MIT OCW Hesapsal Bilim 18.085 Ders 2

Bir diferansiyel denklemle baslayip cozebilecegimiz bir ayriksal (discrete) probleme nasil ulasiriz? Ikinci turevi iceren basit bir diferansiyel denkleme bakalim

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

$$u(0) = 0, \ u(1) = 0$$

Eksi isareti var cunku ikinci turevler negatif kesin (negative definite) seylerdir ve eksi isareti bu durumu telafi etmek icin, onu pozitif kesin hale cevirmek icin konuldu. Ayrica dikkat edersek sınır (boundary) sartlari var, her iki ucta da fonksiyona sifir degeri vermisiz, her iki ucta da onu "sabitlemisiz". Dikkat edelim, bu baslangic deger probleminden farkli, u, x'in bir fonksiyonu, t yani zamanin degil. Diyelim ki bu problem iki tarafi sabitlenmis bir elastik cubugu temsil ediyor, $f(x)$ cubuk uzerindeki her x noktasindaki yuku gosteriyor. Bu derste $f(x) = 1$ alacagiz, yani

$$-\frac{d^2u}{dx^2} = 1$$

Amacimiz bir diferansiyel denklem alip, onu ayriksal olarak temsil edebilmek, yani soyle

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

Bu denklem ikinci farkliliklari (second difference) gosteriyor.

Diferansiyelden (differential) farkliliklara (differences) gecisin birkac yontemi olabilir.

Birinci Farkliliklar (Ileri Dogru)

$$\Delta_F u = \frac{u(x+h) - u(x)}{h}$$

Ayriksal: $(u_{i+1} - u_i)/h$

Birinci Farkliliklar (Geriye Dogru)

$$\Delta_B u = \frac{u(x) - u(x-h)}{h}$$

Ayriksal: $(u_{i-1} - u_i)/h$

Birinci Farkliliklar (Ortalanmis)

$$\Delta_C u = \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h}$$

Ayriksal: $(u_{i+1} - u_{i-1})/h$

Bunlar Calculus'tan hatirlanabilecek seyler, fakat burada h limitte sifira dogru gitmiyor. Hesapsal dunyada h bizim belirledigimiz bir mesafe, belki 1, belki 0.1. O kadar bir hesapsal adim atmayi biz seciyoruz, her sey ayriksal.

Ayrica Calculus'ta hep $\Delta_F u$ gosterilir ve yaklasiksal olarak tureve esittir yani $u'(x)$. Geriye adim da vardir, hesapsal olarak ileri adim kadar iyidir, ve o da asagi yukari tureve esittir. Cok onemli bir farklilik hesabi ise ortalanmis (centered) olandir, bu hesap ileri ve geri farkliliklarin ortalamasidir, ayni sekilde asagi yukari tureve esittir.

Bastaki denklemimize birinci turevi dahil etmedik, cunku birinci turevler anti-simetriktir.

Birinci farkliliklar yontemine donelim, tureve ne kadar yakindirlar?

Birinci Farkliliklar (Ileri Dogru)

$$\Delta_F u \approx u'(x) + O(h)$$

Birinci Farkliliklar (Geriye Dogru)

$$\Delta_B u \approx u'(x) + O(h)$$

Birinci Farkliliklar (Ortalanmis)

$$\Delta_C u \approx u'(x) + O(h^2)$$

$O(h)$ h'ye oranli (order of h) anlamina gelir, gercek degerden "kesilip atilmis fark" oldugunu farz edelim. Ortalama icin niye $O(h^2)$? Hesabi yapalim. Taylor serilerinin ne oldugunu hatirlayalim ve $u(x+h)$ acilimini yapalim. Dikkat, ayriksal formla degil, surekli fonksiyonla calisiyoruz, surekli fonksiyon uzerinde "ayriksal bir adim" atilinca ne olacagini bulmaya calisiyoruz, bu sekilde surekli formatta, cebirsel bir kural elde etmeye ugrasiyoruz.

$$u(x+h) = u(x) + hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) + \frac{h^3}{6}u'''(x)...$$

Taylor acilimlarinda ve hesapsal bilimde ikinci seviye kesinlik (accuracy) cogunlukla yeterli oluyor. Hesapsal kodlari gelistirirken, test ederken tipik olarak birinci seviyede baslanir, ve nihai urun, sonuc ortami (production) icin 2. seviye eklenir. Devam edelim, geriye dogru:

$$u(x-h) = u(x) - hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) - \frac{h^3}{6}u'''(x) + ...$$

Ortalanmis farklilik icin iki formulu birbirinden cikartiriz, ve $2h$'ye boleriz.

$$u(x+h) - u(x-h) = 2hu'(x) + \frac{h^3}{3}u'''$$

Iki tarafi $2h$'ye bolelim

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

Goruyoruz ki ortalama farklilik dogru turevi u' esitligin saginda veriyor, ve h^2 terimine bakarak yaklasikligin, hatanin ikinci seviyede oldugunu anliyoruz.

Turevlerin yerine farklilik gecirirken secenekler bunlar. Elimizde 3 secenek var, ve cogunlukla ortalanmis olan en iyisidir.

Simdi ikinci farkliliklara gelelim: Ikinci turev nedir? Turevin turevidir. Ikinci farklilik nedir? Farklarin farkidir.

Nasil hesaplanir? $\Delta_F \Delta_B$ yapabiliriz. Ya da $\Delta_B \Delta_F$. Birisi cikip $\Delta_C \Delta_C$ diyebilir. Hangisi? Hoca $\Delta_C \Delta_C$'yi sevmiyor cunku elimize [1 0 -2 0 1] gibi bir farklilik vektoru geciyor, fazla "dagiliyoruz". $\Delta_F \Delta_B$, ve $\Delta_B \Delta_F$ daha iyi cunku ikisi de [1 -2 1] kullanir. Onlar daha 'odakli".

Ikincil farkliliklar (second differences) formulunu de turetelim. Bu formul ileri dogru bir adim attiktan sonraki fark ile geri dogru adim attiktan sonraki farkin farki. Yani

$$\frac{1}{h}\bigg[\bigg(\frac{u_{i+1} - u_i}{h}\bigg) - \bigg(\frac{u_i - u_{i-1}}{h}\bigg)\bigg]$$

$$= \frac{1}{h}\bigg[\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h}\bigg]$$

$$= \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2}$$

Ikinci seviye diferansiyel denklem cozume donelim.

$$-\frac{d^2u}{dx^2} = 1$$

denkleminin genel cozumu ne olabilir? Ozel (particular) cozum ikinci turevi 1 olan ve negatifi alinan sey nedir sorusunun cevabindan bulunabilir, iki kere entegre edilerek

$$-\frac{1}{2}x^2$$

buna ikinci turevi sifir olan iki tane daha cozum eklemek istiyorum, cunku elimizde ikinci dereceden bir diferansiyel denklem var.

$$u(x) = -\frac{1}{2}x^2 + Dx + C$$

Bu ek iki sabiti nasil kullanacagim? Onlari elimdeki iki tane sınır sartini tatmin etmek icin kullanacagim. Bunu yapmak zor degil, birinci sarti formule koyarim, sabitler icin bir formul elde ederim, ikinci sarti koyarim, ikinci bir formul elde ederim, iki sabit, iki formul, boylece sonuc gelir.

$u(0)$ ise $C = 0$, $u(1)$ icin $D = 1/2$.

$$u(x) = -\frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{2}x$$

Simdi ana diferansiyel denklem

$$-\frac{d^2u}{dx^2} = 1$$

ve onun ayriksal formu

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

nasil matris formatinda gosterecegimize gelelim. u_i, u_{i+1} gibi degerlerin birbirinden cikartilmasi, vs gibi islemler gerekiyor. Altta boyle bir islemi matris uzerinden yapmanin yolunu goruyoruz.

$$\begin{bmatrix} \ddots & & & \\ -1 & 0 & 1 & \\ & -1 & 0 & 1 \\ & & & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{i-1} \\ u_i \\ u_{i+1} \\ u_{i+2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vdots \\ u_{i+1} - u_{i-1} \\ u_{i+2} - u_i \\ \vdots \end{bmatrix}$$

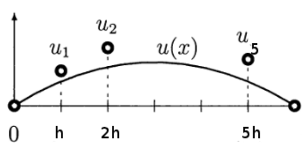
Soldaki matris [-1 0 1] yerine ikinci farkliliklar icin [-1 2 1] de kullanabilir, o zaman ikinci farklilik hesabini yapmis oluruz. Yani soyle

$$
\frac{1}{h^2}
\begin{bmatrix}
2 & -1 & & & \\
-1 & 2 & -1 & & \\
 & -1 & 2 & -1 & \\
 & & -1 & 2 & -1 \\
 & & & -1 & 2
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}
$$

Bu $KU = F$ denkleminin matris formudur. Diferansiyel denklem cozmek demek u fonksiyonunu bulmak demektir, o zaman yukaridaki bilinmeyen $u_1, u_2, ..$ degerlerinin hesaplamamiz gerekiyor. Onlar "ayriksal" u fonksiyonunun her veri noktasindaki degerlerini temsil ediyor olacaklar.

Bu cozum perde arkasinda Python tarafindan nasil hesaplanacak? Yoketme (eliminasyon) teknigi ile.

h^2, ayriksal formuldeki Δx^2, nedir? u'yu kac parcaya ve hangi degerler arasinda boldugumuze bakalim: 0 ve 1 arasinda ve 6 parcaya boluyoruz, o zaman $h = 1/6$, $h^2 = 1/36$, yani $1/h^2 = 36$, yani ustteki imajda h^2'yi en solda carpan 36 olarak yazabiliriz. Sonra u'yu hesaplatiriz.



K matrisinin 5x5 olmasi karisiklik yaratmis olabilir. Burada sebep K matrisine u_0 ve u_6'nin dahil edilmemis olmasi, cunku o degerleri zaten biliyoruz. Bu degerler olsaydi K matrisinin sol ve sagina tamamen sifir iceren iki kolon gerekecekti, u vektorune alttan ve ustten u_0 ve u_6 eklenecekti ve bu iki deger sifir oldugu icin K'nin sol ve sagindaki sifirlar ile carpilacaklardi, bu yuzden mevcut toplam uzerinde hic etkileri olmayacakti . Bu sebeple bu iki kolonu ve u degerini tamamen kaldirmak sonuc uzerine hicbir etki yapmiyor.

Devam edelim. Simdi orijinal problemi degistirelim. Eger ustteki problem iki ucu sabitlenmis kendi agirligiyla asilan bir elastik cubugu gosteriyorsa (ve u degerleri cubugun ne kadar uzadigini temsil ediyorsa), bu sefer ustteki ucu serbest birakabiliriz. Yani $u(0) = 0$ olmayacak.

Yine esit dagilmis (uniform) cubuk, esit dagilmis yuk.

$$-\frac{d^2u}{dx^2} = 1$$

$$\frac{du}{dx}(0) = 0, \ u(1) = 0$$

Burada ilk sart u'nin egiminin (slope) sifira esitlenmis olmasi.

Onceki denklemdeki genel cozum hala ise yarar.

$$u(x) = -\frac{1}{2}x^2 + Cx + D$$

$$\frac{du}{dx} = -x + C$$

$$\frac{du}{dx}(0) = 0 + C = 0$$

$$C = 0$$

$$u(1) = 0 = -1/2 + 0 + D$$

$$D = 1/2$$

O zaman cozum

$$u(x) = -\frac{1}{2}x^2 + 1/2$$

Grafikleyince suna benzer

Egimin sifir noktasinda sifir oldugunu goruyoruz.

Simdi farkliliklar formulune gelelim. Diferansiyel denklemin karsiligi olan farklilik formulu nedir? Hala ayni:

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

Simdi onemli noktaya geldik: baslangic sartlari ne olacak? $u(1) = 0$ kolay,

$du/dx(0) = 0$ nasil temsil edilecek? Bir fikir su olabilir.

$$\frac{u_1 - u_0}{h} = 0$$

Bu ifadeyi matrise nasil tercume ederiz? Ustteki ifade ayni zamanda $u_1 - u_0 = 0$ demektir, yer degistirince $u_1 = u_0$. K matrisinin birinci satiri nedir?

$$-u_0 + 2u_1 - u_2$$

u_0 yerine u_1 koyalim

$$= -u_1 + 2u_1 - u_2$$

$$= u_1 - u_2$$

O zaman birinci satiri ustteki gibi degistirirsek, sınır sartlarindan birini yerine getirmis oluruz, yani ilk satira [1 -1] koyacagiz, orada [2 -1] yerine [1 -1] var artik. Matris bu sekilde degisince ona K yerine T matrisi deniyor. $TU = [1, 1, ...]$.

$$\frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} 1 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & -1 & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Soru: ayriksal cozum gercek cozume ne kadar yakin? Cevap hata payi $O(h)$ cunku $(u_1 - u_0)/h$ tanımı birinci dereceden bir yaklaşıksallık (approximation). Kabaca cizince soyle gozukur:

Hesap kalitesi pek iyi denemez. Cozumu ikinci dereceden yapsak daha iyi olacakti. Nasil? $(u_1 - u_0)/h$ yerine baska bir sey kullanmamiz lazim. Ortalanmis farkliligi hatirlayalim, bu yontem ikinci derece dogrulugu olan bir yontemdir,

Problem 1.2 A

Kitaptaki ufak problemi hatirlayalim

$$
\begin{bmatrix} 1 & -1 & \\ -1 & 2 & -1 \\ & -1 & 2 \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} =
\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}
$$

Bu problem iste $O(h)$ hatasini azaltma konusunu isliyor, bunun icin ortalama farklilik (centered difference) kullanilacak, $(u_1 - u_o)/h$ yerine 0'ıncı degere denk gelecek sekilde farkliligi ortalayacagiz, 0 uzerinde ortalama yapmamiz icin onun bir gerisine ve bir ilerisine gitmek lazim, o zaman once K matrisini bir genisletelim, cunku artik u_0'in dahil edilmesi gerekecek ve hayali bir u_{-1}'i dusunelim, $u'(0) = 0$ icin

$$ \frac{u_1 - u_{-1}}{2h} = 0 $$

tanimini kullanalim. O zaman

$$ u_1 - u_{-1} = 0 $$

$$ u_1 = u_{-1} $$

$$ -u_{-1} + 2u_0 - u_1 = h^2 f(0) $$

$u_1 = u_{-1}$ ifadesini yerine koyalim

$$ -u_1 + 2u_0 - u_1 = h^2 f(0) $$

$$ -2u_1 + 2u_0 = h^2 f(0) $$

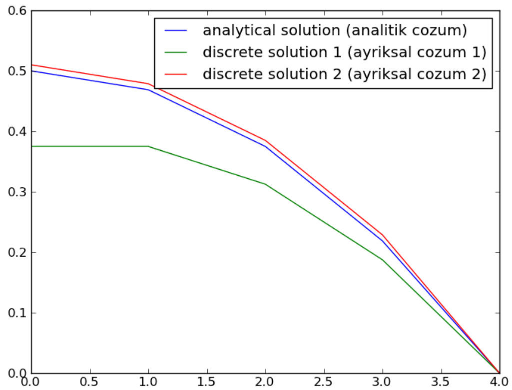
$$ -u_1 + u_0 = \frac{1}{2} h^2 f(0) $$

O zaman matrisin ust sol degeri u_0 katsayisina gore 1, onun sagindaki deger u_1 katsayisina gore -1 olmali. 1/2 degerini de esitligin sagindaki f icin kullandigimiza dikkat. Tum bunlari u_{-1}'in yerine deger gecirerek elde ettigimiz icin o kolona artik ihtiyac kalmadi, o gecici kolon, matristen atildi.

$$
\frac{1}{h^2}
\begin{bmatrix} 1 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ & -1 & 2 & -1 \\ & & -1 & 2 \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} u_0 \\ u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} =
\begin{bmatrix} 1/2 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}
$$

Matris boyutlarinin nasil buyudugune, ve u_0'in dahil edilmesine dikkat edelim. Problemin basindaki matris 3x3 boyutundaydi, bu 4x4 boyutunda, ayrica h hala 1/4 degerinde.

```
import numpy as np
import scipy.linalg as lin
import matplotlib.pyplot as plt
import ktbc

K,T,B,C = ktbc.ktbc(3); print T

h = 1./4.

discrete = lin.solve( (1./h)**2 * T, [1.,1.,1.] )

discrete = np.insert(discrete, 0, discrete[0])
discrete = np.append(discrete, 0.)

K,T,B,C = ktbc.ktbc(4); print T

discrete_2 = lin.solve( (1./h**2)*T, [1./2.,1.,1.,1.] )
# add little diff for plotting
# grafik ust uste binmesin diye azicik fark ekledik
discrete_2 = discrete_2 + 0.01
discrete_2 = np.append(discrete_2, 0.)

def u(x): return (1./2.)*(1. - x**2)

p1 = plt.plot([u(0.0), u(0.25), u(0.5), u(0.75), u(1.)])

p2 = plt.plot(discrete)

p3 = plt.plot(discrete_2)

plt.legend([p1,p2,p3], ["analytical solution (analitik cozum)",
                        "discrete solution 1 (ayriksal cozum 1)",
                        "discrete solution 2 (ayriksal cozum 2)"
                        ])

plt.show()
```



Guzel. Artik hesap gercek sonuca iyice yaklasacak.

[Derse donelim] Bunlardan bahsetmemizin onemli bir sebebi sınır sartlarinin ne kadar onemli oldugunu anlatmak. Goruldugu gibi sınır sartlari, onlarin yaklasiksallanma yontemleri sonucun uzerinde direk bir etki yaratiyor.

Bir dipnot olarak bahsedelim, burada kullandigimiz metot sınırlı farkliliklar (finite differences) metodu. Eger sınırlı elementler (finite elements) metodu kullaniyor olsaydik, ustteki satirin degismesi otomatik olarak gerceklesecekti. Sınırlı elementler metotu ileriki derslerin birinde islenecek.

Soru 1.2.7

Bu soruda u'dan alinacak dort veri noktasiyla (sample) du/dx ortada olmak uzere 4. seviye kesinlik elde edilebilecegi soyleniyor.

$$\frac{-u_2 + 8u_1 - 8u_{-1} + u_{-2}}{12h} = \frac{du}{dx} + bh^4 \frac{d^5}{dx^5} + ..$$

Bu problemin tum cebirsel cozumu Ingilizce ders notlarinda. Ek aciklama olarak sunu ekleyelim: Esitligin sol tarafindaki 1, 8 gibi katsayilar modelleyici tarafindan secilmis, bir teorinin, ispatin sonucu degil. Hala birincil farklilik (first differences) dunyasindayiz, ama ileri, geriye gidip katsayi 1 kullanmak yerine dort noktayi kullanmak istemis, ve ortadaki noktalara daha fazla "agirlik" vermek istemisiz. Tabii bu katsayilarla bu noktalar kullanilinca, ortalamanin duzelmesi icin katsayilarin bolume yansimasi gerekiyor, o yuzden bolumde $12h$ goruyoruz.

Ve aynen ileri, geriye dogru ayriksal formu surekli fonksiyonlar uzerinde Taylor serisiyle temsil edebildigimiz gibi, ustteki esitligin sol tarafini da Taylor serisi ile $u(x+h)$ turu terimler uzerinden temsil edebiliriz. Ustte u_2, u_{-1} gibi ibareler var, bunlarin Taylor karsiligi $u(x+2h)$, $u(x-h)$ gibi ifadeler olur. Katsayi carpimlarinin ve $12h$'ye bolum isleminin Taylor serisi uzerinde de aynen kullanilmasi gerekiyor tabii ki.

Bu arada b sabitinin ne oldugunu soru soylemiyor, ama tum bu cebirsel islemi gerceklestirince denklemdeki esitligin sag tarafi aynen elde edilecek ve boylece b yerine hangi sayi gelecegi de ortaya cikacak.