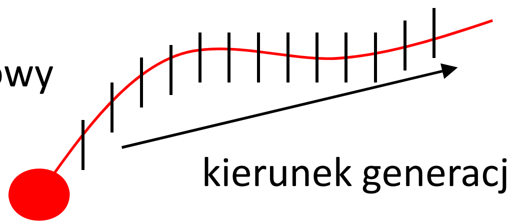
definiowany (jak dla problemów początkowych) jako odchylenie od wartości dokładnej

w problemie początkowym = widzieliśmy akumulację błędów lokalnych,
w której wyniku rząd 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})

problem początkowy

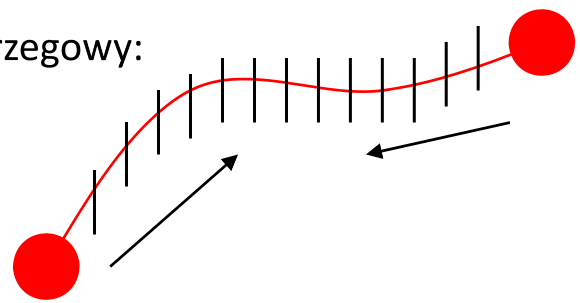


kierunek generacji wyników

---

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.

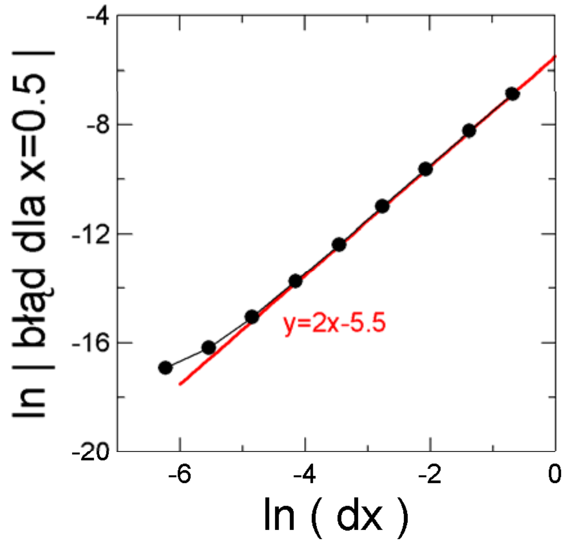
czy punkt ze środka jest policzony z gorszą (o jeden rząd dokładnością) niż punkt z brzegu ???

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 $\rightarrow$ <u>nie ma akumulacji błędu dla przestrzennych stopni swobody</u> **(**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

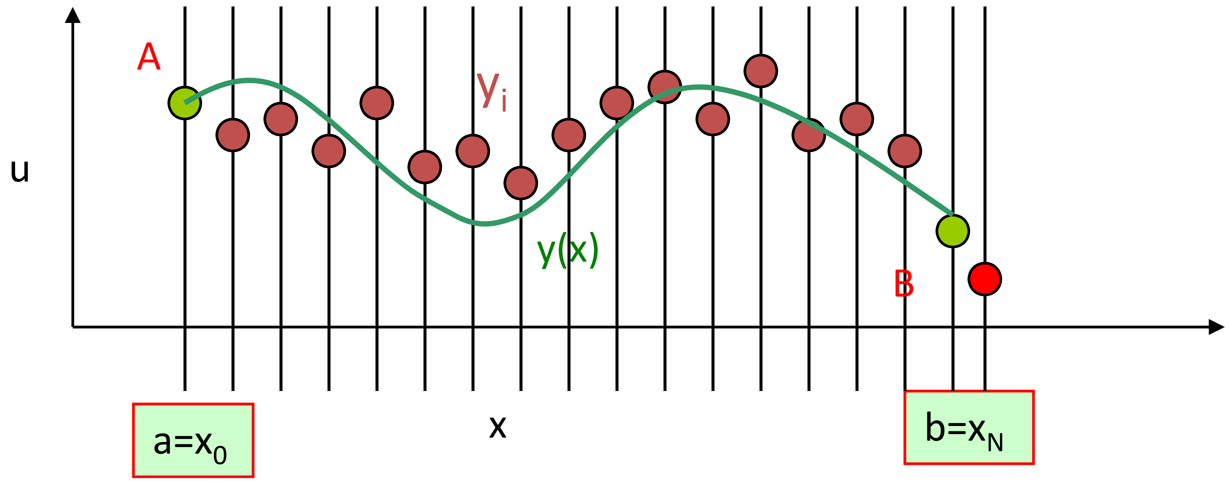
mieszany WB (Robina) dla równania liniowego

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

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

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(Δx) do *całego* rachunku
2) możemy zastosować wzór wsteczny z 3-ma punktami,
   ale – zakłócimy trójprzekątniową strukturę problemu
3) wyjście – fikcyjny punkt u_{N+1} w $b+\Delta x$



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

fikcyjny

WB:
$$
\begin{aligned}
\frac{u_{N+1} - u_{N-1}}{2\Delta x} + Cu_N &= B \\
b_N u_{N-1} + a_N u_N + c_N u_{N+1} &= \Delta x^2 r_N
\end{aligned}
$$

równanie na punkt ostatni
z punktem fikcyjnym

fikcyjny punkt eliminowany z WB
$$
u_{N+1} = 2B\Delta x - C2\Delta x u_N + u_{N-1}
$$

do równania:

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

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

p. trójp.

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

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

p. trójp.

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

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:

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

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

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

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

funkcja i pochodne
liczone w

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

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

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

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

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

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

w każdej iteracji Newtona układ równań z macierzą trójprzekątniową do rozwiązania

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

$$\frac{d^2u}{dx^2} = f(x,u,u') = -P\sin(u)$$
$$u(0) = -u(1) = \beta, u(1/2) = 0$$

u – na siatce od 0 do ½

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

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

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

1

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

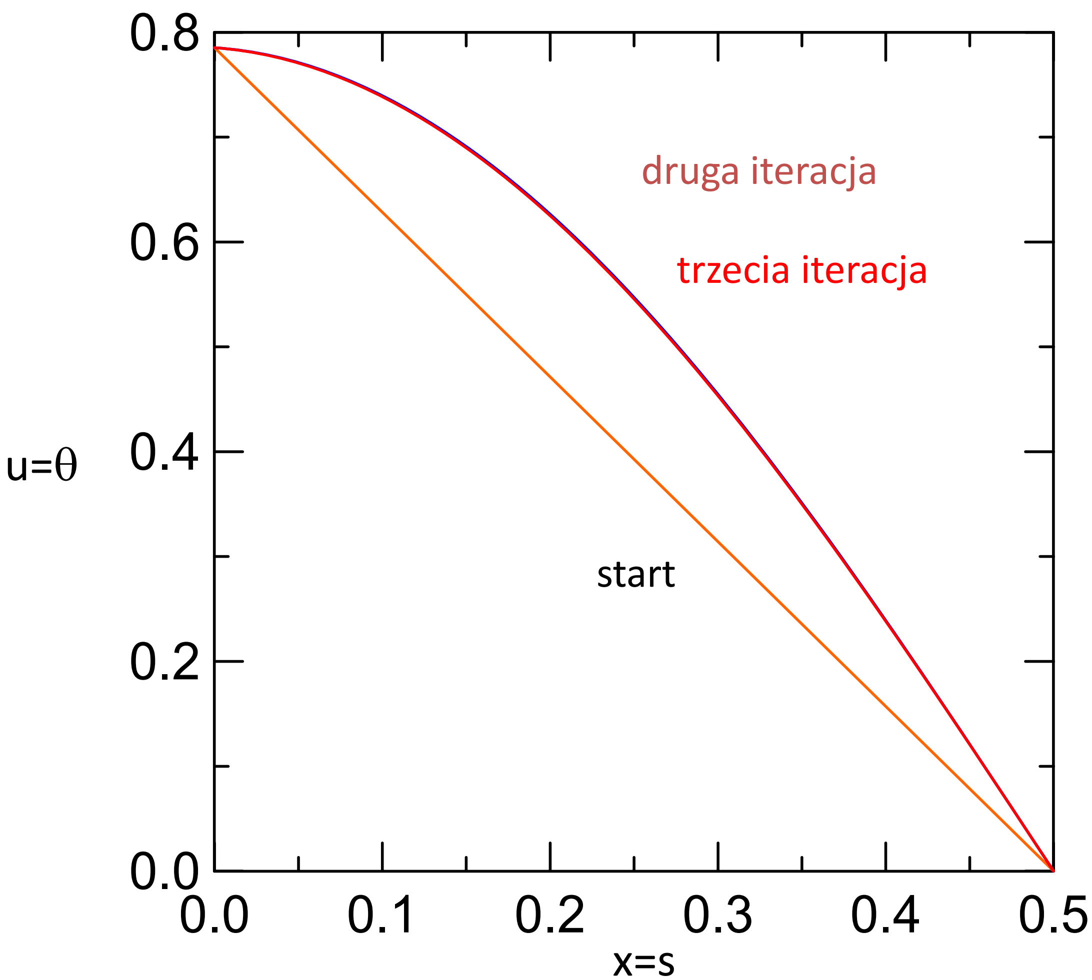
$$a_i^\mu = -2 + P\Delta x^2 \cos(u_i)$$

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

1

Przykład: - problem pręta w imadle

Wyniki



Przykład: - problem pręta w imadle

Wyniki