

Metody obliczeniowe  
i ich  
komputerowa realizacja

*Bogusław Bożek*

## Spis treści

<b>Rozdział 1. Metoda kwadratur różniczkowych . . . . .</b>	<b>3</b>
1.1. Definicja kwadratury różniczkowej . . . . .	3
1.2. Obliczanie współczynników kwadratury różniczkowej . . . . .	3
1.2.1. Obliczanie współczynników dla pierwszej pochodnej . . . . .	5
1.2.2. Współczynniki dla drugiej pochodnej . . . . .	6
1.2.3. Wzór rekurencyjny dla pochodnych wyższych rzędów . . . . .	8
1.3. Związek między kwadraturą różniczkową, a metodą różnic skończonych . . . . .	8
1.4. Rozszerzenie na przypadek wielowymiarowy . . . . .	9
1.5. Stabilność metody kwadratur różniczkowych . . . . .	11
1.6. Przykłady zastosowania metody kwadratur różniczkowych . . . . .	14
1.6.1. Jednowymiarowe równanie Poissona . . . . .	14
1.6.2. Dwuwymiarowe równanie Laplace’a . . . . .	15
1.6.3. Równanie Burgersa . . . . .	19
1.6.4. Problem własny Helmholtza . . . . .	21
<b>Bibliografia . . . . .</b>	<b>23</b>
<b>Skorowidz . . . . .</b>	<b>27</b>

## Metoda kwadratur różniczkowych

Metoda kwadratur różniczkowych (KR) jest stosunkowo mało znaną metodą rozwiązywania równań różniczkowych. Podobieństwo do kwadratur całkowych sprowadza się nie tylko do nazwy. Przy pomocy kwadratur całkowych możemy obliczyć przybliżoną wartość całki oznaczonej jako kombinację liniową wartości funkcji w punktach węzłowych. Na podobnym pomysle oparta jest idea kwadratur różniczkowych – pochodną funkcji w punkcie przybliżamy kombinacją liniową jej wartości w punktach ustalonej siatki. Współczynniki tej kombinacji zależą od wyboru skończonego wymiarowej przestrzeni liniowej, w której dokonujemy aproksymacji. W tym rozdziale, który w dużej mierze bazuje na książce [78], zaprezentowane są tylko wielomianowe kwadratury różniczkowe. Wielomianowe kwadratury różniczkowe tak jak i kwadratury całkowe są dokładne dla wielomianów ustalonego stopnia. Współczynniki w kwadraturze całkowej nie zależą od funkcji, której całkę liczymy i tak samo jest w przypadku kwadratury różniczkowej.

### 1.1. Definicja kwadratury różniczkowej

Niech  $f : \mathbb{R} \supset [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  będzie funkcją klasy  $C^1$ . Niech  $N \in \mathbb{N} \setminus \{0, 1\}$  będzie ustaloną liczbą naturalną. Przyjmijmy, że na odcinku  $[a, b]$  zadana jest siatka  $S = \{x_i : i = 1, \dots, N, x_1 = a, x_N = b\}$ . Szukamy  $a_{ij} \in \mathbb{R}$  takich, że

$$f'(x_i) \approx \sum_{j=1}^N a_{ij} \cdot f(x_j), \quad \text{dla } i = 1, 2, \dots, N. \quad (1.1)$$

Wzór (1.1) nazywamy **kwadraturą różniczkową** przez analogię do kwadratur używanych do przybliżonego obliczania całek oznaczonych.

Kluczowym problemem w metodzie kwadratur różniczkowych jest wyliczenie **współczynników wagowych**  $a_{ij}$ . Stosowanych jest kilka sposobów obliczania tych współczynników.

### 1.2. Obliczanie współczynników kwadratury różniczkowej

Niech  $S$  będzie ustaloną siatką. Przez  $\Pi_N$  oznaczmy przestrzeń wielomianów stopnia co najwyżej  $N - 1$ , a przez  $\Lambda = \{\alpha_0, \dots, \alpha_{N-1}\}$  ustaloną bazę  $\Pi_N$ . Współczynniki

$a_{ij}$  dobieramy tak, aby wzór (1.1) był wzorem dokładnym („=” zamiast „ $\approx$ ”) dla każdej funkcji  $\alpha_k$ ,  $k = 0, \dots, N-1$  oraz dla każdego  $x_i \in S$ . Wtedy wzór (1.1) (w którym po prawej i po lewej stronie występują operatory liniowe) jest spełniony także dla dowolnej kombinacji liniowej funkcji bazowych  $\alpha_i$ , czyli dla każdego wielomianu z przestrzeni  $\Pi_N$ . Zatem, mając dwie dowolne funkcje  $f$  i  $g$  oraz ich aproksymacje  $p_N$  i  $g_N$  w przestrzeni  $\Pi_N$ , możemy do przybliżania ich pochodnych używać tych samych współczynników  $a_{ij}$ . Jest to ważna własność kwadratury różniczkowej – współczynniki  $a_{ij}$  nie zależą od zadanej funkcji. Zależą one tylko od doboru punktów węzłowych! To, że  $a_{ij}$  nie zależą także od wyboru bazy  $\Lambda$ , można w prosty sposób udowodnić.

**Twierdzenie 1.** *Współczynniki kwadratury różniczkowej  $a_{ij}$  są takie same dla każdej bazy przestrzeni  $\Pi_N$ .*

**Dowód.**

Niech  $\Pi_N$  będzie przestrzenią wielomianów stopnia co najwyżej  $N-1$ . Niech  $\Gamma = \{\gamma_0, \dots, \gamma_{N-1}\}$  oraz  $\Psi = \{\psi_0, \dots, \psi_{N-1}\}$  będą różnymi bazami w  $\Pi_N$ , a  $Q$  macierzą przejścia z bazy  $\Gamma$  do  $\Psi$ . Niech  $A_\gamma = [a_{ij}^\gamma]$  będzie macierzą współczynników kwadratury różniczkowej dla bazy  $\Gamma$ , a  $A_\psi = [a_{ij}^\psi]$  macierzą współczynników kwadratury różniczkowej dla bazy  $\Psi$ .

Wprowadźmy oznaczenia:

$$\begin{aligned}\Gamma(X) &= \begin{pmatrix} \gamma_0(x_1) & \cdots & \gamma_0(x_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \gamma_{N-1}(x_1) & \cdots & \gamma_{N-1}(x_N) \end{pmatrix}, \\ \Gamma'(x_k) &= [\gamma'_0(x_k), \dots, \gamma'_{N-1}(x_k)]^T, \\ \Psi(X) &= \begin{pmatrix} \psi_0(x_1) & \cdots & \psi_0(x_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_{N-1}(x_1) & \cdots & \psi_{N-1}(x_N) \end{pmatrix}, \\ \Psi'(x_k) &= [\psi'_0(x_k), \dots, \psi'_{N-1}(x_k)]^T.\end{aligned}$$

Po podstawieniu funkcji bazowych  $\gamma_i$  do wzoru (1.1) otrzymujemy:

$$\Gamma'(x_k) = \Gamma(X) \cdot A_\gamma^{(k)}, \quad \text{dla } k = 1, \dots, N, \quad (1.2)$$

gdzie  $A_\gamma^{(k)}$  oznacza  $k$ -tą kolumnę macierzy  $A_\gamma$ . Analogicznie

$$\Psi'(x_k) = \Psi(X) \cdot A_\psi^{(k)}, \quad \text{dla } k = 1, \dots, N, \quad (1.3)$$

gdzie  $A_\psi^{(k)}$  oznacza  $k$ -tą kolumnę macierzy  $A_\psi$ . Macierz  $Q$  jest macierzą przejścia z bazy  $\Gamma$  do  $\Psi$ , a więc:

$$Q \cdot \Gamma'(x_k) = \Psi'(x_k) \quad (1.4)$$

oraz

$$Q \cdot \Gamma(X) = \Psi(X). \quad (1.5)$$

Mnożąc obustronnie (1.2) przez macierz przejścia  $Q$  dostajemy:

$$Q \cdot \Gamma'(x_k) = Q \cdot \Gamma(X) \cdot A_\gamma^{(k)}.$$

Korzystając z (1.4) i (1.5) mamy

$$\Psi'(x_k) = \Psi(X) \cdot A_\gamma^{(k)}, \quad \text{dla } k = 1, \dots, N. \quad (1.6)$$

Porównując (1.3) z (1.6) otrzymujemy  $A_\gamma^{(k)} = A_\psi^{(k)}$  dla  $k = 1, \dots, N$ , a zatem

$$A_\gamma = A_\psi.$$

■

Twierdzenie to pozostaje prawdziwe także w zastosowaniu do pochodnych wyższych rzędów oraz pochodnych cząstkowych w przypadku wielowymiarowym, z czego wielokrotnie będziemy korzystać.

### 1.2.1. Obliczanie współczynników dla pierwszej pochodnej

Pierwotnie Bellman [6] zaproponował użycie następujących funkcji bazowych:

$$g_k(x) = x^k, \quad k = 0, 1, \dots, N-1. \quad (1.7)$$

Po podstawieniu tych funkcji do równania (1.1) otrzymujemy układ równań z macierzą Vandermonde'a:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^N a_{ij} = 0, \\ \sum_{j=1}^N a_{ij} \cdot x_j = 1, \\ \sum_{j=1}^N a_{ij} \cdot x_j^k = k \cdot x_i^{k-1} \quad (k = 2, 3, \dots, N-1), \end{cases} \quad (1.8)$$

dla  $i = 1, 2, \dots, N$ . Ten sposób wyznaczania współczynników  $a_{ij}$  kwadratury różniczkowej nie ma żadnego praktycznego znaczenia. Do ich efektywnego obliczenia najwygodniej jest zastosować wielomiany interpolacyjne Lagrange'a:

$$g_k(x) = \frac{M(x)}{(x - x_k)M'(x_k)}, \quad (k = 1, 2, \dots, N), \quad (1.9)$$

gdzie

$$M(x) = (x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_N), \quad M'(x_k) = \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^N (x_k - x_i).$$

Stosując (1.9) do (1.1) otrzymujemy:

$$\begin{aligned} a_{ij} &= \frac{1}{x_j - x_i} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i, j}}^N \frac{x_i - x_k}{x_j - x_k} \quad \text{dla } i \neq j \\ a_{ii} &= \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \frac{1}{x_i - x_k}. \end{aligned}$$

Wyprowadzimy teraz wzory na  $a_{ij}$  w nieco innej postaci, opierając się na [78].

Niech

$$M(x) = N(x, x_k) \cdot (x - x_k), \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad (1.10)$$

gdzie  $N(x_i, x_j) = M'(x_i) \cdot \delta_{ij}$  ( $\delta_{ij}$  - symbol Kroneckera). Podstawiając (1.10) do równania (1.9) otrzymujemy:

$$g_k(x) = \frac{N(x, x_k)}{M'(x_k)}, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (1.11)$$

Stosując powyższe funkcje do (1.1) dostajemy:

$$a_{ij} = \frac{N'(x_i, x_j)}{M'(x_j)}, \quad (1.12)$$

Aby obliczyć  $N'(x_i, x_j)$  różniczkujemy  $m$ -krotnie równość (1.10) względem  $x$ , otrzymując formułę rekurencyjną:

$$M^{(m)}(x) = N^{(m)}(x, x_k) \cdot (x - x_k) + m \cdot N^{(m-1)}(x, x_k), \quad (1.13)$$

dla  $m = 1, 2, \dots, N-1$ ;  $k = 1, 2, \dots, N$ . Stąd:

$$\begin{aligned} N'(x_i, x_j) &= \frac{M'(x_i)}{x_i - x_j}, \quad i \neq j, \\ N'(x_i, x_i) &= \frac{M''(x_i)}{2}. \end{aligned}$$

Stosując otrzymany wynik do (1.12) otrzymujemy wreszcie

$$\begin{aligned} a_{ij} &= \frac{M'(x_i)}{(x_i - x_j)M'(x_j)} \quad \text{dla } i \neq j, \\ a_{ii} &= \frac{M''(x_i)}{2M'(x_i)}. \end{aligned} \quad (1.14)$$

We wzorze na  $a_{ii}$  występuje trudne do policzenia  $M''(x_i)$ . Tę niedogodność można usunąć korzystając z twierdzenia (1). Współczynniki  $a_{ij}$  są takie same dla każdego układu funkcji bazowych. Biorąc zatem pierwszą funkcję z bazy (1.7) dostajemy:

$$\sum_{j=1}^N a_{ij} = 0 \quad \text{czyli} \quad a_{ii} = - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N a_{ij}.$$

### 1.2.2. Współczynniki dla drugiej pochodnej

Do aproksymacji drugiej pochodnej używamy podobnej formuły:

$$f''(x_i) = \sum_{j=1}^N b_{ij} \cdot f(x_j) \quad \text{dla } i = 1, 2, \dots, N. \quad (1.15)$$

Równanie (1.15) ma taką samą postać jak równanie (1.1). Jediną różnicą są inne współczynniki wagowe. Do ustalenia  $b_{ij}$  możemy użyć dwóch sposobów:

**I sposób.** Podstawiając wielomiany interpolacyjne Lagrange'a (1.9) do (1.15) dostajemy wzory:

$$b_{ij} = \frac{2}{x_j - x_i} \left( \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i, j}}^N \frac{x_i - x_k}{x_j - x_k} \right) \left( \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq i, j}}^N \frac{1}{x_i - x_l} \right) \quad \text{dla } i \neq j,$$

$$b_{ii} = 2 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^{N-1} \left( \frac{1}{x_i - x_k} \left( \sum_{\substack{l=k+1 \\ l \neq i}}^N \frac{1}{x_i - x_l} \right) \right).$$

**II sposób.** Wykorzystamy wzory uzyskane wcześniej podczas wyprowadzania  $a_{ij}$ . Stosując (1.11) do równania (1.15) otrzymujemy:

$$b_{ij} = \frac{N''(x_i, x_j)}{M'(x_j)}. \quad (1.16)$$

Z drugiej strony, zastosowanie wzoru (1.13) daje nam:

$$N''(x_i, x_j) = \frac{M''(x_i) - 2N'(x_i, x_j)}{x_i - x_j} \quad \text{dla } i \neq j,$$

$$N''(x_i, x_i) = \frac{M^{(3)}(x_i)}{3}.$$

Podstawiając powyższe wzory do (1.16) otrzymujemy:

$$b_{ij} = \frac{M''(x_i) - 2N'(x_i, x_j)}{(x_i - x_j) \cdot M'(x_j)} \quad \text{dla } i \neq j,$$

$$b_{ii} = \frac{M^{(3)}(x_i)}{3M'(x_i)}.$$

Wreszcie wykorzystując (1.14):

$$b_{ij} = 2a_{ij} \left( a_{ii} - \frac{1}{x_i - x_j} \right) \quad \text{dla } i \neq j.$$

Jeśli w podobny sposób chcielibyśmy obliczyć  $b_{ii}$  we wzorze pojawiłoby się  $M^{(3)}(x_i)$ -trzecia pochodna  $M(x)$ . Jej wyliczenie nie jest łatwe, dlatego też z powodzeniem stosujemy metodę wykorzystaną już przy wyliczaniu  $a_{ii}$  otrzymując:

$$\sum_{j=1}^N b_{ij} = 0 \quad \text{zatem} \quad b_{ii} = - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N b_{ij}.$$

**1.2.3. Wzór rekurencyjny dla pochodnych wyższych rzędów**

Oznaczmy

$$f^{(m)}(x_i) = \sum_{j=1}^N w_{ij}^{(m)} \cdot f(x_j), \quad (1.17)$$

dla  $i = 1, 2, \dots, N$  oraz  $m = 2, 3, \dots, N - 1$ . Postępując podobnie jak przy wyznaczaniu współczynników kwadratury różniczkowej dla pochodnej rzędu drugiego dostajemy związek

$$w_{ij}^{(m)} = m \left( a_{ij} \cdot w_{ii}^{(m-1)} - \frac{w_{ij}^{(m-1)}}{x_i - x_j} \right), \quad (1.18)$$

dla  $i, j = 1, 2, \dots, N$ ,  $i \neq j$  oraz  $m = 2, 3, \dots, N - 1$  oraz

$$w_{ii}^{(m)} = - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N w_{ij}^{(m)}. \quad (1.19)$$

Pozwala on rekurencyjnie wyznaczyć współczynniki kwadratury różniczkowej dla pochodnej dowolnego rzędu.

**1.3. Związek między kwadraturą różniczkową, a metodą różnic skończonych**

Na zadanym przedziale ustalmy dla prostoty siatkę równoodległych węzłów  $S = \{x_i, i = 1, \dots, N\}$  o kroku  $h$  tj.  $x_{i+j} = x_i + jh$ . Schemat aproksymujący pochodną  $f^{(n)}(x_i)$  według wzoru:

$$\tilde{f}_i^{(n)} = \sum_{k \in K} c_k f_k + O(h^p) \quad (1.20)$$

gdzie  $K \subset S$  będziemy nazywać schematem różnicowym rzędu  $p$  dla  $n$ -tej pochodnej w punkcie  $x_i$ . Symbol  $\tilde{f}_i^{(n)}$  oznacza przybliżenie  $f^{(n)}(x_i)$ ,  $f_k = f(x_k)$ , dla  $x_k$  takich, że  $k \in K$ , a  $c_k$  są współczynnikami schematu. W metodzie różnic skończonych procedura wyliczania współczynników  $c_k$  opiera się na aproksymacji funkcji przy pomocy wielomianu odpowiedniego stopnia. Odpowiedź na pytanie jaka musi być moc zbioru  $K$  daje:

**Twierdzenie 2.** *Schemat różnicowy rzędu  $p$  przybliżający pochodną  $f^{(n)}(x_i)$  wymaga użycia  $n + p - 1$  punktów sąsiadujących.*

Jak się okazuje kwadratura różniczkowa jest schematem różnicowym maksymalnego rzędu równego  $N - n$  dla pochodnej  $f^{(n)}$  w dowolnym punkcie siatki  $S$ . Rachunkowy dowód tego faktu jest zamieszczony w [78].



## 1.4. Rozszerzenie na przypadek wielowymiarowy

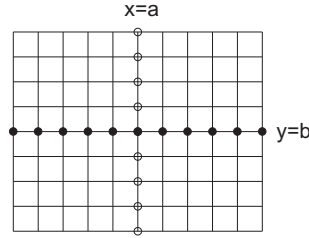
W praktyce większość problemów jest dwuwymiarowa lub trójwymiarowa. Dlatego konieczne jest rozszerzenie metody kwadratur różniczkowych na przypadek wielowymiarowy. Dla prostoty zostanie zaprezentowana metoda kwadratur różniczkowych dla wymiaru 2, ale schemat postępowania dla trzech lub więcej wymiarów jest analogiczny.

Metoda kwadratur różniczkowych daje się łatwo rozszerzyć na przypadek wielowymiarowy, o ile obszar jest regularny. My, dla prostoty, będziemy rozważać obszary w kształcie prostokątów.

Niech  $f : \mathbb{R}^2 \supset \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ , gdzie  $\Omega$  jest prostokątem. Na  $\Omega$  definiujemy siatkę prostokątną:

$$S = \{(x_i, y_j), i = 1, \dots, N, j = 1, \dots, M\}$$

Przykładowa siatka jest przedstawiona na rysunku 1.1. Jak widać, wzdłuż każdej linii



Rys. 1.1. Przykładowa siatka na prostokącie

poziomej i wzdłuż każdej linii pionowej odstęp między odpowiadającymi punktami jest taki sam. Innymi słowy, dla każdej linii pionowej i poziomej mamy taki sam rozkład punktów siatkowych.

Wzdłuż ustalonej linii  $y = b$  wartość funkcji  $f(x, b)$  możemy aproksymować wielomianem  $p_N(x) \in \Pi_N$ . Analogicznie, dla ustalonego  $x = a$  wartość funkcji  $f(a, y)$  możemy aproksymować wielomianem  $q_M(y) \in \Pi_M$ . Wartość funkcji w dowolnym punkcie należącym do obszaru, możemy przybliżać w następujący sposób:

$$f(x, y) \approx P_{N \times M}(x, y) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M c_{ij} \cdot x^{i-1} \cdot y^{j-1},$$

gdzie  $P_{N \times M}(x, y) \in \Pi_{N \times M}$ ,  $\Pi_{N \times M}$  jest przestrzenią wielomianów rozpiętą na jednomianach  $x^{i-1} \cdot y^{j-1}$ ,  $i = 1, \dots, N$ ,  $j = 1, \dots, M$ . Można wykazać, że jeżeli  $\{r_1(x), \dots, r_N(x)\}$  jest bazą przestrzeni  $\Pi_N$ , a  $\{s_1(x), \dots, s_M(x)\}$  jest bazą przestrzeni  $\Pi_M$ , to funkcje postaci

$$\Phi_{ij}(x, y) = r_i(x)s_j(y) \quad (i = 1, \dots, N, j = 1, \dots, M) \quad (1.21)$$

stanowią bazę przestrzeni  $\Pi_{N \times M}$ .

Do przybliżania pochodnych cząstkowych użyjemy następujących wzorów

$$f_x(x_i, y_j) \approx \sum_{k=1}^N a_{ik}^x \cdot f(x_k, y_j) \quad (i = 1, 2, \dots, N), \quad (1.22)$$

$$f_y(x_i, y_j) \approx \sum_{k=1}^N a_{jk}^y \cdot f(x_i, y_k) \quad (j = 1, 2, \dots, M). \quad (1.23)$$

Współczynniki  $a_{ik}^x$  oraz  $a_{jk}^y$  ustalamy w ten sposób, aby powyższe wzory były wzorami dokładnymi dla wielomianu  $P_{N \times M}(x, y)$  aproksymującego funkcję  $f$ . Ponieważ zarówno prawe, jak i lewe strony wzorów (1.22) i (1.23) są operatorami liniowymi, to po podstawieniu za  $f$  wielomianów bazowych przestrzeni  $\Pi_{N \times M}(x, y)$  otrzymamy współczynniki dla których wzory (1.22) - (1.23) będą dokładne dla każdego wielomianu z tej przestrzeni. Po podstawieniu wielomianów  $\Phi_{ij}(x, y)$  do wzorów (1.22) - (1.23) otrzymujemy:

$$\sum_{k=1}^N a_{ik}^x \cdot r_j(x_k) = r_j'(x_i) \quad \text{dla } i, j = 1, 2, \dots, N, \quad (1.24)$$

$$\sum_{k=1}^N a_{jk}^y \cdot s_j(y_k) = s_j'(y_i) \quad \text{dla } i, j = 1, 2, \dots, M. \quad (1.25)$$

Współczynniki  $a_{ik}^x$  zależą tylko od  $r_i(x)$ , a współczynniki  $a_{jk}^y$  tylko od  $s_j(y)$ . Widać tutaj analogię z przypadkiem jednowymiarowym. Możemy więc zastosować metody, które stosowaliśmy dla przypadku jednowymiarowego (por. wzór (1.14)) otrzymując:

$$a_{ij}^x = \frac{M'(x_i)}{(x_i - x_j)M'(x_j)} \quad \text{dla } i \neq j, \quad (1.26)$$

$$a_{ii}^x = - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N a_{ij}^x \quad (i, j = 1, \dots, N).$$

$$a_{ij}^y = \frac{P'(y_i)}{(y_i - y_j)P'(y_j)}, \quad \text{dla } i \neq j, \quad (1.27)$$

$$a_{ii}^y = - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^M a_{ij}^y \quad (i, j = 1, \dots, M),$$

gdzie

$$M'(x_i) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (x_i - x_j), \quad P'(y_i) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^M (y_i - y_j).$$

Dla pochodnych wyższych rzędów adaptujemy znaną już formułę rekurencyjną (1.18) otrzymując:

$$w_{ij}^{(n)} = n \left( a_{ij}^x \cdot w_{ii}^{(n-1)} - \frac{w_{ij}^{(n-1)}}{x_i - x_j} \right), \quad \text{dla } i \neq j, \quad (1.28)$$

$$w_{ii}^{(n)} = - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N w_{ij}^{(n)} \quad (n = 2, \dots, N-1, i, j = 1, \dots, N),$$

$$\begin{aligned}\bar{w}_{ij}^{(m)} &= m \left( a_{ij}^y \cdot \bar{w}_{ii}^{(m-1)} - \frac{\bar{w}_{ij}^{(m-1)}}{y_i - y_j} \right), \quad \text{dla } i \neq j, \\ \bar{w}_{ii}^{(m)} &= - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^M \bar{w}_{ij}^{(m)} \quad (m = 2, \dots, M-1, i, j = 1, \dots, M).\end{aligned}\tag{1.29}$$

Współczynniki  $w_{ij}^{(n)}$  oraz  $\bar{w}_{ij}^{(m)}$  stosujemy do aproksymacji pochodnych:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^n f}{\partial x^n}(x_i, y_j) &\approx \sum_{k=1}^N w_{ik}^{(n)} \cdot f(x_k, y_j), \\ \frac{\partial^m f}{\partial y^m}(x_i, y_i) &\approx \sum_{k=1}^M \bar{w}_{ij}^{(m)} \cdot f(x_k, y_j),\end{aligned}\tag{1.30}$$

dla  $i = 1, \dots, N$ ;  $j = 1, \dots, M$ ;  $n = 2, \dots, N-1$ ;  $m = 2, \dots, M-1$ .

Jak widać, dla obszarów i siatek regularnych możemy w prosty sposób obliczać współczynniki kwadratur różniczkowych dla dwóch lub więcej wymiarów. Dzieje się tak, ponieważ przy ustalonym kierunku możemy stosować metody jednowymiarowej kwadratury różniczkowej. Niestety, gdy siatka jest nieregularna, tzn. dla różnych linii pionowych lub poziomych mamy różny rozkład punktów siatkowych, powyższe wzory nie mają zastosowania. Pochodną cząstkową przybliżamy wtedy korzystając ze wszystkich punktów siatkowych<sup>1</sup>. Jak dotąd nie udało się jednak podać ogólnych wzorów na współczynniki takiej metody.

## 1.5. Stabilność metody kwadratur różniczkowych

Rozważmy następujące równanie:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = l(u).$$

gdzie  $l(u) = l(u_x, u_{xx}, \dots)$  jest operatorem różniczkowym (w ogólnym przypadku nieliniowym). Po dyskretyzacji zmiennych przestrzennych (np. metodą KR) oraz linearyzacji funkcji  $l(u)$  otrzymujemy układ równań różniczkowych zwyczajnych:

$$\frac{d\hat{u}}{dt} = A\hat{u} + \hat{s},$$

gdzie  $\hat{u}$  jest nieznanym wektorem wartości funkcji  $u$  w wewnętrznych punktach siatki. Analiza stabilności opiera się na rozkładzie wartości własnych macierzy  $A$ . Warunkiem stabilności jest, aby wartości własne  $\lambda_i$  spełniały warunek:

$$\forall i \quad \operatorname{Re}(\lambda_i) \leq 0.$$

<sup>1</sup> Jest to metoda kubatur różniczkowych.

Przeprowadzimy analizę stabilności metody KR dla pewnego szczególnego przypadku, mianowicie problemu początkowo-brzegowego:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) = -\frac{\partial u}{\partial x}(t, x) \quad (t, x) \in (0, t^*] \times (0, \pi], \quad (1.31)$$

$$u(0, t) = g(t) \quad t \in [0, t^*] \quad (1.32)$$

$$u(x, 0) = h(x) \quad x \in [0, \pi]. \quad (1.33)$$

Na przedziale  $[0, \pi]$  wprowadzamy  $N$  punktów siatkowych:  $0 = x_1, \dots, x_N = \pi$ . Po dyskretyzacji równania (1.31) metodą KR uzyskujemy:

$$\frac{d\hat{u}}{dt} = M\hat{u} + \hat{s}, \quad (1.34)$$

gdzie:

- $\hat{u}$  jest wektorem o  $(N - 1)$  składowych odpowiadających  $u(x_2), \dots, u(x_N)$  (z warunków brzegowych (1.32) mamy  $u(x_1)$ ),
- $M$  jest macierzą  $(N-1) \times (N-1)$  uzyskaną z macierzy współczynników kwadratury różniczkowej  $A$  poprzez wykreślenie pierwszego rzędu i pierwszej kolumny oraz zmianę znaku, tj.  $m_{i,j} = -a_{i+1,j+1}$ ,  $(i, j = 1, \dots, N - 1)$ ,
- współrzędne wektora  $\hat{s}$  mają postać  $s_i = m_{i1} \cdot g(t)$  (korzystamy z warunku brzegowego (1.32)).

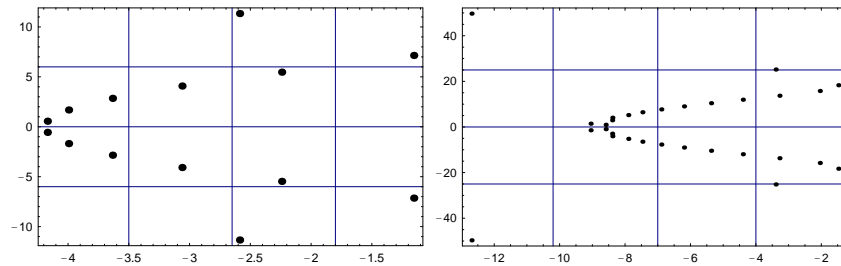
Analizę stabilności przedstawimy w zależności od typu użytej siatki. Na początku zastosujemy trzy typowe siatki:

**Siatka I** – Siatka Czebyszewa-Gaussa-Lobatto,

**Siatka II** – Siatka Czebyszewa,

**Siatka III** – Siatka o węzłach równoodległych.

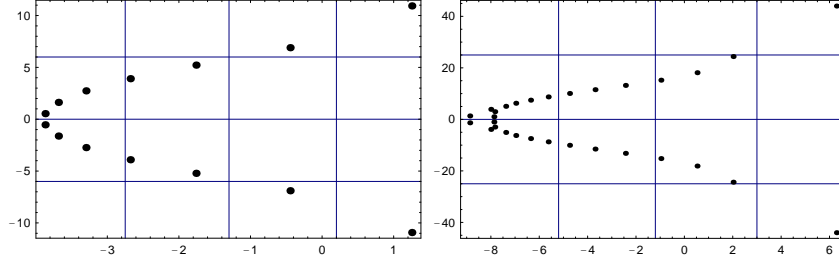
Trzecia siatka nie wymaga komentarza, natomiast pozostałe dwie tak. W siatce **I** punkty siatkowe są dobrane jako miejsca ekstremów wielomianów Czebyszewa odpowiedniego stopnia, tzn.  $S_I = \{x_i : |T_N(x_i)| = 1, x_i \in [-1, -1]\}$ . Siatka **II** powstaje poprzez wybór punktów siatkowych jako miejsc zerowych wielomianu Czebyszewa odpowiedniego stopnia, tzn.  $S_{II} = \{x_i : T_N(x) = 0, x_i \in [-1, 1]\}$ . W obu przypadkach uzyskujemy siatkę na przedziale  $[-1, 1]$ , którą możemy odpowiednio przeskalować (w naszym przypadku do przedziału  $[0, \pi]$ ). Jak widać z rysunku (1.2) wszystkie war-



**Rys. 1.2.** Rozkład wartości własnych dla siatki I ( $N=15$ ,  $N=31$ )

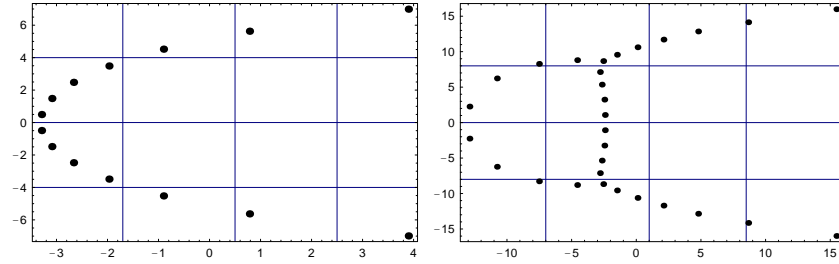
tości własne macierzy  $M$  dla siatki I, mają części rzeczywiste ujemne. Największe

i największe moduły wartości własnych wynoszą:  $\lambda_{min}^{(15)} = 4.21$ ,  $\lambda_{max}^{(15)} = 11.63$  oraz  $\lambda_{min}^{(31)} = 8.64$ ,  $\lambda_{max}^{(31)} = 51.3$ . Dla siatki II część rzeczywista największej (co do modułu)



Rys. 1.3. Rozkład wartości własnych dla siatki II (N=15, N=31)

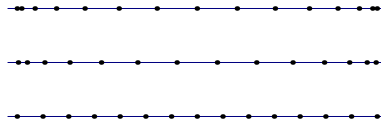
wartości własnej jest dodatnia dla  $N = 15$  jak i  $N = 31$ . Dla siatki równoodległej



Rys. 1.4. Rozkład wartości własnych dla siatki III (N=15, N=31)

wartości własne o dużych modułach mają części rzeczywiste dodatnie (rys. (1.4)). Efekt ten występuje przy siatce rzadkiej i gęstej. Można wysnuć wniosek, że siatka III nie nadaje się do rozwiązywania równania (1.31).

Analiza tych wyników prowadzi do wniosku, że dobór siatki ma duży wpływ na stabilność metody kwadratur różniczkowych. W odróżnieniu od siatki równoodległej **III** (wyraźnie gorszej od pozostałych), punkty siatkowe w przypadku **I** i **II** są rozciągnięte w stronę końców przedziału. Ilustruje to rysunek (1.5). Niestety nie udało się



Rys. 1.5. Siatki I, II oraz III

do tej pory udowodnić twierdzeń, które rozstrzygałyby o „dobroci” konkretnej siatki. Praktycznie każdą siatkę na przedziale  $[a, b]$  można próbować poprawiać zagęszczając

punkty węzłowe w pobliżu końców odcinka. W rozważanym przykładzie można do tego celu zastosować np. transformację:

$$\varphi_\alpha : [0, \pi] \ni x \longrightarrow \varphi_\alpha(x) := \frac{(1 - \alpha)(3\pi x^2 - 2x^3)}{\pi^2} + \alpha x \in [0, \pi], \quad \alpha \in [0, 1).$$

## 1.6. Przykłady zastosowania metody kwadratur różniczkowych

Zaprezentujemy zastosowanie metody kwadratur różniczkowych do rozwiązania czterech zagadnień:

- jednowymiarowego równania Poissona  $u'' = f$ ,
- równania Laplace'a  $\Delta u = 0$ ,
- równania Burgersa  $\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ ,
- problemu własnego Helmholtza  $\Delta^2 u + k^2 u = 0$ .

### 1.6.1. Jednowymiarowe równanie Poissona

Rozważamy równanie

$$u''(x) = f(x) \quad \text{dla } x \in (0, 1) \tag{1.35}$$

z warunkiem brzegowym Dirichleta oraz Neumanna. Wprowadzamy oznaczenia:

- $S = \{0 = x_1, x_2, \dots, x_N = 1\}$  – siatka,
- $A = [a_{ij}]$  – macierz  $N \times N$  – współczynniki kwadratury różniczkowej dla pierwszej pochodnej dla siatki  $S$ ,
- $B = [b_{ij}]$  – macierz  $N \times N$  – współczynniki kwadratury różniczkowej dla drugiej pochodnej dla siatki  $S$ ,
- $u : [0, 1] \longrightarrow \mathbb{R}$  – rozwiązanie,
- $u_1, u_2, \dots, u_N$  – rozwiązanie numeryczne w punktach siatkowych,
- $f_i = f(x_i)$ .

Dyskretyzując równanie (1.35) metodą kwadratur różniczkowych dostajemy układ równań algebraicznych

$$\sum_{j=1}^N b_{ij} u_j = f_i \quad (i = 2, \dots, N-1). \tag{1.36}$$

Do tego układu należy dołączyć równania indukowane przez warunki brzegowe.

**Warunek Dirichleta.** Warunek ten ma postać:

$$u(0) = c_1, \quad u(1) = c_2,$$

gdzie  $c_1$  oraz  $c_2$  są zadanymi stałymi. W rozwiązaniu numerycznym przekłada się to w oczywisty sposób na związki

$$u_1 = c_1, \quad u_N = c_2.$$

**Warunek Neumanna.** Rozważmy warunek Neumanna postaci:

$$u'(0) = c_3, \quad u'(1) = c_4,$$

gdzie  $c_3$  oraz  $c_4$  są stałymi.

Po zastosowaniu metody kwadratur różniczkowych otrzymujemy równania

$$\sum_{j=1}^N a_{1j}u_j = c_3, \quad \sum_{j=1}^N a_{Nj}u_j = c_4, \quad (1.37)$$

które dołączamy do układu (1.36). Można też wartości  $u_1$  oraz  $u_N$  wyrazić poprzez wartości rozwiązania w punktach wewnętrznych  $u_2, \dots, u_{N-1}$ :

$$a_{11}u_1 + a_{1N}u_N = c_3 - \sum_{j=2}^{N-1} a_{1j}u_j, \quad a_{N1}u_1 + a_{NN}u_N = c_4 - \sum_{j=2}^{N-1} a_{Nj}u_j$$

Traktując powyższe równania jako układ dwóch równań z dwiema niewiadomymi, w prosty sposób możemy otrzymać wzory na  $u_1$  i  $u_N$ .

### 1.6.2. Dwuwymiarowe równanie Laplace'a

Rozważmy równanie Laplace'a:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad \text{na} \quad \Omega = (0, 1) \times (0, 1) \quad (1.38)$$

z warunkami brzegowymi postaci:

$$\begin{aligned} u(x, 0) &= 0, \\ u(x, 1) &= \sin\left(\frac{\pi x}{2}\right), \\ u(0, y) &= 0, \\ u_x(1, y) &= 0. \end{aligned} \quad (1.39)$$

Dokładnym rozwiązaniem problemu (1.38) - (1.39) jest funkcja:

$$u(x, y) = \frac{1}{\sinh\left(\frac{\pi}{2}\right)} \sinh\left(\frac{\pi y}{2}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{2}\right) \quad (1.40)$$

Rozwiązanie (1.40) będziemy porównywać z rozwiązaniem uzyskanym metodą kwadratur różniczkowych. Dla uproszczenia rozważań przyjmujemy  $M = N$  oraz zakładamy, że podział wzdłuż osi  $OX$  i  $OY$  jest taki sam (tj.  $x_i = y_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ ). Wtedy współczynniki kwadratur dla drugiej pochodnej są równe tzn.  $b_{ij}^x = b_{ij}^y = b_{ij}$ . Dyskretyzacja równania wygląda zatem następująco:

$$\sum_{k=1}^N b_{ik}u_{kj} + \sum_{k=1}^N b_{jk}u_{ik} = 0 \quad (i, j = 2, \dots, N-1), \quad (1.41)$$

gdzie

$b_{ij}$ - współczynniki kwadratury różniczkowej dla drugiej pochodnej dla siatki  $x_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ .  
 $u_{ij}$ - rozwiązanie numeryczne w punkcie  $(x_i, x_j)$ ,  $i = 1, \dots, N$

Przedstawimy teraz dwie metody rozwiązywania problemu (1.38) - (1.39). Dwie pierwsze polegają się na rozwiązaniu dużego układu równań. Różnica między nimi tkwi w implementacji warunków brzegowych (konkretnie warunku Neumanna). Trzecia metoda opiera się na przedstawieniu równania (1.41) w formie Lapunowa.

### Metoda I

W pierwszej metodzie warunki brzegowe wprowadzimy w następujący sposób:

$$\begin{aligned} u_{1j} &= 0 & (j = 1, \dots, N), \\ u_{iN} &= \sin\left(\frac{\pi x_i}{2}\right) & (i = 2, \dots, N), \\ u_{i1} &= 0 & (i = 2, \dots, N), \\ u_{Nj} &= -\frac{1}{a_{NN}} \left( \sum_{k=2}^{N-1} a_{Nk} u_{kj} \right) & (j = 2, \dots, N-1), \end{aligned} \quad (1.42)$$

gdzie  $a_{ij}$  ( $i, j = 1, \dots, N$ ) są współczynnikami kwadratury różniczkowej dla pierwszej pochodnej. Pierwsze trzy warunki są oczywiste. Dyskretyzując warunek  $u_x(1, y) = 0$  metodą kwadratur różniczkowych dostajemy równanie

$$\sum_{k=1}^N a_{Nk} u_{kj} = 0,$$

z którego wyliczamy  $u_{Nj}$ . Uwzględniając fakt, że  $u_{1j} = 0$ , dostajemy warunek czwarty. Równanie (1.41) przepisujemy w postaci:

$$\sum_{k=2}^{N-1} b_{ik} u_{kj} + \sum_{k=2}^{N-1} b_{jk} u_{ik} + b_{i1} u_{j1} + b_{iN} u_{Nj} + b_{j1} u_{i1} + b_{jN} u_{iN} = 0$$

Po wprowadzeniu warunków brzegowych (1.42) dostajemy:

$$\sum_{k=2}^{N-1} b_{ik} u_{kj} + \sum_{k=2}^{N-1} b_{jk} u_{ik} - \frac{b_{iN}}{a_{NN}} \left( \sum_{k=2}^{N-1} a_{Nk} u_{kj} \right) = -b_{jN} \sin\left(\frac{\pi x_i}{2}\right)$$

czyli

$$\sum_{k=2}^{N-1} \left( b_{ik} - \frac{b_{iN} a_{Nk}}{a_{NN}} \right) u_{kj} + \sum_{k=2}^{N-1} b_{jk} u_{ik} = -b_{jN} \sin\left(\frac{\pi x_i}{2}\right).$$

Wprowadzając oznaczenia:

$$\begin{aligned} p_{ik} &:= b_{ik} - \frac{b_{iN} a_{Nk}}{a_{NN}}, \\ s_{ij} &:= -b_{jN} \sin\left(\frac{\pi x_i}{2}\right) \end{aligned}$$



otrzymujemy w końcu:

$$\sum_{k=2}^{N-1} p_{ik} u_{kj} + \sum_{k=2}^{N-1} b_{jk} u_{ik} = s_{ij} \quad (1.43)$$

dla  $i, j = 2, \dots, N-1$ .

Mamy  $(N-2)^2$  równań i tyle samo niewiadomych. Ich układ przedstawiony jest na następującym schemacie:

$$\begin{array}{ccccccc} & & & & & & (1, 1) \\ & & & & & & \\ & u_{1N} & & u_{2N} & \cdots & u_{(N-2)N} & u_{NN} \\ u_{1(N-1)} & \mathbf{u}_{2(N-1)} & \cdots & \mathbf{u}_{(N-1)(N-1)} & & & u_{N(N-1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & & \vdots \\ u_{12} & \mathbf{u}_{22} & \cdots & \mathbf{u}_{(N-1)2} & & & u_{N2} \\ u_{11} & u_{21} & \cdots & u_{(N-1)1} & & & u_{N1} \\ (0, 0) & & & & & & (1, 0) \end{array} \quad (1.44)$$

Równanie (1.43) zapisujemy w postaci macierzowej:

$$M\bar{u} = F$$

Rozmieszczenie elementów  $u_{ij}$  w wektorze  $\bar{u}_{1 \times (N-2)(N-2)}$  jest następujące:

$$\bar{u} = [u_{22}, u_{23}, \dots, u_{2(N-1)}, u_{32}, \dots, u_{3(N-1)}, \dots, u_{(N-1)2}, u_{(N-1)3}, \dots, u_{(N-1)(N-1)}]^T$$

Prawa strona  $F$  ma postać:

$$F = [s_{22}, s_{23}, \dots, s_{2(N-1)}, s_{32}, \dots, s_{3(N-1)}, \dots, s_{(N-1)2}, s_{(N-1)3}, \dots, s_{(N-1)(N-1)}]^T$$

Przy takim uporządkowaniu macierz  $M$  wymiaru  $(N-2)^4$  daje się przedstawić w postaci sumy dwóch macierzy blokowych:  $M = M_1 + M_2$ . Każda z macierzy  $M_i$  pochodzi od jednego ze składników po lewej stronie równania (1.43).

$M_1$  jest następującą macierzą blokową:

$$M_1 = \begin{pmatrix} P_{22} & P_{23} & \cdots & P_{2(N-1)} \\ P_{32} & P_{33} & \cdots & P_{3(N-1)} \\ \cdots & & & \cdots \\ P_{(N-1)2} & P_{(N-1)3} & \cdots & P_{(N-1)(N-1)} \end{pmatrix}$$

gdzie  $P_{ij} = p_{ij} \cdot I_{(N-2) \times (N-2)}$ ,  $I$  jest macierzą identycznościową.

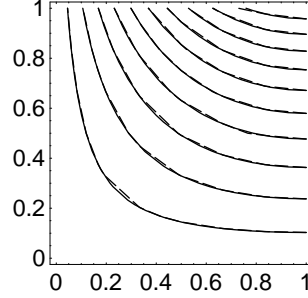
Macierz  $M_2$  można zapisać jako:

$$M_2 = \begin{pmatrix} G & & & \\ & G & & \\ & & \ddots & \\ & & & G \end{pmatrix}$$

gdzie  $G$  jest macierzą  $(N-2) \times (N-2)$ :

$$G = \begin{pmatrix} b_{22} & b_{23} & \cdots & b_{2(N-1)} \\ b_{32} & b_{33} & \cdots & b_{3(N-1)} \\ \cdots & & & \cdots \\ b_{(N-1)2} & b_{(N-1)3} & \cdots & b_{(N-1)(N-1)} \end{pmatrix}$$

Powstały układ równań rozwiązujemy dowolną metodą np. metodą dekompozycji  $LU$ . Rysunek (1.6) przedstawia porównanie wykresu rozwiązania dokładnego oraz rozwią-



**Rys. 1.6.** Rozwiązanie dokładne i metodą KR równania (1.38) - (1.39)

zania numerycznego uzyskanego przy zastosowaniu metody I (siatka równoodległa,  $N = 7$ ).

## Metoda II

Postępujemy, tak jak w metodzie I, aż do uzyskania wzoru (1.43):

$$\sum_{k=2}^{N-1} p_{ik} u_{kj} + \sum_{k=2}^{N-1} b_{jk} u_{ik} = s_{ij}$$

dla  $i, j = 2, \dots, N-1$ . Powyższe równanie możemy zapisać w postaci Lapunowa:

$$CW + WD = S \quad (1.45)$$

gdzie

$$W = \begin{pmatrix} w_{22} & \dots & w_{2(N-1)} \\ w_{32} & & w_{3(N-1)} \\ \dots & & \dots \\ w_{(N-1)2} & \dots & w_{(N-1)(N-1)} \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} s_{22} & \dots & s_{2(N-1)} \\ s_{32} & & s_{3(N-1)} \\ \dots & & \dots \\ s_{(N-1)2} & \dots & s_{(N-1)(N-1)} \end{pmatrix},$$

$$C = \begin{pmatrix} p_{22} & \dots & p_{2(N-1)} \\ p_{32} & & p_{3(N-1)} \\ \dots & & \dots \\ p_{(N-1)2} & \dots & p_{(N-1)(N-1)} \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} b_{22} & \dots & b_{2(N-1)} \\ b_{32} & & b_{3(N-1)} \\ \dots & & \dots \\ b_{(N-1)2} & \dots & b_{(N-1)(N-1)} \end{pmatrix},$$

Do rozwiązywania układu (1.45) stosuje się specjalne metody (adaptacje metod rozwiązywania klasycznego układu  $Ax = b$ ). Podamy (za [78]) adaptację iteracyjnej metody SOR dla równania (1.45)

**Metoda SOR dla układu równań w formie Lapunowa.** (postać algebraiczna)

$$w_{ij}^{(n+1)} = w_{ij}^{(n)} + \frac{\omega}{C_{ii} + D_{jj}} \left( S_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} C_{ik} w_{kj}^{(n+1)} + \right. \\ \left. - \sum_{k=i}^M C_{ik} w_{kj}^{(n)} - \sum_{k=1}^{j-1} D_{jk} w_{ik}^{(n+1)} - \sum_{k=j}^M D_{jk} w_{ik}^{(n)} \right) \quad (1.46)$$

dla  $i, j = 2, \dots, N-1$ .

### Analiza błędu i porównanie z metodą różnicową

Maksymalny błąd metody numerycznej zdefiniujemy jako:

$$\Delta u_{max} = \max_{i,j} |u_{ij}^{\text{dokł.}} - u_{ij}^{\text{num.}}|$$

Po rozwiązaniu problemu (1.38) - (1.39) metodami **I**, **II** oraz klasycznym schematem różnicowym drugiego rzędu otrzymano następujące wartości  $\Delta u_{max}$ :

Siatka	$7 \times 7$	$11 \times 11$	$15 \times 15$	$21 \times 21$
Sch. różn.	$1.14 \times 10^{-3}$	$4.19 \times 10^{-4}$	$2.13 \times 10^{-4}$	$1.05 \times 10^{-4}$
KR I	$1.72 \times 10^{-6}$	$8.25 \times 10^{-12}$	$2.28 \times 10^{-15}$	$1.07 \times 10^{-14}$
KR II	$1.72 \times 10^{-6}$	$8.25 \times 10^{-12}$	$1.50 \times 10^{-15}$	$1.20 \times 10^{-14}$

**Tabela 1.1.** Analiza błędu dla równania Laplace'a.

Jak widać metoda kwadratur różniczkowych daje, nawet przy rzadkich siatkach, nieporównanie lepsze wyniki niż schemat różnicowy drugiego rzędu. Przy jeszcze większym zagęszczeniu ( $65 \times 65$ )  $\Delta u_{max}$  dla schematu różnicowego wynosi  $8.82 \times 10^{-6}$  czyli jest takiego rzędu jak  $\Delta u_{max}$  dla metody KR przy siatce  $7 \times 7$ .

### 1.6.3. Równanie Burgersa

Zajmiemy się rozwiązaniem równania

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + u(t, x) \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) = v \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) \quad (t, x) \in [0, t^*] \times [0, 1] \quad (1.47)$$

z warunkiem początkowym postaci

$$u(0, x) = f(x), \quad (1.48)$$

gdzie  $v = \text{const}$ , a  $f$  jest zadaną funkcją.

Aby otrzymać dokładne rozwiązanie równania (1.47) wprowadzimy następującą transformację:

$$u(t, x) = -2v \frac{\partial w(t, x)}{\partial x} \cdot \frac{1}{w(t, x)} \\ f(x) = -2v \frac{dg(x)}{dx} \cdot \frac{1}{g(x)}$$

Po jej zastosowaniu otrzymujemy równanie:

$$\frac{\partial w}{\partial t}(t, x) = v \frac{\partial^2 w}{\partial x^2}(t, x) \quad (1.49)$$

z warunkiem początkowym

$$w(0, x) = g(x). \quad (1.50)$$

Jeżeli za  $f$  przyjmiemy:

$$f(x) = -2v \frac{b\pi \cos(\pi x) + 0.5c\pi \cos(\frac{\pi x}{2})}{b \sin(\pi x) + c \sin(\frac{\pi x}{2}) + d},$$

gdzie  $b$ ,  $c$  i  $d$  są stałymi, to rozwiązaniem problemu (1.49) będzie funkcja

$$w(t, x) = be^{-v\pi^2 t} \sin(\pi x) + ce^{-0.25v\pi^2 t} \sin(\frac{\pi x}{2}) + d.$$

Korzystając z poprzedniej transformacji otrzymujemy rozwiązanie równania (1.47):

$$u(t, x) = -2v \frac{\pi be^{-v\pi^2 t} \cos(\pi x) + \frac{\pi}{2} ce^{-\frac{v\pi^2 t}{4}} \cos(\frac{\pi x}{2})}{be^{-v\pi^2 t} \sin(\pi x) + ce^{-\frac{v\pi^2 t}{4}} \sin(\frac{\pi x}{2}) + d}.$$

Dla celów obliczeniowych przyjmiemy  $b = 0.2$ ,  $c = 0.1$ ,  $d = 0.3$  oraz  $v = 0.01$ .

Niech  $S$  będzie siatką o  $N$  węzłach równoodległych na przedziale  $[0, 1]$ . Przez  $a_{ij}$  oznaczmy współczynniki kwadratury różniczkowej dla siatki  $S$  dla pierwszej pochodnej, przez  $b_{ij}$  współczynniki kwadratury różniczkowej dla siatki  $S$  dla drugiej pochodnej. Po dyskretyzacji zmiennej przestrzennej  $x$  równanie (1.47) przyjmuje postać:

$$\frac{du_i}{dt} = -u_i \sum_{k=1}^N a_{ik} u_k + v \sum_{k=1}^N b_{ik} u_k \quad (1.51)$$

Powyższe równanie jest równaniem różniczkowym zwyczajnym. Ponieważ mamy zadany warunek początkowy, a nie mamy nałożonych warunków brzegowych, równanie (1.51) stosujemy we wszystkich punktach siatkowych – także dla  $x = 0$  oraz  $x = 1$ .

Do rozwiązania tego równania możemy użyć np. 3-krokowego schematu Adamsa–Bashfortha, który dla równania (1.51) przyjmuje postać:

$$u_i^{(l+3)} = u_i^{(l+2)} + \frac{h}{12} (23p_i^{(l+2)} - 16p_i^{(l+1)} + 5p_i^{(l)}),$$

gdzie  $h$  jest krokiem przestrzennym siatki  $S$ ,  $p_i^{(l)} = -u_i^{(l)} \sum_{k=1}^N a_{ik} u_k^{(l)} + v \sum_{k=1}^N b_{ik} u_k^{(l)}$ , a  $u_i^{(l)} \approx u(x_i, l \cdot s)$ , dla ustalonego kroku czasowego  $s$ .

W tabeli 1.2 przedstawione jest porównanie rozwiązania dokładnego z wynikami uzyskanymi przy dyskretyzacji równania (1.47) metodą kwadratur różniczkowych i rozwiązywaniu powstałego układu równań różniczkowych zwyczajnych metodą Adamsa–Bashfortha. Krok czasowy  $s = 0.01$ ,  $N = 7, 11, 21$ .

t	x	Rozwiązanie KR			dokładne
		$N = 7$	$N = 11$	$N = 21$	
0.1	0.0	-0.051925	-0.051923	-0.051923	-0.051923
	0.5	-0.003897	-0.003897	-0.003897	-0.003897
	1.0	0.031138	0.031126	0.031126	0.031127
0.5	0.0	-0.050243	-0.050226	-0.050215	-0.050215
	0.5	-0.003917	-0.003917	-0.003917	-0.003917
	1.0	0.030067	0.029994	0.029995	0.029995
1.0	0.0	-0.048265	-0.048221	-0.048170	-0.048168
	0.5	-0.003939	-0.003939	-0.003939	-0.003939
	1.0	0.028820	0.028628	0.028640	0.028638

Tabela 1.2. Rozwiązanie równania Burgersa.

#### 1.6.4. Problem własny Helmholtza

Niech  $\Omega = (0, L_x) \times (0, L_y)$ . Rozważmy równanie (problem własny Helmholtza):

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + k^2 u = 0 \quad \text{w } \Omega, \quad (1.52)$$

z warunkiem brzegowym w postaci Dirichleta:

$$u = 0 \quad \text{na } \partial\Omega. \quad (1.53)$$

Będziemy poszukiwać wartości  $k$ . Wiadomo, że dla problemu (1.52) - (1.53) wyrażają się one wzorem:

$$k = \sqrt{\left(\frac{m}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{n}{L_y}\right)^2} \quad (m, n = 1, 2, \dots). \quad (1.54)$$

Po dyskretyzacji metodą KR równania (1.52) otrzymujemy

$$\sum_{k=1}^N b_{ik}^x u_{kj} + \sum_{k=1}^M b_{jk}^y u_{ik} = -k^2 u_{ij}. \quad (1.55)$$

Uwzględniając warunki brzegowe (1.53) dostajemy:

$$\sum_{k=2}^{N-1} b_{ik}^x u_{kj} + \sum_{k=2}^{M-1} b_{jk}^y u_{ik} = -k^2 u_{ij},$$

co można zapisać w postaci macierzowej:

$$M\bar{u} = -k^2 \bar{u} \quad (1.56)$$

Macierz  $M$  i wektor  $\bar{u}$  mają strukturę analogiczną do macierzy  $M$  i wektora  $\bar{u}$  otrzymanych przy rozwiązywaniu równania Poissona (str. 17).

Na prostokącie  $[0, L_x] \times [0, L_y]$  wprowadzimy siatki typu **I** (def. na stronie 12):

$$x_i = \frac{1}{2} \left( 1 - \cos \frac{i\pi}{N-1} \right) \cdot L_x, \quad i = 0, 2, \dots, N-1,$$

$$y_j = \frac{1}{2} \left( 1 - \cos \frac{j\pi}{M-1} \right) \cdot L_y, \quad j = 0, 2, \dots, M-1.$$

Wartości własne macierzy  $M$  możemy znaleźć przy pomocy metody QR.

W tabeli (1.3) przedstawiamy wyniki uzyskane dla pierwszych 10 wartości własnych oraz porównanie z wynikami dokładnymi uzyskanymi ze wzoru (1.54).

k	Rozwiązanie KR		Błąd $ k^{\text{num.}} - k^{\text{dokł.}} $	
	$9 \times 9$	$15 \times 15$	$9 \times 9$	$15 \times 15$
$k_1$	5.029000	5.029002	$1.15 \times 10^{-7}$	$7.99 \times 10^{-14}$
$k_2$	7.409554	7.409431	$1.22 \times 10^{-4}$	$2.87 \times 10^{-10}$
$k_3$	8.459165	8.458997	$1.68 \times 10^{-4}$	$3.93 \times 10^{-10}$
$k_4$	10.058236	10.058004	$2.32 \times 10^{-4}$	$5.42 \times 10^{-10}$
$k_5$	10.206027	10.210176	$4.15 \times 10^{-3}$	$3.96 \times 10^{-8}$
$k_6$	12.187230	12.192658	$5.43 \times 10^{-3}$	$5.18 \times 10^{-8}$
$k_7$	12.264975	12.268311	$3.33 \times 10^{-3}$	$3.32 \times 10^{-8}$
$k_8$	13.323825	13.165678	$1.58 \times 10^{-1}$	$5.99 \times 10^{-6}$
$k_9$	13.346880	13.351769	$4.89 \times 10^{-3}$	$4.75 \times 10^{-8}$
$k_{10}$	14.959643	14.818868	$1.41 \times 10^{-1}$	$5.32 \times 10^{-6}$

**Tabela 1.3.** Rozwiązanie problemu własnego Helmholtza dla  $L_x = 1.0$ ,  $L_y = 0.8$ .

## Bibliografia

- [1] Adach A., Bożek B., Vladimirov V., Wroński S.: *Model migracji i immobilizacji zanieczyszczeń w złożu ziarnistym. wpływ niesymetrycznego rozkładu przestrzennego aglomeratów sorpcyjnych*. Preprint 32, Kraków, Wydział Matematyki Stosowanej AGH, 2002 Preprint 32
- [2] Ames W. F.: *Numerical Methods for Partial Differential Equations*. MA: Academic Press, 1992
- [3] Atkinson K., Han W.: *Theoretical Numerical Analysis, a Functional Analysis Framework*. New York, Springer-Verlag Inc., 2001
- [4] Barret R., Berry M., Chan T., Demmel J., Donato J., Dongarra J., Eijkhout V., Pozo R., Romine C., Vorst H.: *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*. <http://www.netlib.org/templates/templates/Templates.html>.
- [5] Bartoszewski Z., Jackiewicz Z.: *Construction of two-step Runge-Kutta methods of high order for ordinary differential equations*. Numerical Algorithms, 18, 1998, 51–70
- [6] Bellman R.E., Kashef B.G., Casti J.: *Differential quadrature: a technique for rapid solution of nonlinear partial differential equations*. J. Comput. Phys., 10, 1972
- [7] Bézier P.: *Numerical control – mathematics and applications*. London, John Wiley and Sons, 1972
- [8] Białas S., Olajossy A.: *Różnicowe metody rozwiązywania równań różniczkowych, Część I, Równania różniczkowe zwyczajne*. Kraków, Wyd. AGH, 1985
- [9] Blowey J. F., Coleman J. P., Craig A. W.: *Theory and Numerics of Differential Equations*. wyd. 1, Durham, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2001
- [10] Bożek B.: *A difference scheme for an elliptic system of non-linear differential-functional equations with Dirichlet type boundary conditions in arbitrary bounded set*. Opuscula Mathematica, z. 2, 1986, 9–24
- [11] Bożek B.: *Ćwiczenia z programowania. Metody numeryczne*. Kraków, UWND AGH, 2001
- [12] Bożek B.: *Rozwiązywanie równania Poissona metodą spektralną*. Informatyka w technologii materiałów, Nr 2-3, tom 2, 2002, 41–45
- [13] Bożek B., Filipek R., Holly K., Mączka C.: *Distribution of temperature in three-dimensional solids*. Opuscula Mathematica, 20, 2000, 27–40
- [14] Bożek B., Holly K.: *Stacjonarny rozkład ciepła w ośrodku niejednorodnym*. vol 1 Informatyka w technologii materiałów, 2001, 61–72
- [15] Bożek B., Holly K.: *Wyznaczanie geodezyjnych*. Materiały V Międzynarodowej Konferencji Matematyka w Naukach Technicznych i Przyrodniczych, Krynica 4-7 czerwca 2000, 5–11
- [16] Bożek B., Holly K., Jaskólski J.: *Numeryczne aspekty wyznaczania rozkładu temperatur w tłoku silnika wysokoprężnego z wkładkami*. Zeszyt 6, Konstrukcja, Badania,

- Eksploatacja, Technologia pojazdów samochodowych i silników spalinowych, seria Teka Komisji Naukowo-Problemowej Motoryzacji PAN o/Kraków, 1995, 5–18
- [17] Bożek B., Mączka C.: *Programowanie w języku C, wydanie drugie*. Kraków, UWND AGH, 2001
  - [18] Bożek B., Środa P.: *Modyfikacja wielomianowych krzywych Béziera*. Informatyka w Technologii Materiałów, t. 2(Nr 1), 2002, 34–37
  - [19] Bożek B., Środa P.: *Modyfikacja wielomianowych powierzchni Béziera*. Informatyka w Technologii Materiałów, t. 2(Nr 4), 2002, 101–105
  - [20] Bożek B., Środa P.: *Interpolacja krokowa*. Informatyka w Technologii Materiałów, t. 4(Nr 1-2), 2004, 65–68
  - [21] Box M.: *A new method of constrained optimization and a comparison with other methods*. Comp. J., 8, 1965, 42
  - [22] Burden R. L., Faires J. D.: *Numerical Analysis third edition*. Boston: Prindle, Weber & Schmidt, 1988
  - [23] Chomątowski S., Sokołowski A.: *Taksonomia struktur*. em Przegląd Statystyczny, z.2, 1978
  - [24] Chorin A. J.: *Numerical solution of the Navier-Stokes equations*. Math. Comp., 22:745–762, 1968
  - [25] Ciarlet P.: *The Finite Element Method for Elliptic Problems*. Amsterdam – New York – Oxford: North-Holland Publishing Company, 1978
  - [26] Cipra B. A.: *Rocking the boat with a new theory of turbulence*. wolumen 29, seria SIAM NEWS. September 1996
  - [27] Cook R. D., Malkus D. S., Plesha M. E., Witt R. J.: *Concepts and Applications of Finite Element Analysis, Fourth Edition*. John Wiley and Sons, Inc., 2002
  - [28] Danielewski M., Krzyżański W., Figura B., Kita P., Pęczak G.: *The non-reduced solution of the Fischer model, grain boundary diffusion in  $\mathbb{R}^3$* . Metallofiz. Noveishie Tekhnol., 21(55), 1999
  - [29] Descloix J.: *Méthode des éléments finis*. Suisse: Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 1973
  - [30] Diačenko W. F.: *Osnovnye ponyatiya vychislitelnoj matematiki*. Moskva: Izdatelstvo Nauka, 1972
  - [31] Dryja M., Jankowska J., Jankowski M.: *Przegląd metod i algorytmów numerycznych, Część 2*. Warszawa, WNT, 1982.
  - [32] Ecker J., Kupferschmid M.: *Introduction to operations research*. New York Chichester Brisbane Toronto Singapore: John Wiley and Sons, 1988
  - [33] Engeln-Müllges G., Uhlig F.: *Numerical Algorithms with C*. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag, 1996
  - [34] Evans G., Blackledge J., Yardley P.: *Numerical methods for partial differential equations*. Springer Undergraduate Mathematics Series. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag, 2001
  - [35] Evans L.: *Równania różniczkowe cząstkowe*. Warszawa, PWN, 2002
  - [36] Findeisen W., Szymanowski J., Wierzbicki A.: *Teoria i metody obliczeniowe optymalizacji, wydanie drugie poprawione*. Warszawa, PWN, 1980
  - [37] Fortuna Z., Macukow B., Wąsowski J.: *Metody Numeryczne, Wydanie drugie poprawione*. Warszawa, WNT, 1993
  - [38] Gajek L., Kołuszka M.: *Wnioskowanie statystyczne: modele i metody*. Warszawa, WNT, 2000
  - [39] Gajewski H., Gröger K., Zacharias K.: *Nichtlineare Operatorgleichungen und Operator-differentialgleichungen*. Berlin, Akademie - Verlag, 1974



- 
- [40] Garfinkel R. S., Nemhauser G. L.: *Programowanie całkowitoliczbowe*. Warszawa, PWN, 1978
- [41] Gass S.: *Programowanie liniowe - Metody i zastosowania*. Warszawa, PWN, 1976
- [42] Gear C.: *Numerical initial value problems in ordinary differential equations*. Englewood Cliffs, Prentice Hall, 1971
- [43] Grabowski W.: *Programowanie matematyczne*. Warszawa, PWE, 1970
- [44] Higham N.: *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms*. Philadelphia, PA: SIAM, 1996
- [45] Holly K., Mosurski R.: *Automatic triangulation in arbitrary two-dimensional domains*. *Opuscula Mathematica*, 17:23–32, 1997
- [46] Hunter P., Pullan A.: *FEM/BEM Notes*. The University of Auckland New Zealand: Department of Engineering Science, 1997
- [47] Jackiewicz Z., Jankowski M.: A general class of two-step Runge-Kutta methods for ordinary differential equations. *SIAM J., Numer. Anal.*, 32:1390–1427, 1995
- [48] Jankowska J., Jankowski M.: *Przegląd metod i algorytmów numerycznych, Część 1*, wolumen 1. Warszawa, WNT, 1981. ISBN 83-204-0226-3.
- [49] Jankowski M.: *Elementy grafiki komputerowej*. Warszawa, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, 1990
- [50] Kaczmarz S.: Approximate solution of systems of linear equations (oryginalnie opublikowana jako: Angenäherte auflösung von systemen linearer gleichungen bulletin international de l'academie polonaise des sciences, lett. a., 1937, 355–357). *Int. J. Control*, 57, 1993
- [51] Kaliakin V.: *Introduction to Approximate Solution Techniques, Numerical Modeling, and Finite Element Methods*. Marcel Dekker, Inc., 2002
- [52] Kalichman I.: *Algebra liniowa i programowanie*. Warszawa, Biblioteka Naukowa Inżyniera, 1971
- [53] Keller H.: *Numerical Methods for Two Point Boundary Value Problems*. Waltham-Toronto-London: Blaisdell, 1968
- [54] Kiciak P.: *Podstawy modelowania krzywych i powierzchni – zastosowania w grafice komputerowej*. Warszawa, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, 2000
- [55] Kosma: *Wyznaczanie ruchu cieczy lepkiej metodą dekompozycji pola prędkości*. Gdańsk: Wyd. Instytutu Maszyn Przepływowych, 1994
- [56] Kotulski Z.: *Generatory liczb losowych: algorytmy, testowanie, zastosowania*. *Matematyka Stosowana (Matematyka dla Społeczeństwa)*, 2(43):32–66, 2001
- [57] Krupowicz A.: *Metody numeryczne zagadnień początkowych równań różniczkowych zwyczajnych*. Warszawa, PWN, 1986
- [58] Lambert J.: *Computational Methods in Ordinary Differential Equations*. Chichester/New York: Wiley, 1973
- [59] Malec M.: *Sur une méthode des differences finies pour une équation non linéaire différentielle fonctionnelle aux dérivées mixtes*. *Annales Polonici Mathematici*, XXXVI:1–10, 1979
- [60] Manteuffel K., Seiffart S.: *Wstęp do algebry liniowej i programowania liniowego*. Warszawa, PWN, 1975
- [61] Marczuk G.: *Analiza numeryczna zagadnień fizyki matematycznej*. Warszawa, PWN, 1983
- [62] Nelder J., Mead R.: A simplex method for function minimization. *Comp. J.*, 7, 1965, 308
- [63] Niederreiter H.: *Random Number Generation and Quasi-Monte Carlo Methods*. Philadelphia: SIAM, 1992

- [64] Ortega J., Rheinboldt W.: *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*. New York and London: Academic Press, 1970
- [65] Palczewski A.: *Równania różniczkowe zwyczajne, teoria i metody numeryczne z wykorzystaniem komputerowego systemu obliczeń symbolicznych*. Warszawa, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, 1999
- [66] Paszkowski S.: *Zastosowania numeryczne wielomianów i szeregów Czebyszewa*. Warszawa, PWN, 1975
- [67] Polak E.: *Computational Methods in Optimization, A Unified Approach*. New York · London: Academic Press, 1971
- [68] Press W. H., Teukolsky S. A., Vetterling W. T., Flannery B. P.: *Numerical Recipes in C, The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, wyd. 2, 1995
- [69] Ralston A.: *Wstęp do analizy Numerycznej*. Warszawa, PWN, 1975
- [70] Rebay S.: Efficient unstructured mesh generation by means of delaunay triangulation and Bowyer-Watson algorithm. *J. Comput. Phys.*, 105, 1993, 125–138
- [71] Reek K. A.: *Język C Wskaźniki, Vademecum profesjonalisty*. Gliwice: Wydawnictwo HELION, 2003
- [72] Samarski A., Nikolajew J.: *Metody rozwiązywania równań siatkowych*. Warszawa, PWN, 1988
- [73] Samarski A. A.: *Teoria raznostnykh shem*. Moskva: Izdatelstvo Nauka, 1977
- [74] Schewchuk J.: *Delaunay Refinement Mesh Generation*. Praca doktorska, Technical Report CMU-CS-97-137, School of Computer Science, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, Pennsylvania, 1997
- [75] Schild H.: *Programowanie w C*. Warszawa, Wydawnictwo RM, 2002
- [76] Schild H.: *Programowanie w C++*. Warszawa, Wydawnictwo RM, 2002
- [77] Seidler J., Badach A., Molisz W.: *Metody rozwiązywania zadań optymalizacji*. Warszawa, WNT, 1980
- [78] Shu C.: *Differential Quadrature and Its Application in Engineering*. Springer, 2000
- [79] Sobolev S.: *Vvedenie w teoriyu kubaturnykh formul*. Moskva: Izdatelstvo Nauka, 1974
- [80] Stoer J.: *Wstęp do metod numerycznych, t.1*. Warszawa, PWN, 1979
- [81] Stoer J., Bulirsch R.: *Wstęp do metod numerycznych, t.2*. Warszawa, PWN, 1980
- [82] Stroud A.: *Approximate Calculation of Multiple Integrals*. Englewood Cliffs, New Jersey: Prentice-Hall, Inc., 1971
- [83] Sysło M., Deo N., Kowalik J.: *Algorytmy optymalizacji dyskretnej (z programami w języku Pascal)*. Warszawa, PWN, 1995
- [84] Thomée V.: *Galerkin Finite Element Methods for Parabolic Problems*. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 1997
- [85] Varga R.: *Matrix Iterative Analysis*. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall Inc., 1962
- [86] Wit R.: *Metody programowania nieliniowego*. Warszawa, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, 1986
- [87] Wolfram S.: *The Mathematica Book, Fourth Edition*. Wolfram Media, Cambridge University Press, 1999
- [88] Wysocki F., Wagner W.: *O ustalaniu wartości progowej zróżnicowania struktur z danych empirycznych*. nr 9 Seria Wiadomości Statystyczne, 1989
- [89] Zieliński R.: *Generatory liczb losowych*. Warszawa, WNT, 1972
- [90] Zieliński R.: *Wytwarzanie losowości*. *Wiad. Mat.*, 29:189–203, 1992
- [91] Ziółko M., Kozłowski J.: *Some optimization models of growth in biology*. *IEEE Transaction on Automatic Control*, 40(10), 1995. IETAA 9
- [92] Zwerkina T. S.: *Odnoparametričeskij analog formul Adamsa*. *Zhurnal vyčislitel'noj matematiki i matematičeskoj fiziki*, Tom 8(4), 1968

## Skorowidz

kwadratury  
    różniczkowe, 4, 9, 15

równanie  
    Burgersa, 20  
    Helmholtza, 22  
    Laplace'a, 16  
    Poissona, 15

siatka  
    Czebyszewa, 13  
    Czebyszewa-Gaussa-Lobatto, 13  
    o węzłach równoodległych, 13

twierdzenie  
    o współczynnikach kwadratury róż-  
        niczkowej, 5