w metodach jednokrokowych możliwa i prosta
do przeprowadzenia jest adaptacja kroku czasowego
w czasie symulacji (ekstrapolacja Richardsona <u>dla błędu lokalnego</u>)

dla metod wielokrokowych zmiana kroku
czasowego w trakcie rozwiązywania problemu jest wykluczona

dla obydwu klas metod do podniesienia dokładności zastosować
można

ekstrapolację Richardsona dla **błędu globalnego**

czyli: jak używając kroku dt
a uzyskać dokładność jak dla dt / 1000000

ekstrapolacja Richardsona dla **błędu globalnego**

wcześniej stosowaliśmy ekstrapolację Richardsona dla szacowania błędu lokalnego = aby podnieść rząd dokładności (o jeden), lub aby kontrolować krok czasowy

przyjrzyjmy się bliżej ekstrapolacji dla błędu globalnego :
cel: zwiększenie dokładności o wiele rzędów

$z(t, \Delta t)$ rozwiązanie przybliżone uzyskane dla chwili *t* z krokiem Δt

odchylenie rozwiązania numerycznego od dokładnego *u(t)* można przedstawić jako szereg potęgowy w Δt

$$z(t, \Delta t) = u(t) + \sum_{i=1} c_i(t) \Delta t^i$$

dla metody rzędu p: $c_1=c_2= \ldots c_{p-1}=0$, wyższe c są już niezerowe
(rząd błędu globalnego jest o jeden niższy od lokalnego)

ekstrapolacja Richardsona dla błędu globalnego: wyliczenie kolejnych wartości *c* (porównanie wyników dla różnych Δt) i eliminacja błędu z nimi związanego.

ekstrapolacja Richardsona dla błędu globalnego
przykład

używamy schematu Eulera (jawnego lub niejawnego) $p=1$
wykonujemy *wiele* kroków aż dotrzemy do t

$$z(t,\Delta t) = u(t) + c_1\Delta t + c_2\Delta t^2 + \ldots$$

$$z(t,\Delta t/2) = u(t) + c_1\Delta t/2 + c_2\Delta t^2/4 + \ldots \qquad (2)$$

odejmujemy stronami aby wyeliminować $u(t)$, liczymy c_1

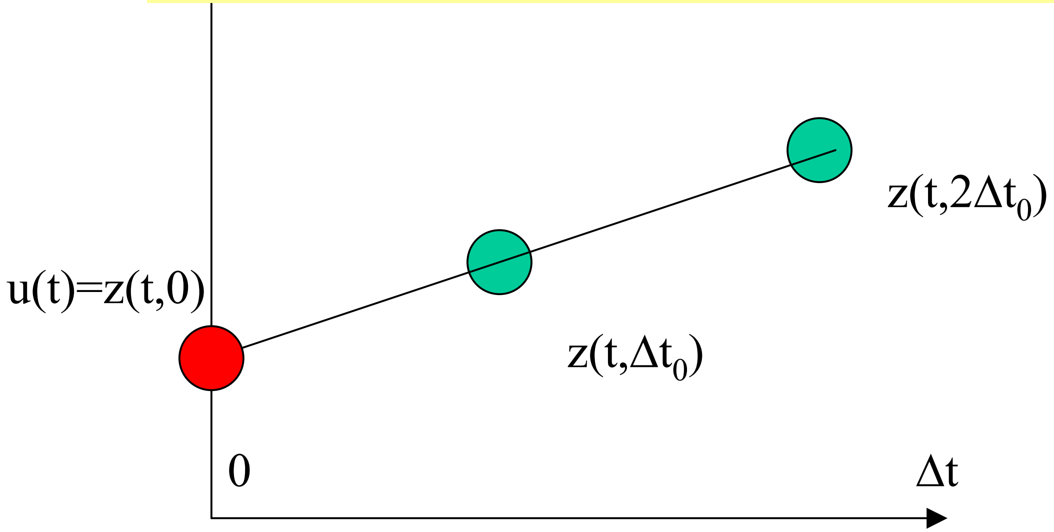
$$\frac{c_1\Delta t}{2} = z(t,\Delta t) - z(t,\Delta t/2) - \frac{3c_2}{4}\Delta t^2 + \ldots$$

wstawić do schematu z mniejszym krokiem (2):

$$\underline{2z(t,\Delta t/2) - z(t,\Delta t)} = u(t) - \frac{c_2}{2}\Delta t^2 + \ldots$$

kombinacja liniowa wyników z Δt i Δt/2
lepiej niż każdy z osobna przybliża *u(t)*

ekstrapolacja Richardsona dla błędu globalnego - interpretacja graficzna



przeprowadźmy prostą przez wyniki uzyskane z krokami czasowymi $2\Delta t_0$ oraz Δt_0

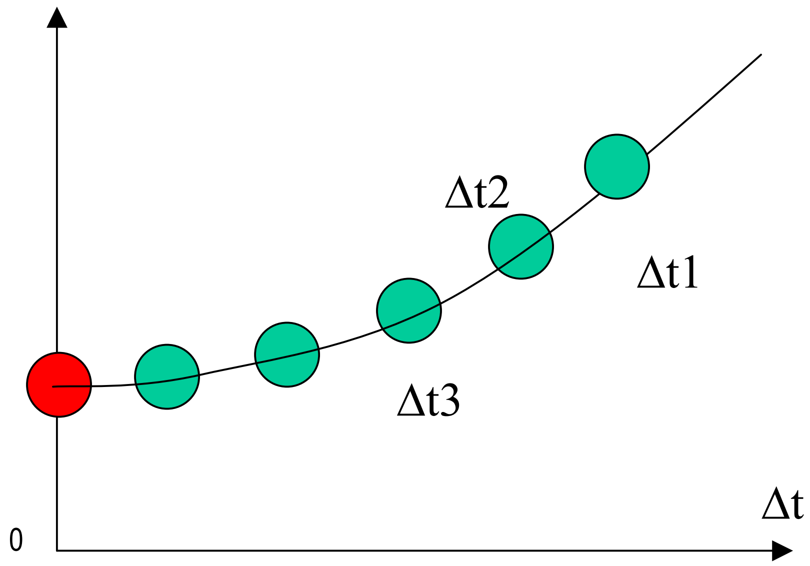
$$z(t,\Delta t) = \frac{z(t,2\Delta t_0) - z(t,\Delta t_0)}{\Delta t_0}\Delta t + C \Bigg|$$

$$z(t,\Delta t_0) = \frac{z(t,2\Delta t_0) - z(t,\Delta t_0)}{\Delta t_0}\Delta t_0 + C \Bigg| \longrightarrow \quad C = 2z(t,\Delta t_0) - z(t,2\Delta t_0)$$

$$u(t=0)=z(t,0)+O(\Delta t^2)=C+O(\Delta t^2)$$

ogólna procedura ekstrapolacyjna:

liczymy $z(t,\Delta t_i)$ z krokami czasowymi Δt_i, i=0,1,2,...,q
uzyskane punkty interpolujemy wielomianem stopnia q
liczymy jego wartość w Δt=0



$$z(t, \Delta t) = u(t) + \sum_{i=1} c_i(t) \Delta t^i$$

Rachunki dla dwóch kroków czasowych eliminują c_1, dla N kroków wyeliminują N-1 współczynników c_i

interpolacja schematem Aitkena-Nevilla (wygodniejszy niż wzór Newtona):
rekurencyjna generacja przybliżeń wyższego rzędu z przybliżeń rzędu niższego

$R_q^i(\Delta t)$ | wielomian interpolacyjny dla kroków:

$R_q^i(\Delta t_j) = z(t, \Delta t_j)$ $\quad$ *j=i,i+1, ... i+q*

pierwszy rozważany krok czasowy

$$R_q^i(\Delta t_j) = z(t, \Delta t_j)$$

rząd wielomianu
(ilość rozważanych kroków czasowych –1)

Algorytm Aitkena-Nevilla:

rekurencyjna generacja przybliżeń wyższego rzędu z przybliżeń rzędu niższego

$R_q^i(\Delta t)$ | wielomian interpolacyjny dla kroków:

$$R_q^i(\Delta t_j) = z(t, \Delta t_j) \qquad j=i,i+1, \dots\ i+q$$

spróbujmy wygenerować taki wielomian przy pomocy wielomianów niższego rzędu

$R_{q-1}^i(\Delta t)$ | punkty interpolacji: $i, i+1, \dots, i+q-1$

oraz

$R_{q-1}^{i+1}(\Delta t)$ punkty $i+1, i+1, \dots, i+q-1, i+q$

przy pomocy formuły:

$$R_q^i(\Delta t) = \Phi_{iq}(\Delta t) R_{q-1}^i(\Delta t) + (1 - \Phi_{iq}(\Delta t)) R_{q-1}^{i+1}(\Delta t)$$

gdzie: $\Phi_{iq}(\Delta t)$ | wielomian stopnia pierwszego

warunek interpolacji dla punktów i+1,i+2,...,i+q-1 jest spełniony dla każdego Φ

a dla brzegów: i oraz $i+q$ jeśli dodatkowo:
$$\Phi_{iq}(\Delta t_i) = 1$$
$$\Phi_{iq}(\Delta t_{i+q}) = 0$$

$$R_q^i(\Delta t) = \Phi_{iq}(\Delta t) R_{q-1}^i(\Delta t) + (1 - \Phi_{iq}(\Delta t)) R_{q-1}^{i+1}(\Delta t)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{iq}(\Delta t_i) &= 1 \\ \Phi_{iq}(\Delta t_{i+q}) &= 0 \end{aligned} \longrightarrow \Phi_{iq}(\Delta t) = \frac{\Delta t_{i+q} - \Delta t}{\Delta t_{i+q} - \Delta t_i}$$

co daje:

$$R_q^i(\Delta t) = \frac{(\Delta t_{i+q} - \Delta t) R_{q-1}^i(\Delta t) + (\Delta t - \Delta t_i) R_{q-1}^{i+1}(\Delta t)}{\Delta t_{i+q} - \Delta t_i}$$

następnie ekstrapolujemy
wynik do zerowego kroku czasowego

$$R_q^i(\Delta t = 0) = R_q^i$$

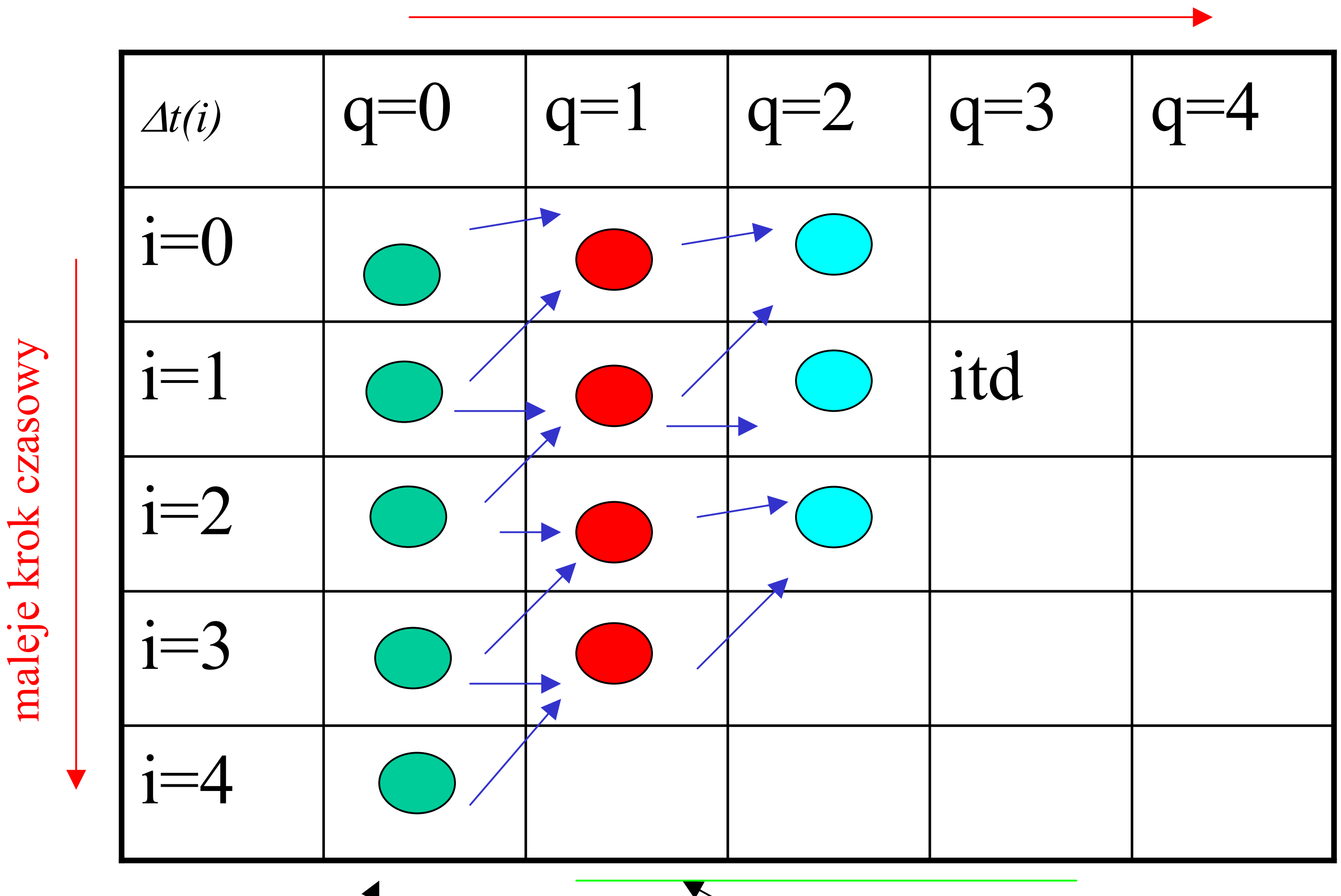
$$R_q^i = \frac{\Delta t_{i+q} R_{q-1}^i - \Delta t_i R_{q-1}^{i+1}}{\Delta t_{i+q} - \Delta t_i}$$

wzór na generowanie przybliżenia wg extrapolacji Richardsona
wyższego rzędu

Algorytm Aitkena-Nevilla

$$R_q^i = \frac{\Delta t_{i+q} R_{q-1}^i - \Delta t_i R_{q-1}^{i+1}}{\Delta t_{i+q} - \Delta t_i}$$

rośnie rząd wielomianu interpolacyjnego



wynik schematu dla chwili *t* uzyskane z krokiem Δt_i

wyniki ekstrapolacji Richardsona rzędu q

Przykład:

$u'(t) = -u$, $u(0)=1$, interesuje nas wartość u w chwili $t=1$

stosujemy jawny schemat Eulera i 9 różnych kroków czasowych $\Delta t(i)=2^{-i}$

dla $\Delta t(i)$ wykonujemy 2^i kroków aby dotrzeć do chwili t=1 i dostajemy wyniki:

i	w(t=1)
0	0.0000000
1	0.2500000
2	0.3164062
3	0.3436089
4	0.3560741
5	0.3620553
6	0.3649865
7	0.3664377
8	0.3671598

z błędem

i	exp(-1)-w(t=1)
0	0.368
1	0.118
2	0.515E-01
3	0.243E-01
4	0.118E-01
5	0.582E-02
6	0.289E-02
7	0.144E-02
8	0.720E-03

widzimy liniową zbieżność metody Eulera

tabela ekstrapolacji AN

i	q=0	1	2	3	4	5	6	7	8
0	0.0000000	0.5000000	0.3437500	0.3701057	0.3677749	0.3678819	0.3678794	0.3678794	0.3678794
1	0.2500000	0.3828125	0.3668113	0.3679206	0.3678786	0.3678795	0.3678794	0.3678794	
2	0.3164062	0.3708116	0.3677819	0.3678812	0.3678794	0.3678794	0.3678794		
3	0.3436089	0.3685393	0.3678688	0.3678795	0.3678794	0.3678794			
4	0.3560741	0.3680364	0.3678782	0.3678794	0.3678794				
5	0.3620553	0.3679178	0.3678793	0.3678794					
6	0.3649865	0.3678889	0.3678794						
7	0.3664377	0.3678818							
8	0.3671598								

.3678794412

$$R_q^i = \frac{\Delta t_{i+q} R_{q-1}^i - \Delta t_i R_{q-1}^{i+1}}{\Delta t_{i+q} - \Delta t_i}$$

dla q=1 : $2R_0^{i+1} - R_0^i$

dla q=2: $-4/3(R_1^i/4 - R_1^{i+1})$ itd.

$\Delta t(i) = 2^{-i}$

błąd

0	0.368	-0.132	0.241E-01	-0.223E-02	0.105E-03	-0.250E-05	0.399E-07	0.896E-08	0.915E-08
1	0.118	-0.149E-01	0.107E-02	-0.411E-04	0.847E-06	0.218E-09	0.920E-08	0.915E-08	
2	0.515E-01	-0.293E-02	0.975E-04	-0.178E-05	0.267E-07	0.906E-08	0.915E-08		
3	0.243E-01	-0.660E-03	0.106E-04	-0.860E-07	0.961E-08	0.915E-08			
4	0.118E-01	-0.157E-03	0.125E-05	0.363E-08	0.916E-08				
5	0.582E-02	-0.383E-04	0.160E-06	0.882E-08					
6	0.289E-02	-0.946E-05	0.277E-07						
7	0.144E-02	-0.234E-05							
8	0.720E-03								

najdokładniej

błąd przestaje maleć (skończona dokładność arytmetyki)

0	0.368	-0.132	0.241E-01	-0.223E-02	0.105E-03	-0.250E-05	0.399E-07	0.896E-08	0.915E-08
1	0.118	-0.149E-01	0.107E-02	-0.411E-04	0.847E-06	0.218E-09	0.920E-08	0.915E-08	
2	0.515E-01	-0.293E-02	0.975E-04	-0.178E-05	0.267E-07	0.906E-08	0.915E-08		
3	0.243E-01	-0.660E-03	0.106E-04	-0.860E-07	0.961E-08	0.915E-08			
4	0.118E-01	-0.157E-03	0.125E-05	0.363E-08	0.916E-08				
5	0.582E-02	-0.383E-04	0.160E-06	0.882E-08					
6	0.289E-02	-0.946E-05	0.277E-07						
7	0.144E-02	-0.234E-05							
8	0.720E-03								

podobny błąd uzyskuje się bez e. Richardsona (q=0) dla i = 22

aby wykonać rachunek z i=22 potrzeba 2^{22}= 4.2 miliona kroków czasowych

w ekstrapolacji Richardsona z algorytmem AN
wygenerowanie przybliżeń rzędu $q=0$ kosztuje
(1+2+4+ ... + 256)=2^9-1 = 511 kroków czasowych

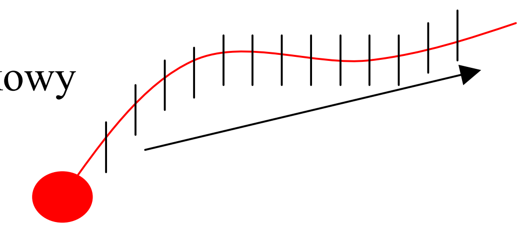
generacja tabeli AN jest (prawie) darmowa

co ilustruje nam potencjał ekstrapolacji R. w redukcji błędów

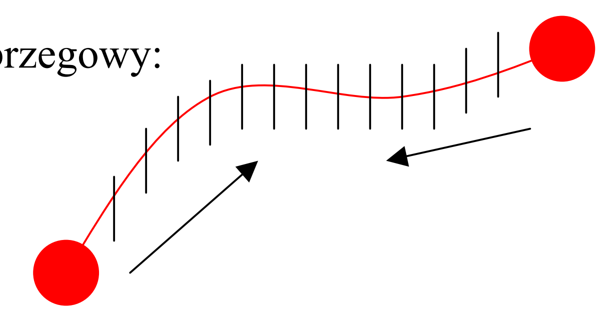
Równania różniczkowe zwyczajne: problem brzegowy [1D]

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.

$$\boxed{\begin{aligned} u(t=0) &= u_0 \\ \frac{du(t)}{dt} &= f(t,u) \end{aligned}}$$

równania różniczkowe cząstkowe: zależności **od czasu i położenia** pola elektrycznego, 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)

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

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

Problem brzegowy: równanie różniczkowe (na razie zwyczajne) + warunek na rozwiązanie na brzegu. 1D – brzeg to 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) $u(0)+cu'(0)=a$, $u(L)+du'(L)=b$

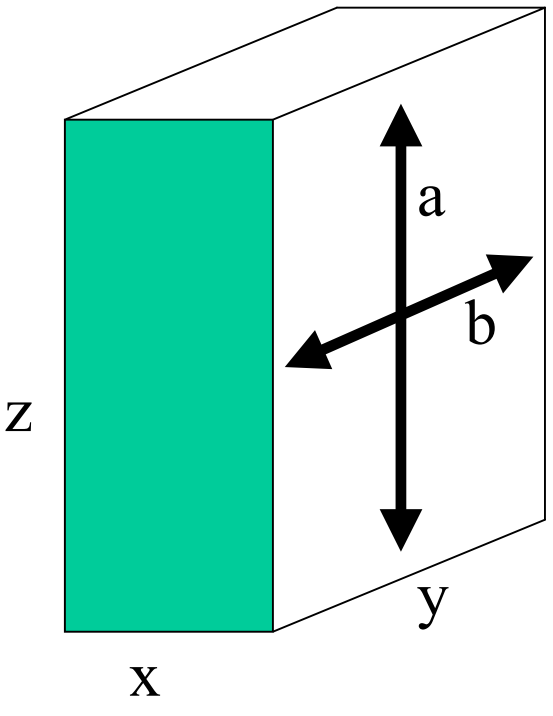
opis jednowymiarowy problemów wielowymiarowych

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

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

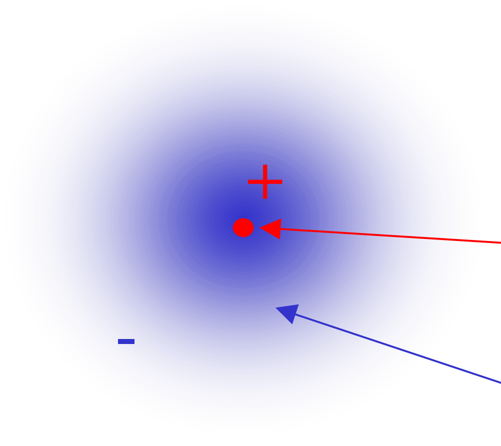
$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = -4\pi\rho(x)$$

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)=+δ³(r)* (jednostki atomowe)

gęstość ładunku elektronowego zależy tylko od odległości od jądra: *n(r)=- exp(-2r)/π.*

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

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

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

równanie jest liniowe

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

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

zasada superpozycji: $\phi_t = \phi + \phi_+$

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

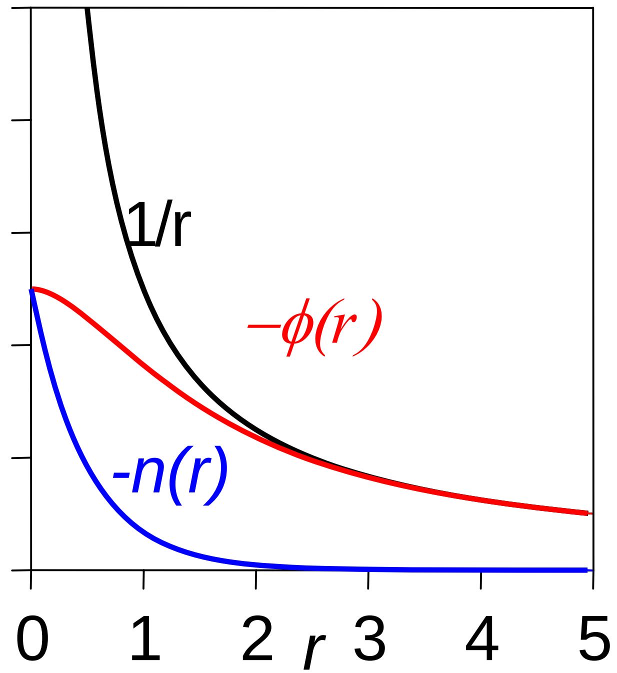
laplasjan we współrzędnych sferycznych

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

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

„punktowy ładunek
o nieskończonej gęstości w r=0”

$\phi_+ = 1/r$



składowa od gęstości elektronowej

n(r)=- exp(-2r)/π.

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

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

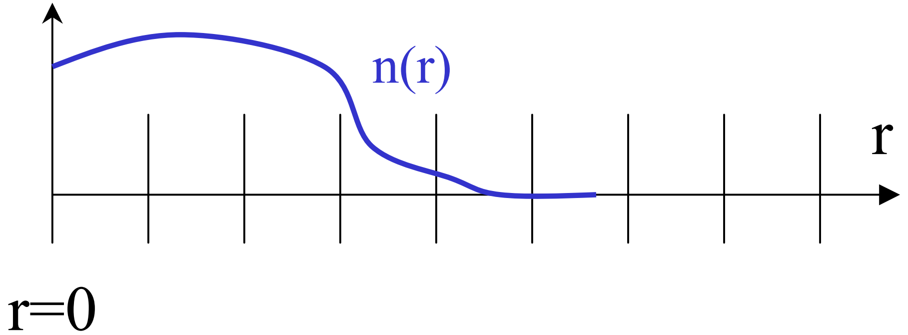
$$\nabla^2\phi = -4\pi n(r)$$

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*:

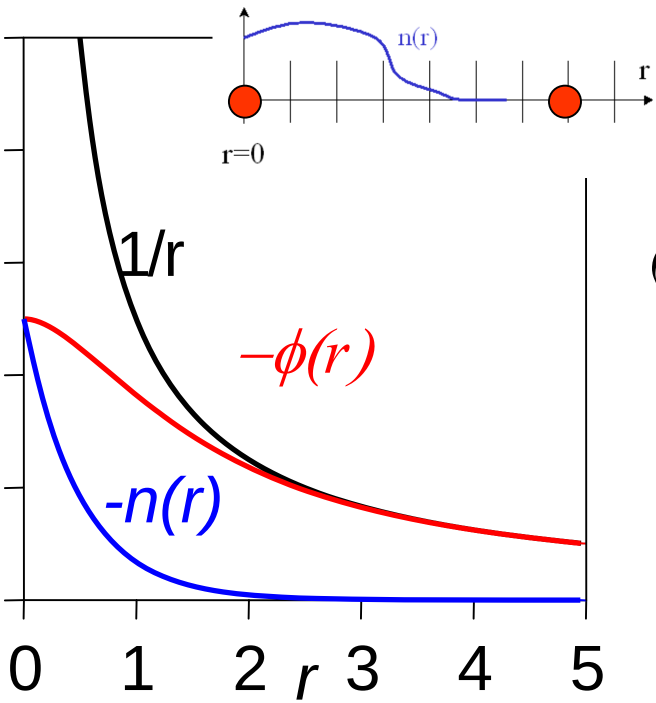


$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\phi}{dr}\right) = -4\pi n$$

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 *(r=0 oraz duże r)*



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

tw. Gaussa

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

r. Poissona
+ jakobian

(*) $$4\pi R^2 E = 4\pi \int_0^R r^2 n(r) dr$$

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

duże *R* – całka dąży jedynki (normalizacja *n*)

duże *R*: $E(R)=1/R^2$, $\phi = -1/R$

gdy powierzchnia pudła obliczeniowego obejmuje cały ładunek - potencjał -1/r – jak dla punktowego

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

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

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

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

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

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

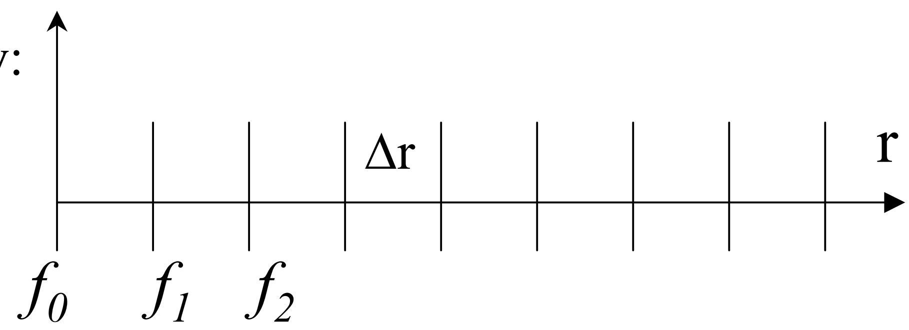
(1) plus (2) trójpunktowy iloraz drugiej pochodnej

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

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):

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

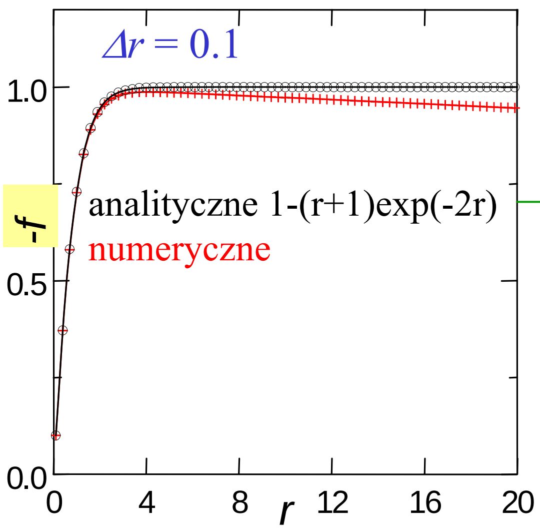
nasz problem początkowy - drugiego rzędu
dla warunku początkowego: potrzebna funkcja+pochodna
tzn. f_0 i f_1

Powiedzmy, że znamy
1) f_0 [bo znamy]
2) f_1 [to powiedzmy, w naszym przykładzie znamy wzór analityczny]
możemy więc wyliczyć f_2 i następne.

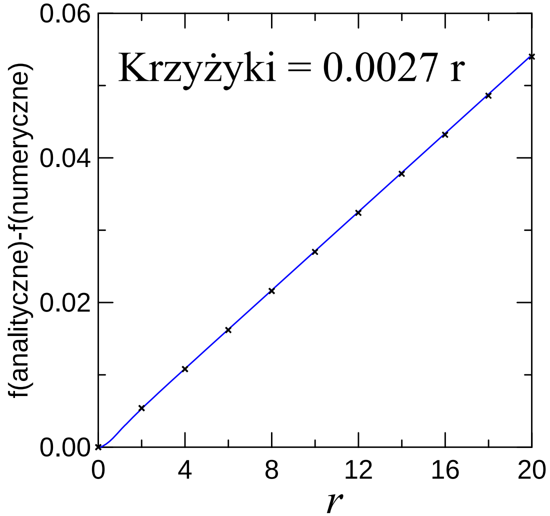
następnie: sprawdzimy, czy f_N spełni WB na prawym końcu.
Jeśli tak – problem rozwiązany

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

znamy $f_0 = 0$, f_1 wstawiamy z wzoru analitycznego, liczymy f_2 i następne.

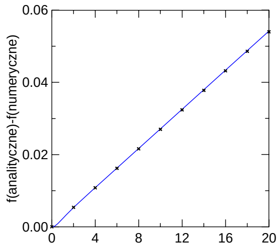


Katastrofa!



(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* !



Błąd jest linowy z r !
Jak to zrozumieć?

Pod nieobecność ładunku:
(równanie Laplace'a)

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

$$\frac{d^2 g}{dr^2} = 0 \longrightarrow$$

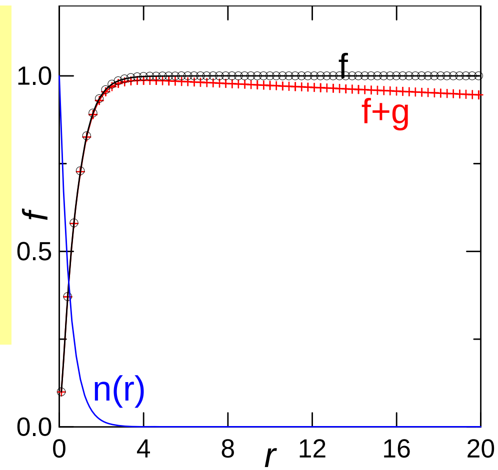
g(r)=ar+b.
u nas powinno być a=0, b=-1

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

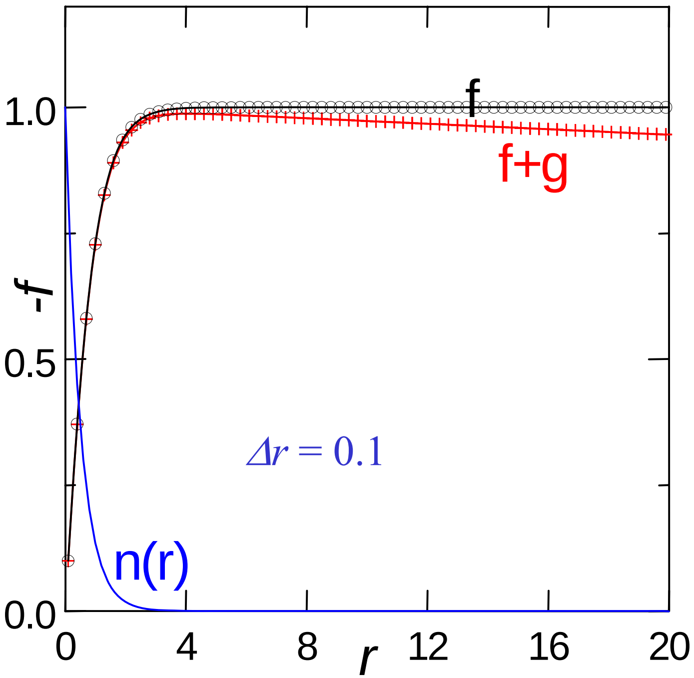
rozwiązanie równania Laplace'a *g* (jednorodnego)
możemy zawsze dodać do rozwiązania równania Poissona *f*

g+f spełni równanie Poissona, ale nie bez konsekwencji dla warunków brzegowych

Trójpunktowy schemat różnicowy drugiej pochodnej się dla funkcji typu *ar+b* się nie myli!
Wniosek:
Z obszaru w którym n<>0 iteracja wychodzi z błędem.
błąd z całkowania n(r)

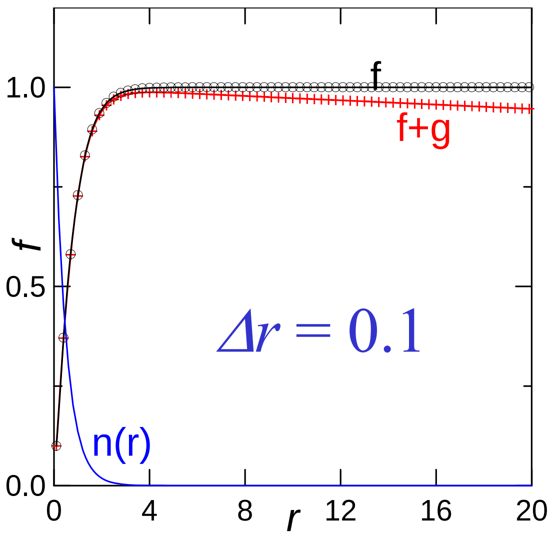


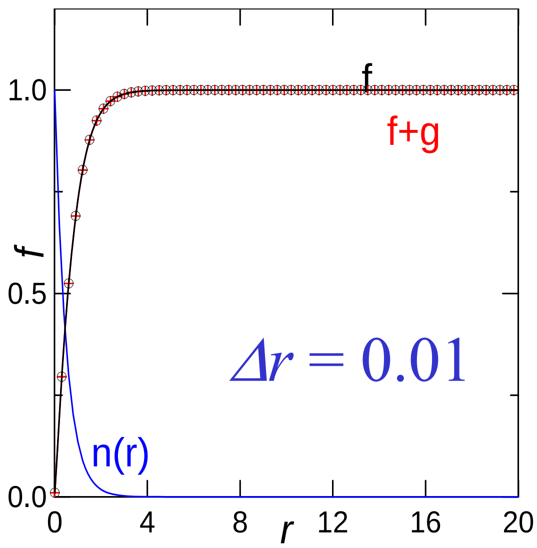
Cóż można poradzić żeby rozwiązanie numeryczne nie odklejało się od dokładnego dla dużych r ?



- 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

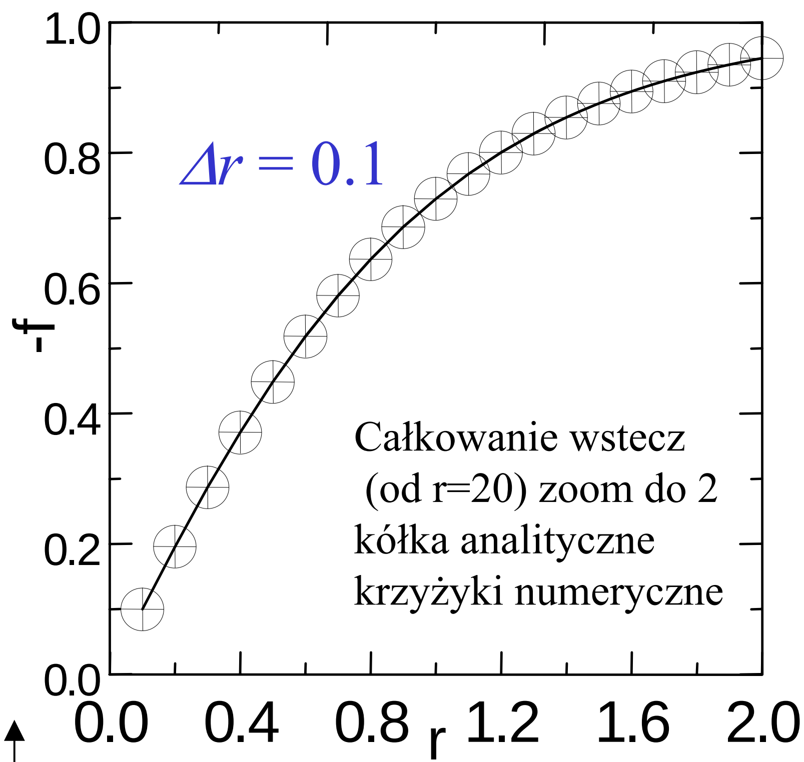
Zamiast do przodu:

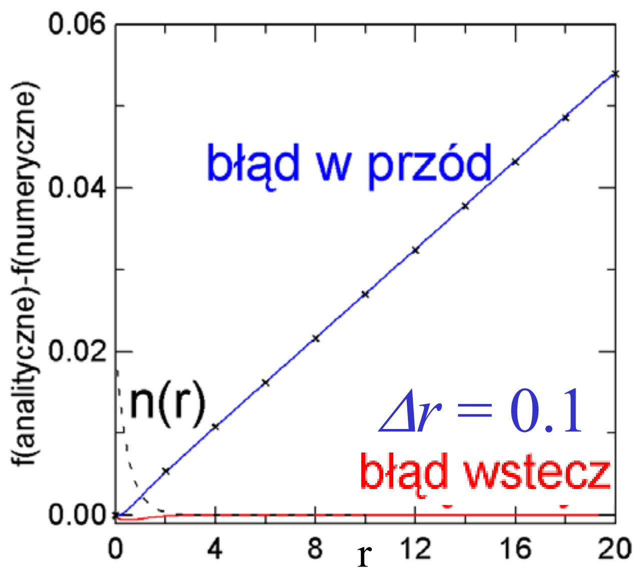
$$f_{i+1} = -4\pi r_i \Delta r^2 n_i + 2f_i - f_{i-1} \quad \Big| \quad f_0 = 0, f_1 = \text{analityczne}$$

scałkujemy wstecz:

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

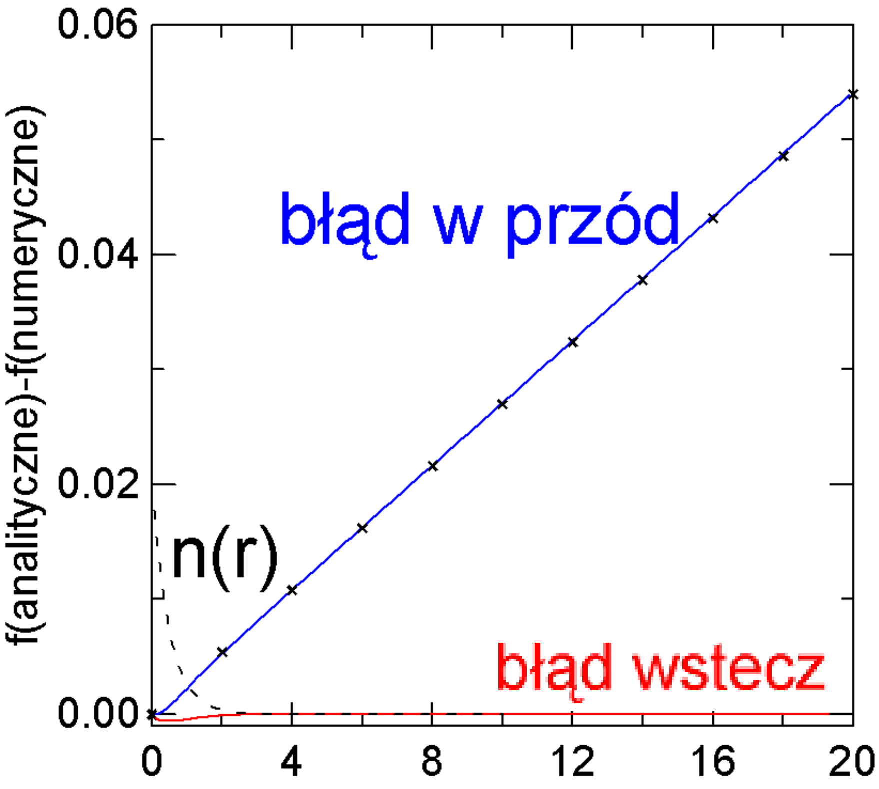
znamy potrzebne 2 wartości!





dla r=0 : f (numeryczne) $=6\times10^{-6}$
zamiast 0, lecz cóż to wobec jedynki?

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*

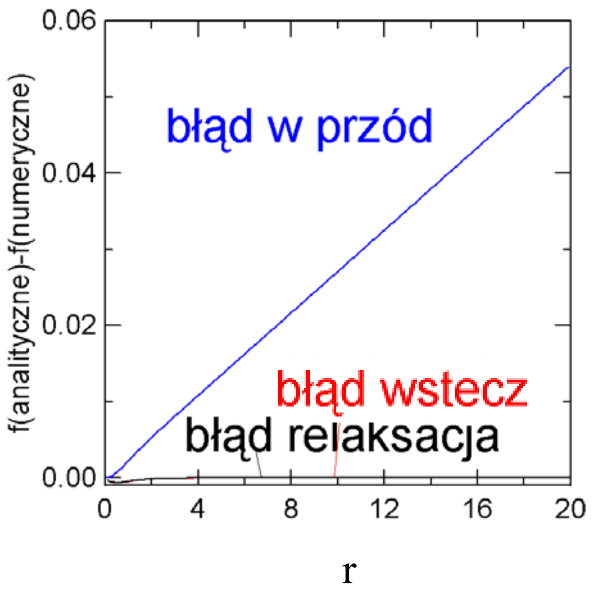
błąd pojawia się tam gdzie ładunek, ale zbytnio nie rośnie

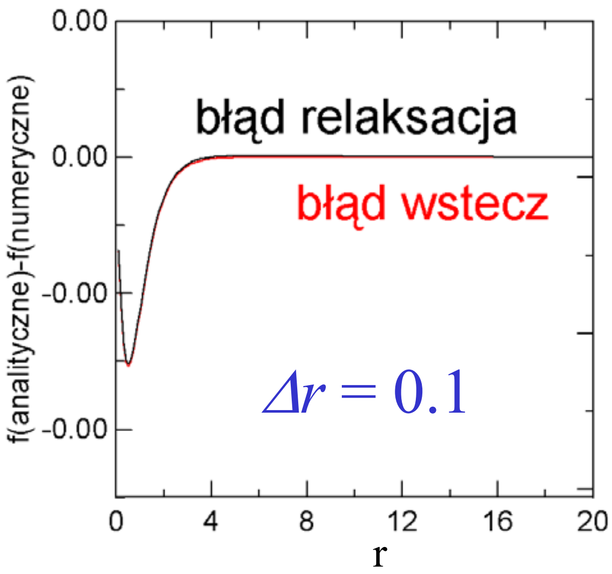
metoda różnic skończonych dla ustalonych WB

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

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

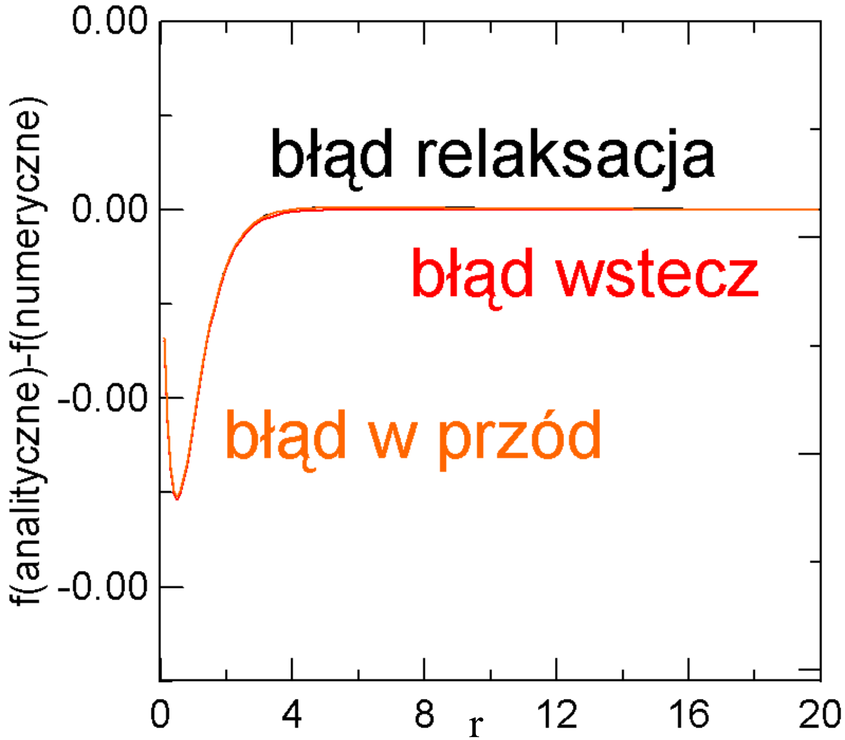
← układ równań rozwiązany iteracyjnie, (relaksacja)





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 $\Delta r=0.1$ „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 !

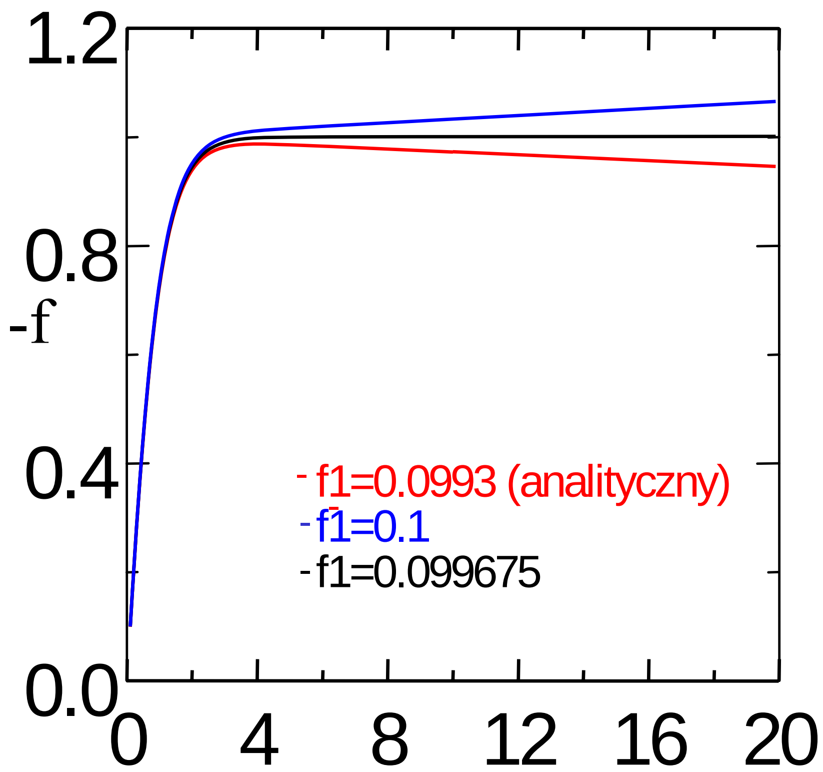
Uwaga: to samo rozwiązanie uzyskujemy każdą z 3 metod.
cały błąd leży teraz w ograniczonej dokładności ilorazu różnicowego.

dla całkowania do przodu:

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

Jeśli f_1= nie jest równe analitycznemu
optymalne f_1 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:

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

[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

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

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

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

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

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

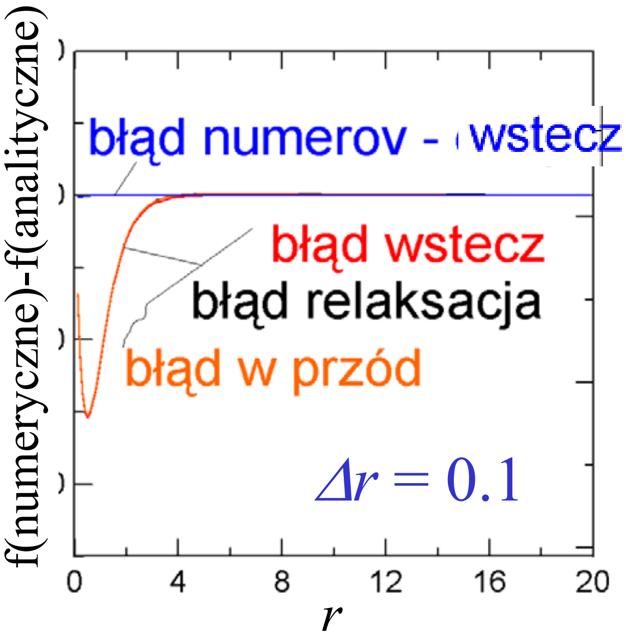
wykorzystać – można na podobnie wiele sposobów
tak - jak iloraz centralny drugiej pochodnej:
np. problem brzegowy – z relaksacją
lub jak problem początkowy

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

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

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

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



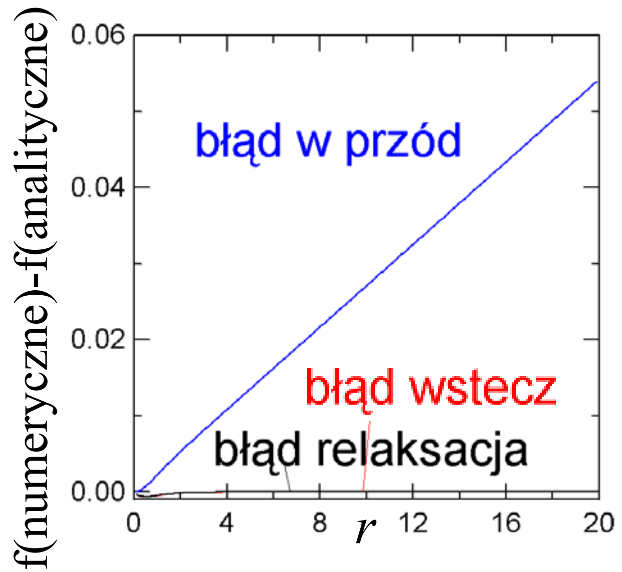
cała różnica w sposobie uwzględniania niejednorodności (źródeł)

$\longrightarrow$ 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:

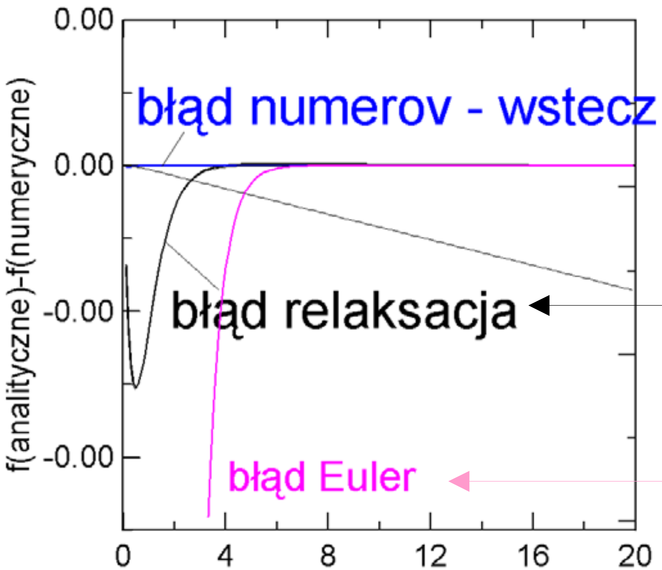
$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} = S(x) - g(x)u(x)$$

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

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
<u>całkowany wstecz</u>

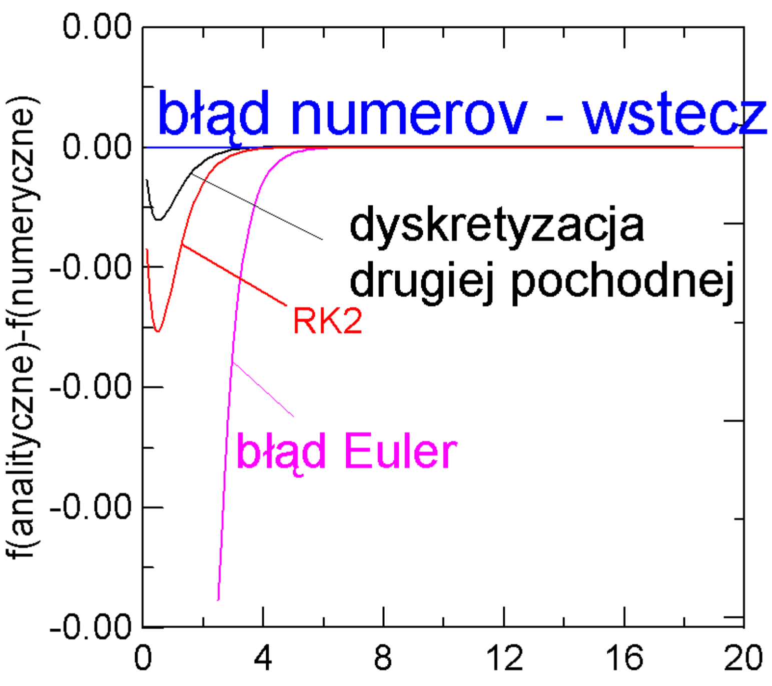
Euler $O(\Delta x^2)$

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 $O(\Delta x^3)$

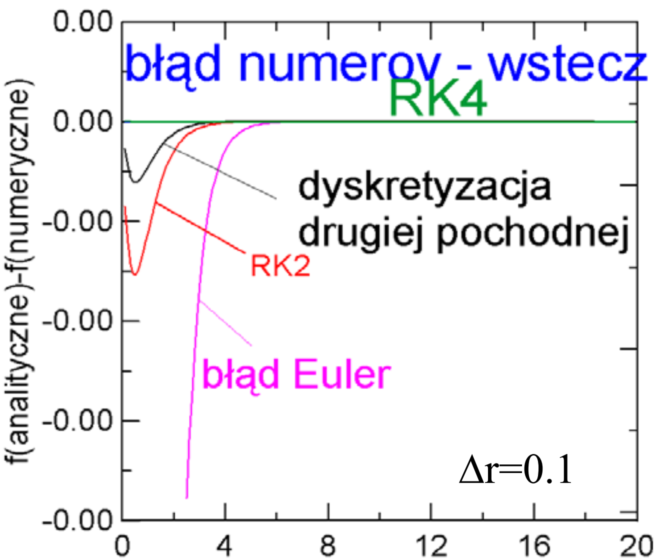
Dyskretyzacja drugiej pochodnej $O(\Delta x^4)$

Numerow $O(\Delta x^6)$

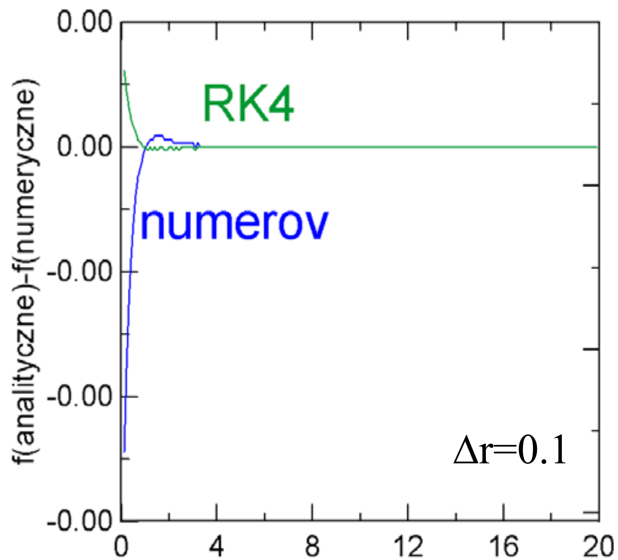
Znacznie lepiej niż Euler, ale wciąż gorzej niż dyskretyzacja drugiej pochodnej.

RK4: $O(\Delta x^5)$ Numerow $O(\Delta x^6)$

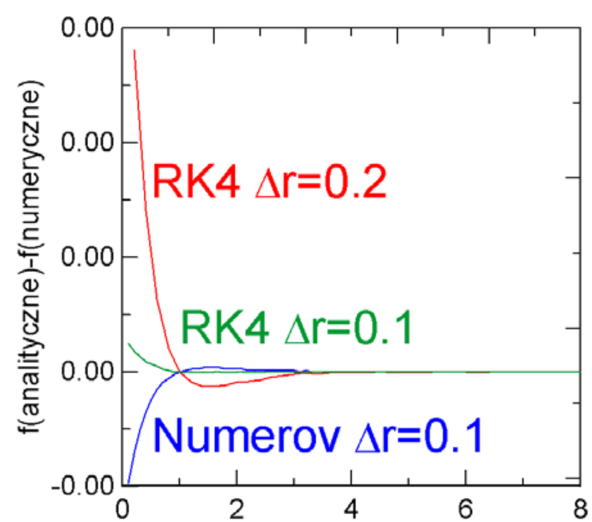
Dokładność bliska Numerowa



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

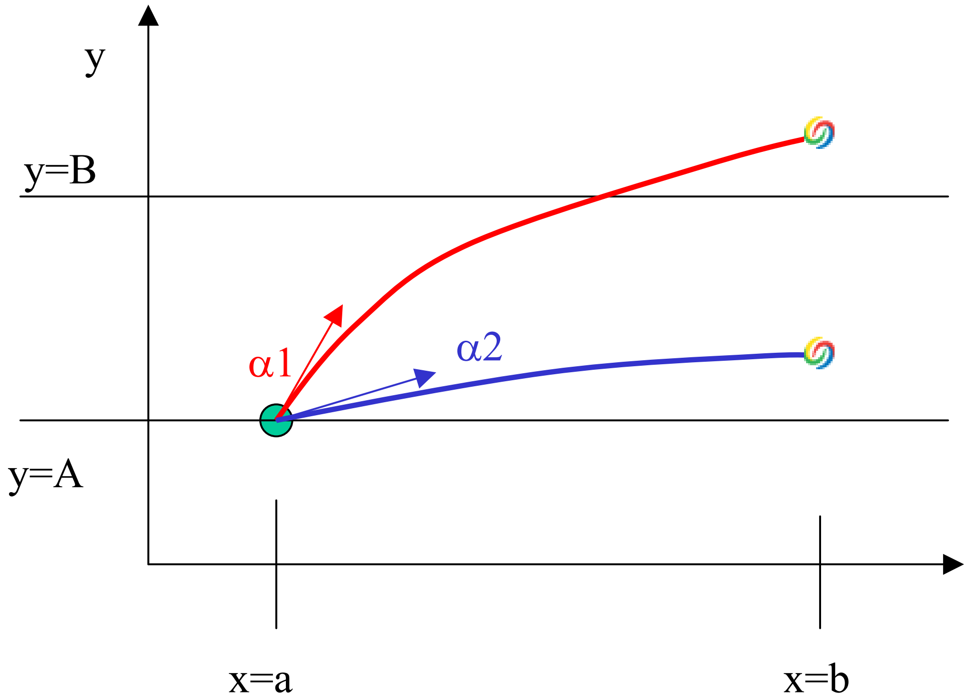
$$y_k(x) = y_k(x; \alpha)$$

rozwiązywać będziemy problem początkowy szukając takiej wartości parametru swobodnego aby

$$\boxed{y_1(b;\alpha)=B}$$

problem sprowadza się do rozwiązania nieliniowego równania na α

metoda strzałów



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

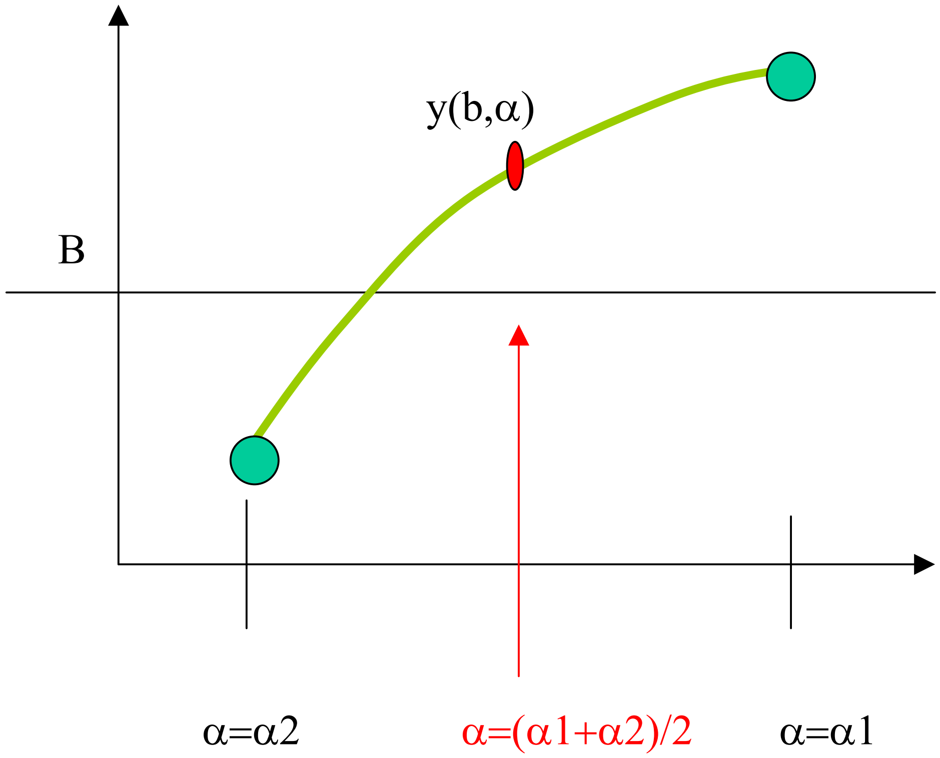
$$y_1(a) = A$$
$$y_2(a) = \alpha$$

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

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

metoda strzałów



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

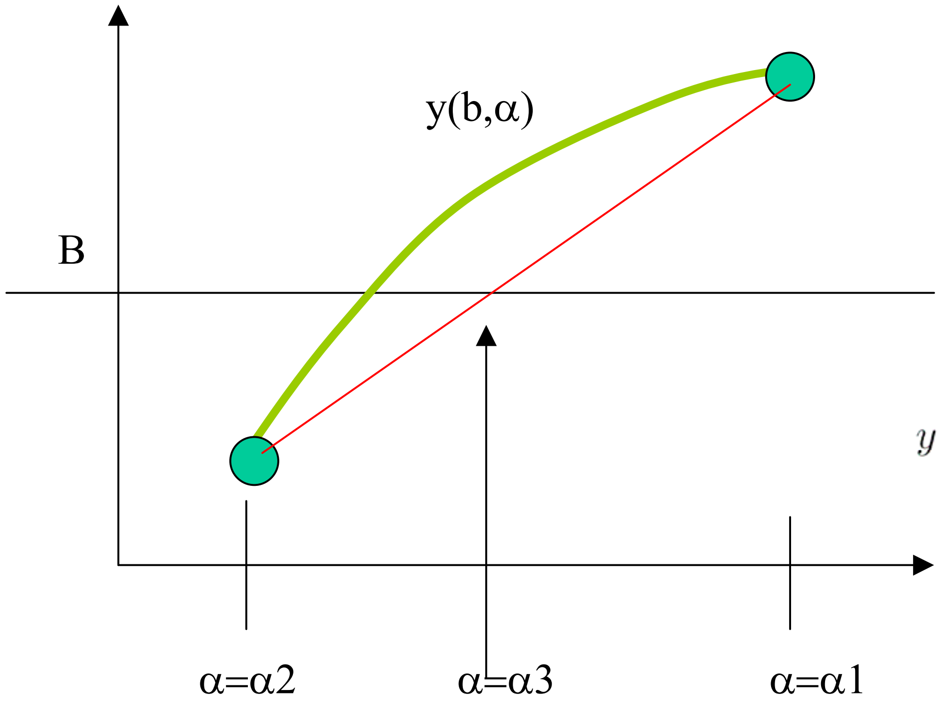
można rozwiązać **bisekcją**: wyliczyć $y_1(b;(\alpha 1+\alpha 2)/2)$

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 sie w

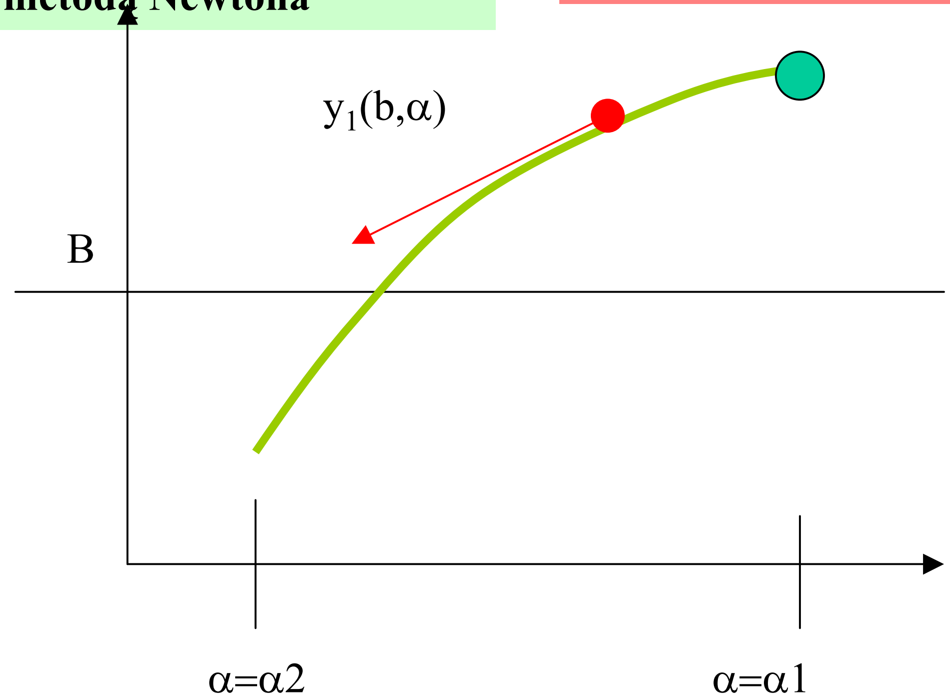
$$\alpha_3 \equiv \alpha := \frac{\alpha_2 y(b;\alpha_1) - \alpha_1 y(b;\alpha_2) + B(\alpha_1-\alpha_2)}{y(b;\alpha_1) - y(b;\alpha_2)}$$

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

możliwe użycie zamiast prostej: wielomianu interpolacyjnego stopnia 2

metoda strzałów z metodą 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:

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

wyznaczyć

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

różniczkujemy po α

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

nazywamy:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\frac{d}{dx}z_1(x;\alpha) = z_2(x;\alpha) \qquad z_1(a) = 0$$

$$\frac{d}{dx}z_2(x;\alpha) = z_1\frac{df}{dy_1} + z_2\frac{df}{dy_2} \qquad z_2(a) = 1$$

stowarzyszony
problem początkowy
do rozwiązania w funkcji *x*

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

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

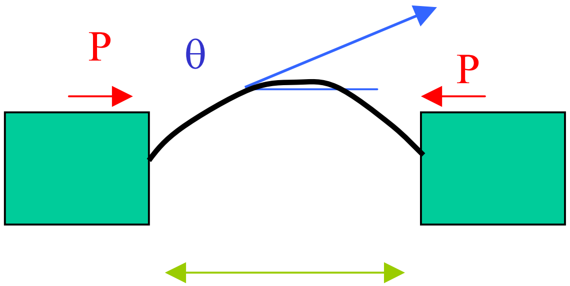
bisekcja:

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

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

przykład: pręt w imadle (*clamped elastica*)

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



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

znamy kąt θ(0)=β, θ(1)=- β, Z warunków symetrii: θ(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

zadane $\longrightarrow$ $y_1(0;\alpha) = \beta$

parametr do wyznaczenia $\longrightarrow$ $y_2(0;\alpha) = \alpha$

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

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

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

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

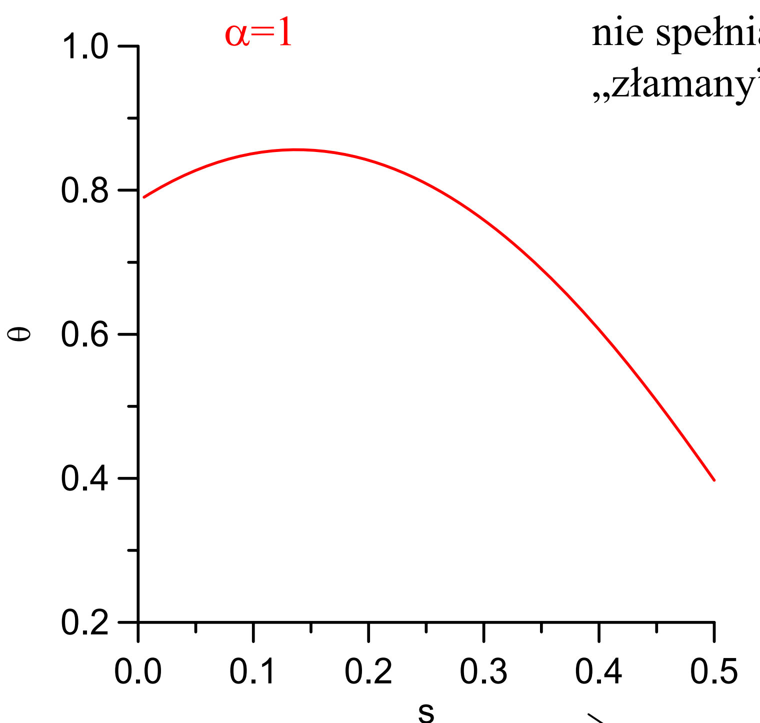
$$\boxed{\alpha^{\mu+1} = \alpha^{\mu} - \frac{y_1(1/2;\alpha^{\mu})}{z_1(1/2;\alpha^{\mu})}}$$

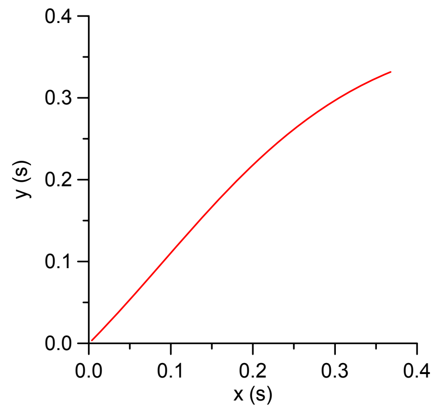
kolejność działań:

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

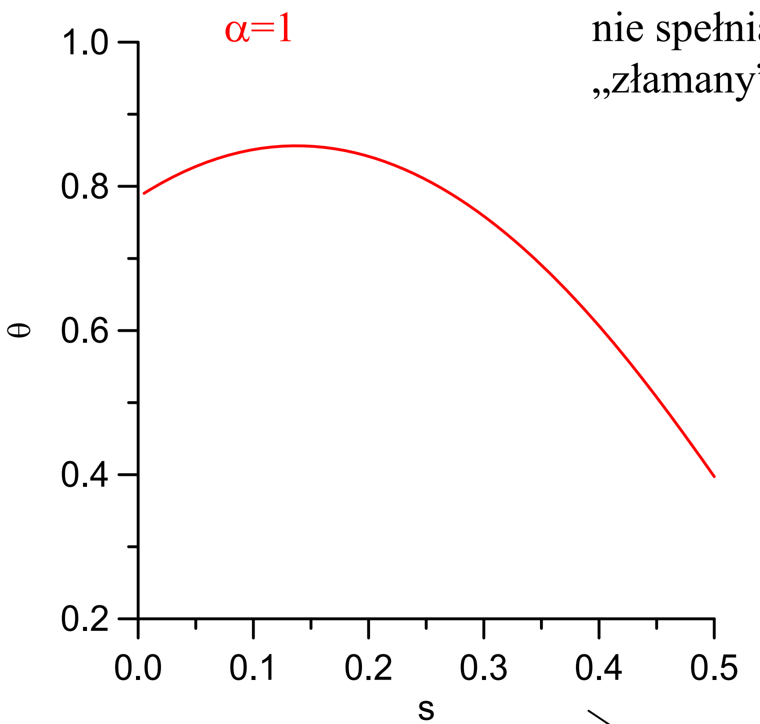




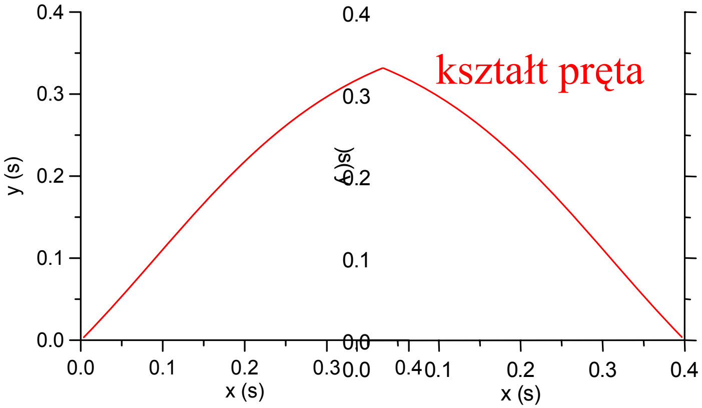
kształt pręta

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

zaciśnięty pręt β=π/4, na starcie pochodna kąta θ po *s*: α=1, P=10, problemy własne rozwiązane jawnym schematem Eulera z ds=0.5/100



nie spełnia warunku brzegowego w połowie pręta
„złamany" pręt

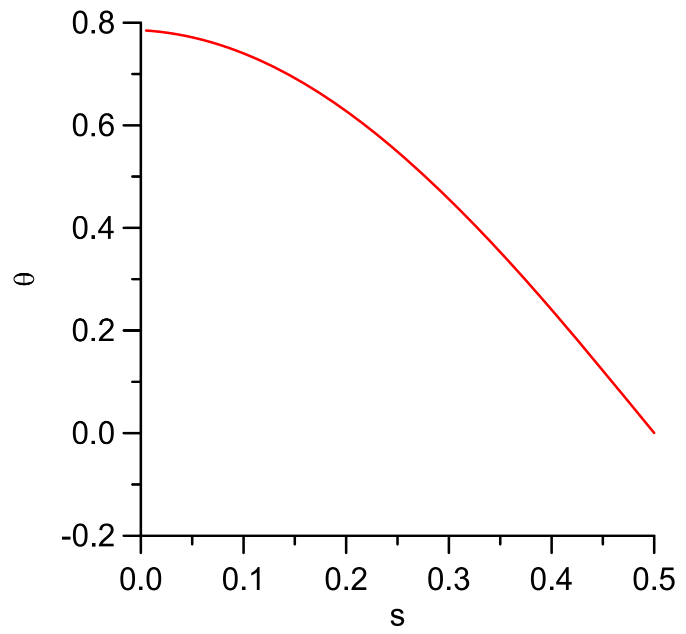


$$x(s) = \int_0^s \cos(\theta(u))du$$

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

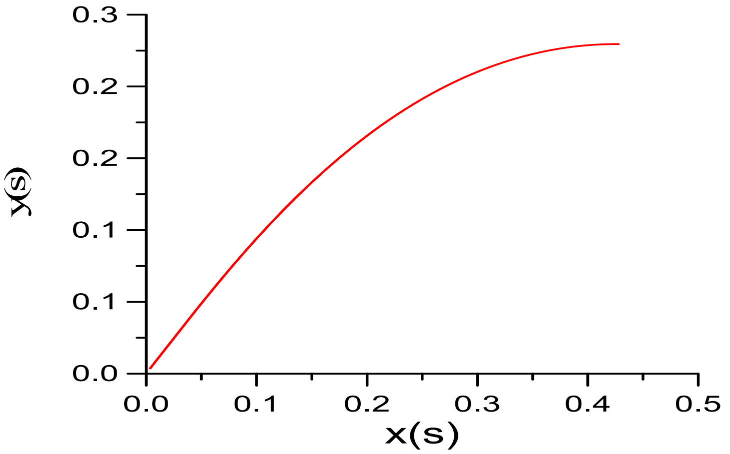
iteracja Newtona

	α	*θ(1/2,α)*
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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

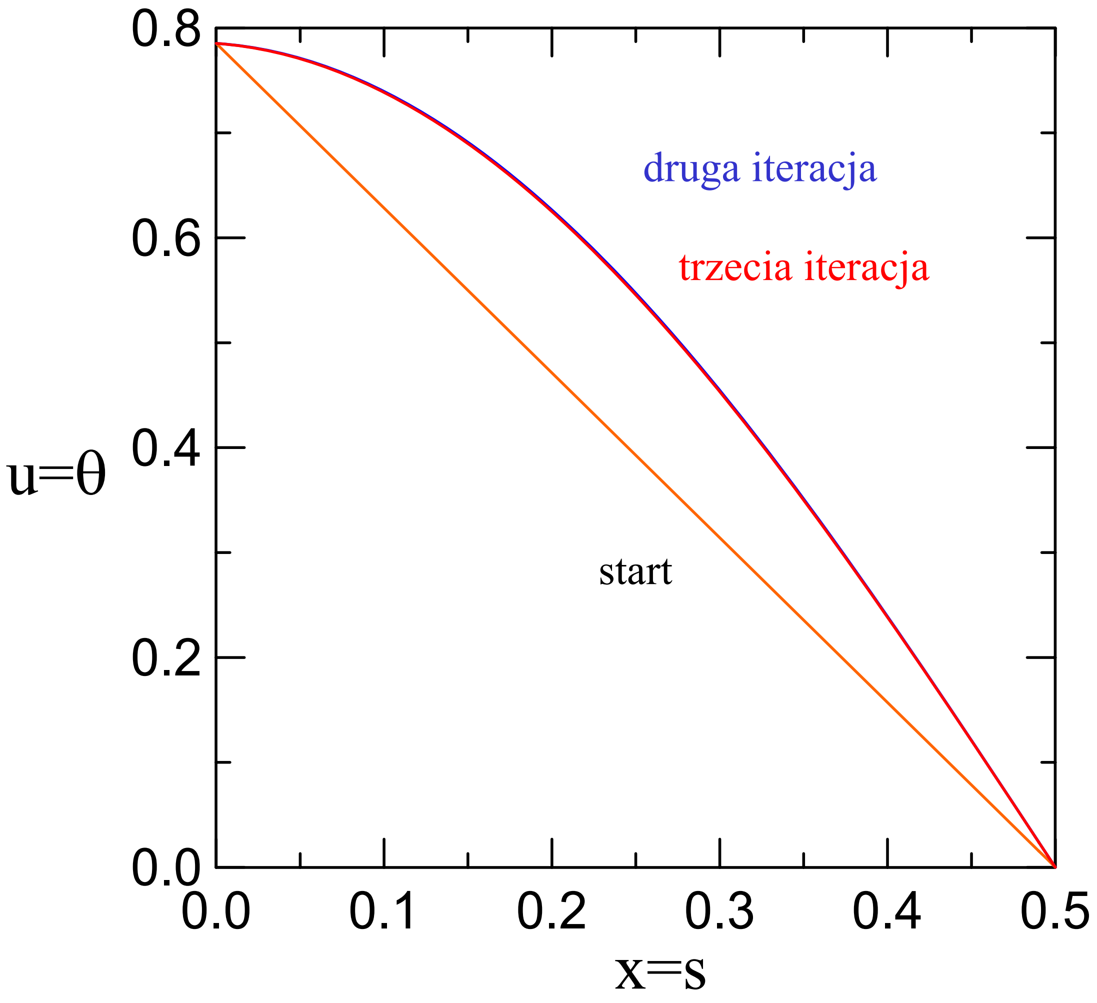
$$a_i^\mu = -2 + P\Delta x^2\cos(u_i)$$

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

1

Przykład: - problem pręta w imadle

Wyniki



Przykład: - problem pręta w imadle

Wyniki