#### Równanie Poissona i relaksacja

#### Treść

- typowe liniowe równania różniczkowe cząstkowe
- typowe warunki brzegowe
- ilorazy różnicowe pierwszej i drugiej pochodnej
- dyskretyzacja równania
- procedura relaksacji i nadrelaksacji
- całka działania i zbieżność iteracji
- metody dokładne i iteracyjne rozwiązywania układów równań liniowych (metody Gaussa, dekompozycij LU, Jacobiego, Gaussa-Seidla)
- wygładzanie błędów
- iteracja wielosiatkowa

# typowe cząstkowe liniowe równanie różniczkowe

- $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$  (hiperboliczne, klasyczne falowe)
- $i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + V(x, t)u$  (paraboliczne, Schrödingera, kwantowe falowe)
- $\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + S(x,t)$  (paraboliczne, przewodnictwa cieplnego, dyfuzji)
- $0 = \epsilon \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + S(x)$  (eliptyczne, Poissona)
- $\frac{\partial u}{\partial t} = c \frac{\partial u}{\partial x}$  (adwekcji, "równanie falowe pierwszego rzędu")
- obszar całkowania  $\Omega = [a, b]$
- u(a) = C (warunek brzegowy typu Dirichleta)
- $u'_{x}(a) = D$  (warunek brzegowy typu Neumanna)
- $u'_x(a) + cu(a) = E$  (warunek brzegowy typu Robina lub mieszany)

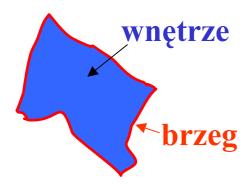
# równanie Poissona jako modelowe eliptyczne funkcjonał działania, zbieżność, relaksacje wielosiatkowe

Eliptyczne: opisuje stany stacjonarne

$$\nabla^2 \phi = -\rho$$

- 1) Rozkład potencjału elektrostatycznego [minimum *działania* w układzie ładunek/pole]
- 2) Rozkład temperatury przy stacjonarnym przepływie ciepła [granica czasowa problemu parabolicznego]

...



na brzegu musimy określić wartość rozwiązania lub jego pochodnej normalnej lub związek między nimi

#### ilorazy różnicowe

różniczkowanie numerycz-

interpolac wielomia-

dynamik punktu material

nego schemat

równania

równania nieliniow

biseko

Control

krok w schemaci niejawnyr

układy równań nieliniowych

- rachunek różniczkowy i pochodna funkcji f(x)
- $f'(x) \equiv \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x + \Delta x) f(x)}{\Delta x}$
- najprostsze metody numeryczne rozwiązywania równań różniczkowych przed przejściem granicznym
- pracujemy na ilorazach różnicowych oraz równaniach algebraicznych, które powstają z dyskretyzacji przestrzeni / czasu do punktów / chwil czasowych
- dyskretyzacja czasu / przestrzeni, ilorazy różnicowe zamiast pochodnych metoda różnic skończonych (finite difference method)

- szereg Taylora
- $y(t + \Delta t) = y(t) + \Delta_t \frac{dy}{dt}|_t + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2y}{dt^2}|_t + \cdots + \frac{\Delta t^n}{n!} \frac{d^Ny}{dt^N}|_t + \cdots$
- twierdzenie Taylora
- $y(t + \Delta t) = y(t) + \sum_{n=1}^{N} \left[ \frac{\Delta t^n}{n!} \frac{d^n y}{dt^n} |_t \right] + \frac{\Delta t^{N+1}}{(N+1)!} \frac{d^{N+1} y}{dt^{N+1}} |_{\tau}$ , gdzie  $\tau \in (t, t + \Delta t)$
- reszta znika w granicy małego kroku czasowego
- tempo zbieżności do zera jest  $\Delta t^{N+1}$ , co oznaczamy  $\left(\frac{\Delta t^{N+1}}{(N+1)!}\frac{d^{N+1}}{dt^{N+1}}|_{\tau}\right) = O(\Delta t^{N+1})$

# różniczkowanie numeryczne: dwupunktowy iloraz różnicowy pierwszej pochodnej

różniczkowanie numerycz-

szereg Taylora:

$$y(t+\Delta t) = y(t) + \Delta t \frac{dy}{dt}|_t + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2y}{dt^2}|_t + \cdots + \frac{\Delta t^n}{n!} \frac{d^Ny}{dt^N}|_t + \cdots$$

$$y(t + \Delta t) = y(t) + \Delta t \frac{dy}{dt}|_{t} + O(\Delta t^{2})$$

różniczkowanie numeryczne

szereg Taylora:

$$y(t+\Delta t) = y(t) + \Delta t \frac{dy}{dt}|_{t} + \frac{\Delta t^{2}}{2} \frac{d^{2}y}{dt^{2}}|_{t} + \frac{\Delta t^{3}}{3!} \frac{d^{3}y}{dt^{3}}|_{t} + \frac{\Delta t^{4}}{4!} \frac{d^{4}y}{dt^{4}}|_{t} + \dots$$

$$y(t - \Delta t) = y(t) - \Delta t \frac{dy}{dt}|_{t} + \frac{\Delta t^{2}}{2} \frac{d^{2}y}{dt^{2}}|_{t} - \frac{\Delta t^{3}}{3!} \frac{d^{3}y}{dt^{3}}|_{t} + \frac{\Delta t^{4}}{4!} \frac{d^{4}y}{dt^{4}}|_{t} + \dots$$

$$y(t+\Delta t)-y(t-\Delta t)=2\Delta t\frac{dy}{dt}|_{t}+2\frac{\Delta t^{3}}{3!}\frac{d^{3}y}{dt^{3}}|_{t}+\ldots$$

$$y(t + \Delta t) - y(t - \Delta t) = 2\Delta t \frac{dy}{dt}|_{t} + O(\Delta t^{3})$$

zamiast

### różniczkowanie numeryczne: schemat centralny pięciopunktowy

różniczkowanie numerycz-

szereg Taylora:

$$y(t + \Delta t) = y(t) + \Delta t \frac{dy}{dt}|_{t} + \frac{\Delta t^{2}}{2} \frac{d^{2}y}{dt^{2}}|_{t} + \frac{\Delta t^{3}}{3!} \frac{d^{3}y}{dt^{3}}|_{t} + \frac{\Delta t^{4}}{4!} \frac{d^{4}y}{dt^{4}}|_{t} + \dots$$

$$y(t - \Delta t) = y(t) - \Delta t \frac{dy}{dt}|_{t} + \frac{\Delta t^{2}}{2} \frac{d^{2}y}{dt^{2}}|_{t} - \frac{\Delta t^{3}}{3!} \frac{d^{3}y}{dt^{3}}|_{t} + \frac{\Delta t^{4}}{4!} \frac{d^{4}y}{dt^{4}}|_{t} + \dots$$

$$y(t + \Delta t) - y(t - \Delta t) = 2\Delta t \frac{dy}{dt}|_{t} + 2\frac{\Delta t^{3}}{3!} \frac{d^{3}y}{dt^{3}}|_{t} + O(\Delta t^{5})$$
 (1)

$$y(t+2\Delta t) = y(t) + 2\Delta t \frac{dy}{dt}|_{t} + 4\frac{\Delta t^{2}}{2} \frac{d^{2}y}{dt^{2}}|_{t} + 8\frac{\Delta t^{3}}{3!} \frac{d^{3}y}{dt^{3}}|_{t} + 16\frac{\Delta t^{4}}{4!} \frac{d^{4}y}{dt^{4}}|_{t} + \dots$$

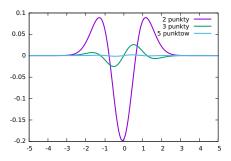
$$y(t+2\Delta t) - y(t-2\Delta t) = 4\Delta t \frac{dy}{dt}|_{t} + 2 \cdot 8 \frac{\Delta t^{3}}{3!} \frac{d^{3}y}{dt^{3}}|_{t} + O(\Delta t^{5})$$
 (2)

$$\blacksquare$$
 8 · (1) - (2)  $\rightarrow$ 

$$\frac{dy}{dt}|_{t} = \frac{1}{12\Delta t} \left[ y(t - 2\Delta t) - 8y(t - \Delta t) + 8y(t + \Delta t) - y(t + 2\Delta t) \right] + O(\Delta t^{4})$$

#### różniczkowanie numeryczne: schemat centralny pięciopunktowy

różniczkowanie numerycz-



Rysunek pokazuje różnicę między dokładną pochodną funkcji gaussowskiej  $\exp(-x^2)$  oraz jej przybliżeniem ilorazem różnicowym przy  $\Delta x = \frac{1}{5}$ , z ilorazem 2, 3 oraz 5 punktowym

## iloraz różnicowy drugiej pochodnej

- szereg Taylora
- $f(x + dx) = f(x) + dx \frac{df}{dx}|_{x} + \frac{dx^{2}}{2} \frac{d^{2}f}{dx^{2}}|_{x} + \frac{dx^{3}}{3!} \frac{d^{3}f}{dx^{3}}|_{x} + \frac{dx^{4}}{4!} \frac{d^{4}f}{dx^{4}}|_{x} + \frac{dx^{5}}{5!} \frac{d^{5}f}{dx^{5}}|_{x} + \frac{dx^{6}}{6!} \frac{d^{6}f}{dx^{6}}|_{\varepsilon}$
- $f(x dx) = f(x) dx \frac{df}{dx}|_{x} + \frac{dx^{2}}{2} \frac{d^{2}f}{dx^{2}}|_{x} \frac{dx^{3}}{3!} \frac{d^{3}f}{dx^{3}}|_{x} + \frac{dx^{4}}{4!} \frac{d^{4}f}{dx^{4}}|_{x} \frac{dx^{5}}{5!} \frac{d^{5}f}{dx^{5}}|_{x} + \frac{dx^{6}}{6!} \frac{d^{6}f}{dx^{6}}|_{\eta}$
- czerwone + niebieskie stronami, z tego wyliczyć wyrażenie z drugą pochodną

• 
$$dx^2 \frac{d^2 f}{dx^2}|_{x} = f(x + dx) + f(x - dx) - 2f(x) + O(dx^4)$$

• 
$$\frac{d^2f}{dx^2}|_X = \frac{f(x+dx)+f(x-dx)-2f(x)}{dx^2} + O(dx^2)$$

# dyskretna forma równania Poissona

• 
$$\frac{d^2f}{dx^2}|_{x} = \frac{f(x+dx)+f(x-dx)-2f(x)}{dx^2} + O(dx^4)$$

• 
$$\nabla^2 \phi = -\rho$$

• 1D: 
$$\frac{\phi(x+dx)+\phi(x-dx)-2\phi(x)}{dx^2} = -\rho(x)$$

• 2D:

$$\frac{\phi(x+dx,y)+\phi(x-dx,y)-2\phi(x,y)}{dx^2} \tag{1}$$

$$\frac{\phi(x,y+dy)+\phi(x,y-dy)-2\phi(x,y)}{dy^2}=-\rho(x,y) \tag{2}$$



 $x_{i-1} = x_i \cdot x_{i+1}$ 

Układ równań liniowych

#### równanie Laplace'a

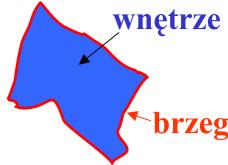
• 2D:

$$\frac{\phi(x+dx,y)+\phi(x-dx,y)-2\phi(x,y)}{dx^2} \tag{3}$$

$$\frac{\phi(x, y + dy) + \phi(x, y - dy) - 2\phi(x, y)}{dy^2} = 0$$
 (4)

- dla dx = dy:
- 2D:  $\phi(x + dx, y) + \phi(x dx, y) 2\phi(x, y) + \phi(x, y + dx) + \phi(x, y dx) 2\phi(x, y) = 0$
- albo
- $\phi(x + dx, y) + \phi(x dx, y) + \phi(x, y + dx) + \phi(x, y dx) = 4\phi(x, y)$

Warto wiedzieć: (zasada maximum) rozwiązanie równanie Laplace'a osiąga wartości ekstremalne na brzegach (dowód np. u Weinbergera)



dla metody RS:

$$\nabla^{2} \phi = 0$$

$$\downarrow$$

$$\Phi(i,j) = (\Phi(i-1,j) + \Phi(i,j-1) + \Phi(i+1,j) + \Phi(i,j+1))/4$$

skoro każdy punkt z wewnątrz obszaru całkowania jest średnią arytmetyczną z sąsiadów nigdy nie będzie większy od żadnego z nich

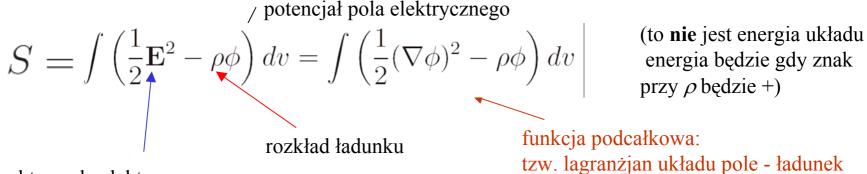
### iteracja relaksacyjna 2D

• 
$$\nabla^2 \phi = -\rho(x)$$

- z dx = dy
- $\frac{\phi(x+dx,y)+\phi(x-dx,y)+\phi(x,y-dx)+\phi(x,y+dx)-4\phi(x,y)}{dy^2}=-\rho(x,y)$
- dokładne rozwiązanie dyskretnej wersji równania Poissona spełnia warunek:
- $\phi(x, y) = \frac{dx^2 \rho(x, y) + \phi(x + dx, y) + \phi(x dx, y) + \phi(x, y dx) + \phi(x, y + dx)}{4}$
- pomysł na relaksację: przeiterować, może się zbiegnie, jeśli tak mamy rozwiązanie
- $\phi(x, y) := \frac{dx^2 \rho(x, y) + \phi(x + dx, y) + \phi(x dx, y) + \phi(x, y dx) + \phi(x, y + dx)}{4}$

# Z elektrostatyki poprzez metodę różnic skończonych do równania Poissona i metod relaksacji i nadrelaksacji .

Działanie dla układu ładunek ( $\rho$ ) + pole :



wektor pola elektrycznego

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

$$S = \min \quad \longrightarrow \quad \nabla^2 \phi = -\rho$$

Działanie jest najmniejsze dla potencjału, który spełnia równanie Poissona

Zobaczymy to w 1D:



działanie a równanie Poissona w 1D

$$S = \int_{-d/2}^{d/2} \left( \frac{1}{2} \left( \frac{d\phi}{dz} \right)^2 - \rho \phi \right) dz$$

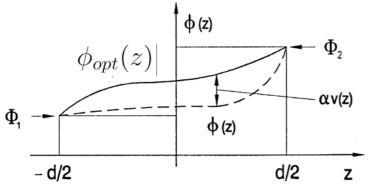
Z warunkami brzegowymi typu Dirichleta

$$\phi(z = -d/2) = \Phi_1$$
,  $\phi(z = d/2) = \Phi_2$ 

Dla jakiego  $\phi$  wartość działania jest ekstremalna ? (w praktyce minimalna, bo maksymalna nie istnieje).

Ogólny problem minimum funkcjonału (całki funkcjonalnej)

$$F[\phi(z)] = \int_{-d/2}^{d/2} f[\phi(z), \phi'(z); z] dz$$



 $|\phi_{opt}(z)|$  optymalny potencjał: minimalizuje działanie

 $-\Phi_{\rm 2}$   $\phi(z)$  "bliski" optymalnemu i spełniający te same warunki brzegowe

$$\phi(z) = \phi_{opt}(z) + \alpha v(z)$$
 dowolna funkcja ciągła z pochodną mały parametr

$$v(z = -d/2) = v(z = d/2) = 0$$

z definicji:  $F[\phi(z)] \ge F[\phi_{opt}(z)]$ 

$$F[\phi(z)] = \int_{-d/2}^{d/2} f[\phi_{opt}(z) + \alpha v(z), \phi'_{opt}(z) + \alpha v'(z); z] dz$$

Wartość α=0 jest optymalna:

$$\frac{d}{d\alpha} \left( \int_{-d/2}^{d/2} f[\phi_{opt}(z) + \alpha v(z), \phi'_{opt}(z) + \alpha v'(z); z] dz \right)_{\alpha=0} = 0$$

Pochodna pod całkę:

$$\int_{-d/2}^{d/2} \left[ \frac{\partial f}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial \alpha} + \frac{\partial f}{\partial \phi'} \frac{\partial \phi'}{\partial \alpha} \right]_{\alpha=0} dz = 0$$
(wstawiamy  $\alpha=0$ )
$$v(z) \qquad v'(z)$$

$$\int_{-d/2}^{d/2} \left[ \frac{\partial f}{\partial \phi_{opt}} v(z) + \frac{\partial f}{\partial \phi'_{opt}} v'(z) \right] dz = 0$$

$$\int_{-d/2}^{d/2} \left[ \frac{\partial f}{\partial \phi_{opt}} v(z) + \frac{\partial f}{\partial \phi'_{opt}} v'(z) \right] dz = 0$$

pochodna iloczynu [całkowanie przez części]

$$\frac{\partial f}{\partial \phi'_{opt}} v'(z) = \frac{d}{dz} \left[ \frac{\partial f}{\partial \phi'_{opt}} v(z) \right] - \left[ \frac{d}{dz} \frac{\partial f}{\partial \phi'_{opt}} \right] v(z)$$

$$\int_{-d/2}^{d/2} \left[ \frac{\partial f}{\partial \phi_{opt}} - \frac{d}{dz} \frac{\partial f}{\partial \phi'_{opt}} \right] v(z) + \left[ \frac{\partial f}{\partial \phi'_{opt}} v(z) \right]_{-d/2}^{d/2} = 0$$
dowolna
$$v(-d/2) = v(d/2) = 0$$

czyli:

$$\frac{\partial f}{\partial \phi_{opt}} - \frac{d}{dz} \frac{\partial f}{\partial \phi'_{opt}} = 0$$

równanie Eulera-Lagrange'a na funkcję dla której całka funkcjonalna minimalna

# Równanie Eulera-Lagrange'a dla energii układu ładunek+pole

$$S = \int_{-d/2}^{d/2} \left( \frac{1}{2} \left( \frac{d\phi}{dz} \right)^2 - \rho \phi \right) dz$$

$$f(\phi, \phi'; z) = \frac{1}{2} (\phi')^2 - \rho \phi$$

$$\frac{\partial f}{\partial \phi} - \frac{d}{dz} \frac{\partial f}{\partial \phi'} = 0$$

$$-\rho = \frac{d}{dz} \phi' = \phi''$$

$$\text{minimalne działanie dostajemy dla potencjału spełniającego równanie Poissona}$$

# Działanie na siatce różnicowej

$$S = \int_{-d/2}^{d/2} \left( \frac{1}{2} \left( \frac{d\phi}{dz} \right)^2 - \rho \phi \right) dz$$

$$\phi_n = \phi(z_n)$$

$$\rho_n = \rho(z_n)$$

$$S = \left| \sum_n \Delta z \left( \frac{1}{2} (\phi_n')^2 - \rho_n \phi_n \right) \right| \text{ Zdyskretyzowane działanie}$$

$$\phi_n' = \frac{\phi_n - \phi_{n-1}}{\Delta z}$$
 najprostszy iloraz różnicowy pierwszej pochodnej

Minimum zdyskretyzowanego działania

$$\frac{\partial S}{\partial \phi_i} = 0$$
 dla wszystkich oczek siatki  $i$ 

$$\frac{\partial S}{\partial \phi_i} = \sum_{n} \left[ \frac{1}{2\Delta z^2} \frac{\partial}{\partial \phi_i} \left( \phi_n - \phi_{n-1} \right)^2 - \rho_n \frac{\partial \phi_n}{\partial \phi_i} \right] = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial \phi_i} = \sum_{n} \left[ \frac{1}{\Delta z^2} \left( (\phi_n - \phi_{n-1}) \delta_{ni} - (\phi_n - \phi_{n-1}) \delta_{(n-1)i} \right) - \rho_n \delta_{ni} \right] = 0$$

wysumowane z deltami Kroneckera:

$$\frac{\partial S}{\partial \phi_i} = \frac{1}{\Delta z^2} \left( (\phi_i - \phi_{i-1}) - (\phi_{i+1} - \phi_i) \right) - \rho_i = 0$$

równania Poissona:

z zasady najmniejszego działania na siatce dostaliśmy dokładnie takie samo równanie, jak po bezpośredniej dyskretyzacji 
$$\frac{1}{\Delta z^2} \left( -\phi_{i-1} + 2\phi_i - \phi_{i+1} \right) = \rho_i$$

$$-\rho = \frac{d}{dz}\phi' = \phi''$$
 z ilorazem róznicowym drugiej pochodnej 
$$\phi_i'' = \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta z^2}$$

$$\phi_i'' = \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta z^2}$$

# wartość działania:

$$S = \int_{-d/2}^{d/2} \left( \frac{1}{2} \left( \frac{d\phi}{dz} \right)^2 - \rho \phi \right) dz$$

pozwala ocenić zbieżność procedur iteracyjnych ponadto: nieoceniona do kontroli jakości rozwiązania w metodzie elementów skończonych (wybór elementów, wybór funkcji kształtu)

# Zbieżność procedury relaksacyjnej

Przepis relaksacyjny

$$\frac{1}{\Delta z^2} \left( -\phi_{i-1} + 2\phi_i - \phi_{i+1} \right) = \rho_i \longrightarrow \phi_i' = \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} + \Delta z^2 \rho_i}{2}$$

Działanie: 
$$a = \sum_{n} \left[ \frac{1}{2\Delta z^2} \left( \phi_n - \phi_{n-1} \right)^2 - \rho_n \phi_n \right]$$

Przyczynek do a od punktu i:

$$a_i \times 2\Delta_z^2 = (\phi_i - \phi_{i-1})^2 + (\phi_{i+1} - \phi_i)^2 - 2\Delta z^2 \rho_i \phi_i$$
$$= 2\phi_i^2 + \phi_{i-1}^2 + \phi_{i+1}^2 - 2\phi_i (\phi_{i-1} + \phi_{i+1}) - 2\Delta z^2 \rho_i \phi_i$$

Wyliczmy zmianę funkcjonału działania jeśli iteracji poddany zostanie TYLKO i-ty punkt siatki.

$$(a'_{i} - a_{i}) \times (2\Delta z^{2}) = 2\phi'^{2}_{i} - 2\phi^{2}_{i} - 2(\phi'_{i} - \phi_{i})(\phi_{i-1} + \phi_{i+1}) - 2\Delta z^{2}\rho_{i}(\phi'_{i} - \phi_{i})$$

$$= -(\phi_{i+1} + \phi_{i-1} + \Delta z^{2}\rho_{i} - 2\phi_{i})^{2}/2$$

Relaksacja potencjału w każdym z punktów prowadzi do obniżenia wartości działania! [równanie P. zostanie rozwiązane gdy działanie obniży się do minimalnego]

# Nadrelaksacja i podrelaksacja

Uogólnijmy schemat relaksacyjny: do postaci:

$$\phi_i' = \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} + \Delta z^2 \rho_i}{2}$$

$$\phi_i' = (1 - \omega)\phi_i + \omega \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} + \Delta z^2 \rho_i}{2}$$

(wygląda jak

część starego rozwiązania+część nowego)

Wracamy do równania na zmianę działania:

$$(a'_{i} - a_{i}) \times (2\Delta z^{2}) = \left[ 2(\phi'_{i} - \phi_{i})(\phi'_{i} + \phi_{i} - (\phi_{i-1} + \phi_{i+1}) - \Delta z^{2}\rho_{i}) \right]$$

$$= 2\omega(\omega - 2) \left[ -\phi_{i} + \frac{1}{2}(\phi_{i+1} + \phi_{i-1} + \Delta z^{2}\rho_{i}) \right]^{2}$$
 <0 dla  $\omega \in (0,2)$ 

 $\omega = 1$  relaksacja

 $\omega \in (0,1)$  – podrelaksacja - mniej "nowego" rozwiązania akceptowane w iteracji

 $\omega \in (1,2)$  – nadrelaksacja – stare rozwiązanie jest usuwane z funkcji

uwaga: dotyczy relaksacji punktowej (nie globalnej)! Na laboratorium zobaczymy, że globalna niezbieżna dla ω>1

# nad-, pod- i relaksacja w praktyce (laboratorium)

Rozwiązanie:

$$\phi = 0 \quad \nabla^2 \phi = -\rho$$

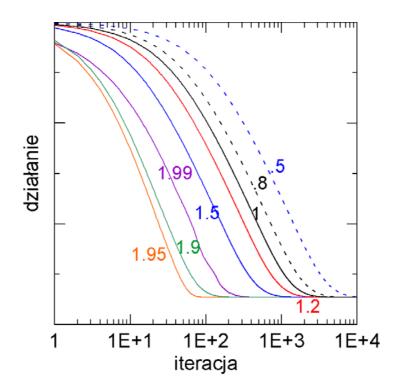
$$\phi = 0 \quad \nabla^2 \phi = -\rho$$

$$S = \int \left(\frac{1}{2} \mathbf{E}^2 - \rho \phi\right) dv = \int \left(\frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 - \rho \phi\right) dv$$

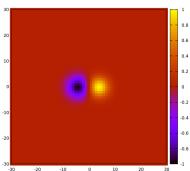
pętla po i

pętla po j
$$\phi'_{ij} = (1 - \omega)\phi_{ij} + \omega \frac{\phi_{(i+1)j} + \phi_{(i-1)j} + \phi_{i(j+1)} + \phi_{i(j-1)} + \Delta x^2 \rho_i}{4}$$
$$\phi_{ij} = \phi'_{ij}$$

$$\phi_{ij} = \phi'_{ij}$$



- równanie Poissona w 2D
- $\nabla^2 u = -\rho(x, y)$
- gdzie gęstość ładunku  $\rho(x,y) = \exp(-\frac{(x-x_0)^2+y^2}{d^2}) \exp(-\frac{(x+x_0)^2+y^2}{d^2}), d=4, x_0=4.$



- równanie Poissona w 2D
- $\nabla^2 u = -\rho(x, y)$
- gdzie gęstość ładunku  $\rho(x,y) = \exp(-\frac{(x-x_0)^2+y^2}{d^2}) \exp(-\frac{(x+x_0)^2+y^2}{d^2}), d=4, x_0=4.$
- Siatka  $[-N, ..., N] \times [-N, ..., N]$  z krokiem dx = 1 w obydwu kierunkach.
- Układ w metalowym uziemionym pudle u(x, y) = 0 gdy |x| = N lub |y| = N. Przyjmujemy N = 31.
- Warunek początkowy do rozwiązania: przyjmujemy u=0.
- Przepis relaksacyjny
- $u(i,j) := \frac{u(i+1,j)+u(i-1,j)+u(i,j+1)+u(i,j-1)+\rho(i,j)dx^2}{4}$ .
- Jedna iteracja procedury relaksacji polega na zastosowaniu wzoru (2) dla wszystkich punktów na siatce poza brzegiem.



Zbieżność iterowanej funkcji śledzić licząc całkę z lagranżjanu układu ładunek-pole

$$a = \int_{S} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^{2} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^{2} - \rho(i, j) u(i, j) \right] dx dy, \tag{1}$$

• Operator pochodnej jest antyhermitowski  $(f(x), \nabla g(x)) = -(\nabla f(x), g(x))$ , więc

$$a = -\int_{S} \left[ \frac{1}{2} \left( u \frac{\partial^{2} u}{\partial x^{2}} \right) + \frac{1}{2} \left( u \frac{\partial^{2} u}{\partial y^{2}} \right) + \rho(i, j) u(i, j) \right] dx dy, \tag{2}$$

w wersji dyskretnej

$$a = -\sum_{i,i-N+1}^{N-1} \left[ \frac{1}{2} u(i,j) \frac{u(i+1,j) + u(i-1,j) - 2u(i,j)}{dx^2} \right]$$
(3)

$$+ \frac{1}{2}u(i,j)\frac{u(i,j+1) + u(i,j-1) - 2u(i,j)}{dx^2}$$
 (4)

$$+ \rho(i,j)u(i,j)]dx^2.$$
 (5)

- Im niższa wartość a tym bliżej dokładnego rozwiązania.
- Jakość rozwiązania przybliżonego można również ocenić odwracając równanie Poissona.

$$\rho'(x,y) = -\frac{u(i+1,j) + u(i-1,j) + u(i,j-1) + u(i,j+1) - 4u(i,j)}{dx^2}.$$
 (6)

W jakim stopniu ρ' reprodukuje ρ.

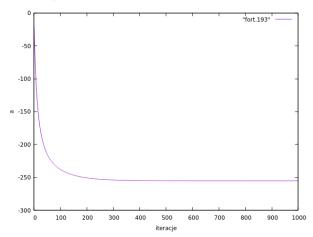


#### Zadanie 1.1 (40 pkt)

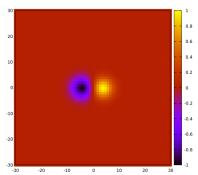
- Liczymy do 500 iteracji pętli relaksacyjnej.
- Startujemy od u = 0.
- 1.1. Narysować a od numeru iteracji.
- 1.2. Po setnej i pięćsetnej iteracji narysować *u* oraz:

• 1.3. 
$$\rho'$$
 i  $\delta(x, y) = \rho'(x, y) - \rho(x, y)$ .

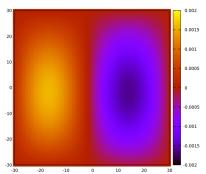
- film labez.gif
- · całka funkcjonalna



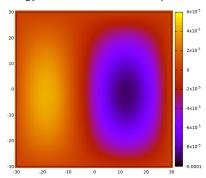
• odtworzenie gęstości po 500 iteracjach



różnica gęstość odtworzona i dokładna po 500 iteracjach



• różnica gęstość odtworzona i dokładna po 1000 iteracjach



uwaga: gładki błąd

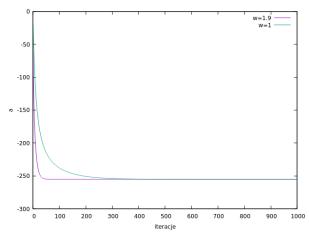
#### Zadanie 1.2 (40 pkt)

Modyfikacja wzoru relaksacyjnego

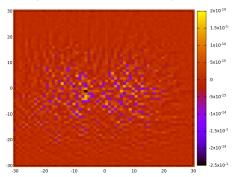
$$u(i,j) := (1-w)u(i,j) + w\frac{u(i+1,j) + u(i-1,j) + u(i,j+1) + u(i,j-1) + \rho(i,j)dx^2}{4}, \quad (7)$$

z w > 1 daje przepis na iterację nazywaną nadrelaksacją, która bywa szybciej zbieżna od relaksacji dla w > 1. Przyjąć w = 1.9 i powtórzyć zadanie 1.1.

• działanie: relaksacja i nadrelaksacja



różnica gęstość odtworzona i dokładna po 1000 iteracjach (nadrelaksacja)



• uwaga: błąd znacznie mniejszy, ale nie gładki.

Zdyskretyzowane równanie Poissona jako układ równań liniowych

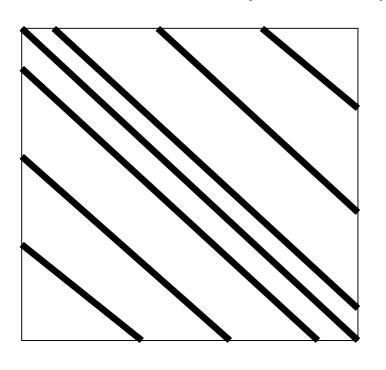
Metoda różnic skończonych

$$\phi_i'' = \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{\Delta z^2}$$

Układ równań Au=b

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad u = \begin{pmatrix} \phi(-d/2) \\ \phi(-d/2 + \Delta z) \\ \phi(-d/2 + 3\Delta z) \\ \phi(-d/2 + 4\Delta z) \\ \dots & & & \\ \phi(d/2 - \Delta z) \\ \phi(d/2) \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ -\Delta z^2 \rho(-d/2 + \Delta z) \\ -\Delta z^2 \rho(-d/2 + 3\Delta z) \\ -\Delta z^2 \rho(-d/2 + 3\Delta z) \\ -\Delta z^2 \rho(-d/2 + 4\Delta z) \\ \dots & & \\ -\Delta z^2 \rho(d/2 - \Delta z) \\ \phi(d/2) \end{pmatrix}$$

niezerowe elementy w macierzy A (N na N), dla 3D równania Laplace'a



macierze są duże: rozmiar dla 3D:  $N=10^6$  już w najprostszych zastosowaniach (100 na 100 na 100), ale do zapamiętania najwyżej  $7 \times 10^6 \times 8$  bajtów = 55 MB

faktycznie dla równania Laplace'a wystarczy pamiętać strukturę (kilka liczb)

Rozwiązać metodą dokładną czy iteracyjną?

# dokładne metody rozwiązywania układów równań liniowych

Bartłomiej Szafran

14 kwietnia 2020

• 
$$x_1 + x_2 + 0x_3 + 3x_4 = 4$$
 (1)

• 
$$2x_1 + x_2 - x_3 + x_4 = 1$$
 (2)

• 
$$3x_1 - x_2 - x_3 + 2x_4 = -3$$
 (3)

• 
$$-x_1 + 2x_2 + 3x_3 - x_4 = 4$$
 (4)

- używamy (1) aby wyeliminować x<sub>1</sub> z pozostałych równań
- (2) 2(1) zamiast (2)
- (3) 3(1) zamiast (3)
- (4) + (1) zamiast (4)

• 
$$x_1 + x_2 + 0x_3 + 3x_4 = 4$$
 (1)

• 
$$0x_1 - 4x_2 - x_3 - 7x_4 = -15$$
 (3)

- używamy (2) aby wyeliminować x<sub>2</sub> z pozostałych równań
- (3) 4(2) zamiast (3)
- (4) + 3(2) zamiast (4)

• 
$$x_1 + x_2 + 0x_3 + 3x_4 = 4$$
 (1)

• 
$$0x_1 + 0x_2 + 3x_3 + 13x_4 = 13$$
 (3)

• 
$$0x_1 + 0x_2 + 0x_3 - 13x_4 = -13$$
 (4)

- URL został zredukowany do postaci trójkątnej, dolnoprzekątniowej, która pozwala na rozwiązanie przed wyliczenie kolejnych x<sub>i</sub> o malejącym indeksie i (backsubstitution)
- $x_4 = 1$ ,

• 
$$3x_3 + 13 = -13 \rightarrow x_3 = 0$$

• 
$$-x_2 - 5 = -7 \rightarrow x_2 = 2$$

• 
$$x_1 + 2 + 3 = 4 \rightarrow x_1 = -1$$

• 
$$Ax = b$$

• 
$$E_1$$
:  $a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1$ 

• 
$$E_2$$
:  $a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2$ 

- •
- $E_n$ :  $a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n$
- macierz rozszerzona  $\tilde{\mathbf{A}} = [\mathbf{A}|\mathbf{b}]$  rozmiar  $n \times (n+1)$  z  $a_{k,n+1} = b_k$
- jeśi  $a_{11} \neq 0$  wykonujemy  $E_j \frac{a_{j1}}{a_{11}} E_1 \rightarrow E_j$  dla  $j = 2, \dots n$
- itd
- jeśi  $a_{ii} \neq 0$  wykonujemy  $E_j rac{a_{ji}}{a_{ii}} E_i 
  ightarrow E_j$  dla  $j = i+1, \ldots n$
- ${}^{\bullet} \ \tilde{\textbf{A}} \to \tilde{\textbf{A'}}$

$$\bullet \ \tilde{\mathbf{A}}' = \left[ \begin{array}{cccccc} a'_{11} & a'_{12} & \dots & a'_{1n} & \vdots & a'_{1,n+1} \\ 0 & a'_{22} & \dots & a'_{2n} & \vdots & a'_{2,n+1} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a'_{nn} & \vdots & a'_{n,n+1} \end{array} \right]$$

$$\bullet \ \tilde{\mathbf{A}}' = \begin{bmatrix} a'_{11} & a'_{12} & \dots & a'_{1n} & \vdots & a'_{1,n+1} \\ 0 & a'_{22} & \dots & a'_{2n} & \vdots & a'_{2,n+1} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a'_{nn} & \vdots & a'_{n,n+1} \end{bmatrix}$$

$$a'_{11}x_1$$
  $a'_{12}x_2$  ...  $a'_{1n}x_n$  =  $a'_{1,n+1}$   
0  $a'_{22}x_2$  ...  $a'_{2n}x_n$  =  $a'_{2,n+1}$   
... ... ... ...

$$x_n = \frac{a'_{n,n+1}}{a'_{n,n}}$$

• 
$$x_{n-1} = \frac{a'_{n-1,n+1} - a'_{n-1,n} x_n}{a'_{n-1,n-1}}$$

• 
$$x_i = \frac{a'_{i,n+1} - \sum_{j=i+1}^{n} a'_{i,j} x_j}{a'_{i,i}}$$



- (i)-ty krok: jeśi  $a_{ii}^{(i)} 
  eq 0$  wykonujemy  $E_j rac{a_{ji}}{a_{ij}} E_i 
  ightarrow E_j$  dla  $j=i+1,\dots n$
- procedura zawiedzie jeśli a<sup>(i)</sup><sub>ii</sub> pivot będzie zerowy

• przykład 
$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 \\ 2 & -2 & 3 & -3 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 4 & 3 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 2 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 4 \end{bmatrix} \rightarrow (2) \leftrightarrow (3)$$

- Jeśli wygeneruje się zerowy pivot, lub bardzo blisku zeru, należy zamienić miejscami równanie (i) oraz (k) > (i), takie że  $a_{kk}^i$  duże
- Gaussian elimination with pivoting and backsubstitution



- · liczba opracji dla eliminacji Gaussa
- dla danego i, dla  $E_i \frac{a_{ij}}{a_{ij}} E_i \rightarrow E_i$  dla  $j = i, \dots n$
- liczba operacji dzieleń: (n-i), liczba mnożeń  $(n-i) \times (n-i)$
- liczba dodawań:  $(n-i) \times (n-i)$
- dla danego i operacji jest rzędu n²
- ogólnie liczba operacji dla eliminacji jest rzędu n³
- dla podstawienia wstecznego: liczba operacji jest n²

# faktoryzacja macierzy

- problem:
- Ax = b
- rozwiązywany wielokrotnie dla różnych prawych stron
- dobrą inwestycją jest faktoryzacja macierzy na iloczyn macierzy trójkątnych (koszt n³, tak że kolejne prawe strony znajdziemy wykonując podstawienia podobne do backsubstitution).
- dekompozycja LU: iloczyn dolno- L i górno- U przekątniowych macierzy
- A = LU
- LUx = b
- Ux = y(2)
- Ly = b (1) rozwiązujemy na y
- kiedy (1) rozwiązane, rozwiązujemy (2)

#### dekompozycja LU

problem:

• **A** = **LU**, 
$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kj}$$
,  $a_{ij} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} + u_{ij}$ 

$$\bullet \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \ddots & u_{2n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & u_{nn} \end{bmatrix}$$

- $a_{1j} = u_{1j}$  (pierwszy wiersz **U**)
- $a_{i1} = I_{i1}u_{11} \rightarrow I_{i1}$  (pierwsza kolumna **L**)
- $a_{2j} = u_{2j} + l_{21}u_{1j} \rightarrow u_{2j}$  (drugi wiersz **U**)
- $a_{j2} = l_{j1} u_{12} + l_{j2} u_{22} \rightarrow l_{j2}$  (druga kolumna **L**)
- złożoność n³, po faktoryzacji iloczyn diagonali U to wyznacznik A.



#### dekompozycja LU

• Ly = b
$$\begin{bmatrix}
1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
l_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\
\vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\
l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & 1
\end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$
• Ux = y
$$\begin{bmatrix}
u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} \\
0 & u_{22} & u_{23} & \ddots & u_{2n} \\
\vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \dots & u_{nn}
\end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

#### dekompozycja LU

- ogólne metody na rozwiązywanie układów równań liniowych, dla problemu  $n \times n$  wykorzystują pamięć rzędu  $n^2$
- z góry znany czas rozwiązania problemu, rzędu  $n^3$

# LU: wariant dla macierzy trójprzękątniowej

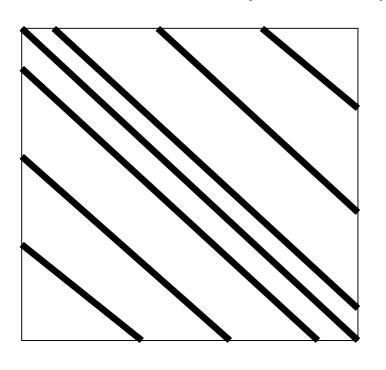
$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_1 & c_1 \\ b_2 & a_2 & c_2 \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & b_n & a_n & c_n \end{pmatrix}$$

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

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

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} a_1 & c_1 \\ & & & \\ &$$

niezerowe elementy w macierzy A (N na N), dla 3D równania Laplace'a



macierze są duże: rozmiar dla 3D:  $N=10^6$  już w najprostszych zastosowaniach (100 na 100 na 100), ale do zapamiętania najwyżej  $7 \times 10^6 \times 8$  bajtów = 55 MB

faktycznie dla równania Laplace'a wystarczy pamiętać strukturę (kilka liczb)

Rozwiązać metodą dokładną czy iteracyjną?

# Rozwiązujemy raczej metodą iteracyjną a nie dokładną:

```
metody "dokładne":
```

- •przepis dający rozwiązanie w ściśle określonej liczbie kroków
- •złożoność rzędu N³ [(operacje na macierzy El. Gaussa, LU N³) podstawienie N²]
- operacje na macierzy niszczą jej rzadką, pasmową strukturę (ogólna macierz double 10<sup>6</sup> na 10<sup>6</sup> około 1 TB)

```
metody "iteracyjne": x:=Mx+c (dla układu Ax=b, macierz iteracji M, różna od A)
```

- każda iteracja N² operacji
- nie zmienia struktury macierzy
- •problem zbieżności i strategii prowadzenia iteracji

układ równań: Ax=b

metody iteracyjne, postać ogólna: x = Mx + c

konstrukcja M: dokładne rozwiązanie układu musi spełniać przepis iteracyjny x=Mx+c dobrze gdy M rzadka (dla Jakobiego jest, ale dla GS – nie)

równanie własne 
$$Mv_l = \lambda_l v_l$$

metody iteracyjne zbieżne wtedy i tylko wtedy, gdy promień spektralny macierzy iteracji M [największy moduł wartości własnej]

$$\rho(M) < 1$$