

MATEMATYKA STOSOWANA I METODY NUMERYCZNE

Wybrane z wykładów – część 2

1. CAŁKOWANIE NUMERYCZNE

Metody całkowania numerycznego:

–wzory Newtona–Cotesa

$$x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1} = h = \text{const}$$

bazują na interpolacji wielomianowej

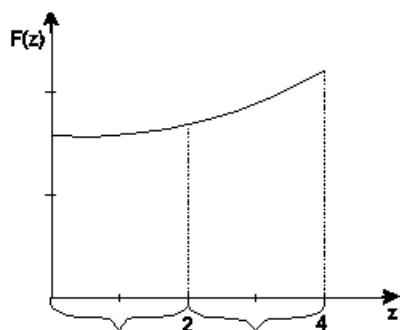
–kwadratura Gaussa

optymalnie dobrane x_i (najlepsza dokładność)

bazuje na wielomianach ortogonalnych

całki osobliwe

Składanie wzorów



$$\int_0^4 \dots dz = \int_0^2 \dots dz + \int_2^4 \dots dz$$

wzór prostokątów $\int_a^b f(x) dx \approx h \sum_{i=0}^{n-1} f_i$

wzór trapezów $\int_a^b f(x) dx \approx h \left[\frac{1}{2}(f_0 + f_n) + \sum_{i=1}^{n-1} f_i \right]$

$$f_0 = f(a), \quad f_n = f(b)$$

wzór Simpsona $\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} \left[f_0 + f_{2n} + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f_{2i} + 4 \sum_{i=0}^{n-1} f_{2i+1} \right]$

$$f_0 = f(a), \quad f_{2n} = f(b), \quad h = x_{i+1} - x_i$$

- We wzorze Simpson'a liczba węzłów n powinna być nieparzysta

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + f_2) \quad \text{wzór 1/3}$$

- Jeżeli ten warunek nie jest spełniony, dla pierwszych lub ostatnich 4-ch węzłów stosowany jest wzór Simpson'a tzw. 3/8

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{3h}{8} (f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3) \quad \text{wzór 3/8}$$

oraz klasyczny wzór 1/3 dla pozostałych przedziałów

Kwadratury Gaussa

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

W kwadraturach Gaussa węzły x_i oraz wagi w_i są dobierany w taki sposób, by dokładnie obliczyć całkę funkcji stopnia $2n-1$ lub niższego

$$I = \int_a^b F(z) dz$$

Przejście pomiędzy przedziałem $[a, b]$ a przedziałem $[-1, 1]$ (zmiana zmiennych całkowania)

$$x = \frac{2z - a - b}{b - a} \quad \Leftrightarrow \quad z = \frac{b - a}{2} x + \frac{a + b}{2}$$

$$\int_a^b F(z) dz \approx \frac{b - a}{2} \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

Dwupunktowa kwadratura $x_{1,2} = \pm \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad w_{1,2} = 1$

Trzypunktowa kwadratura $x_{1,2,3} = -\sqrt{\frac{3}{5}}, 0, \sqrt{\frac{3}{5}} \quad w_{1,2,3} = \frac{5}{9}, \frac{8}{9}, \frac{5}{9}$

Przykład:

Obliczyć całkę stosując dwupunktową i trzypunktową kwadraturę Gaussa:

$$I = \int_0^{1/2} \sqrt{1+z} dz = \frac{2}{3} (1+z)^{3/2} \Big|_0^{1/2} = \frac{2}{3} \left[\left(\frac{3}{2} \right)^{3/2} - 1 \right] = 0.5580782$$

Przejście pomiędzy przedziałami

$$z = \frac{0.5 - 0}{2} x + \frac{0 + 0.5}{2} = \frac{1}{4} x + \frac{1}{4}$$

$$I = \frac{0.5 - 0}{2} \int_{-1}^1 \sqrt{1.25 + 0.25x} dx \quad \rightarrow \quad f(x) = \sqrt{1.25 + 0.25x}$$

$$\tilde{I} = \frac{1}{4} \sum_{i=0}^n w_i \sqrt{1.25 + 0.25x_i}, \quad n = 2, 3$$

- Wzór dwupunktowy ($n = 2$):

$$\tilde{I} = \frac{1}{4} \sqrt{1.25 - 0.25 \cdot 1/\sqrt{3}} + \frac{1}{4} \sqrt{1.25 + 0.25 \cdot 1/\sqrt{3}} = 0.55808$$

$$\frac{I - \tilde{I}}{I} = \left| \frac{0.5580782 - 0.5580814}{0.5580782} \right| = 5.734 \times 10^{-6} \approx 0.0006\%$$

- Wzór trzypunktowy ($n = 3$):

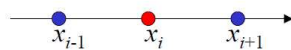
$$\tilde{I} = \frac{1}{4} \cdot \frac{5}{9} \sqrt{1.25 - 0.25 \cdot \sqrt{3/5}} + \frac{1}{4} \cdot \frac{5}{9} \sqrt{1.25 + 0.25 \cdot \sqrt{3/5}} + \frac{1}{4} \cdot \frac{8}{9} \sqrt{1.25 - 0.25 \cdot 0} = 0.558078$$

$$\frac{I - \tilde{I}}{I} = \left| \frac{0.5580782 - 0.5580782}{0.5580782} \right| = 0 \quad \frac{I - \tilde{I}}{I} = 3.14 \times 10^{-8}$$

2. RÓŻNICZKOWANIE NUMERYCZNE

Pierwsza pochodna:

$$f'_i \approx \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} \text{ - wzór centralny}$$

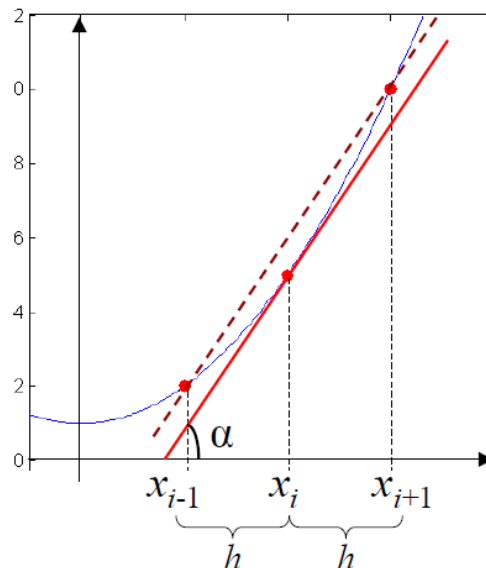
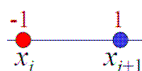


gwiazda różnicowa

$$f'_i \approx \frac{f_i - f_{i-1}}{h} \text{ - wzór wstecz}$$



$$f'_i \approx \frac{f_{i+1} - f_i}{h} \text{ - wzór wprzód}$$



Drua pochodna

$$f''_i \approx \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{h^2}$$

Wyprowadzenie z rozwinięcia w szereg Taylora:

$$f_{i+1} = f(x_{i+1}) = f(x_i + h) = f_i + hf'_i + \frac{h^2}{2} f''_i + \frac{h^3}{6} f'''_i + \dots$$

Pierwsza pochodna

$$f_{i+1} = f_i + hf'_i + \frac{h^2}{2} f''_i + \frac{h^3}{6} f'''_i + \dots$$

$$- \quad f_{i-1} = f_i - hf'_i + \frac{h^2}{2} f''_i - \frac{h^3}{6} f'''_i + \dots$$

$$f_{i+1} - f_{i-1} = 2hf'_i + \underbrace{\frac{2h^3}{6} f'''_i + \dots}_{\text{błąd}}$$



$$f'_i \approx \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + O(h^2)$$

Drua pochodna

$$f_{i+1} = f_i + hf'_i + \frac{h^2}{2} f''_i + \frac{h^3}{6} f'''_i + \dots$$

$$+ \quad f_{i-1} = f_i - hf'_i + \frac{h^2}{2} f''_i - \frac{h^3}{6} f'''_i + \dots$$

$$f_{i+1} + f_{i-1} = 2f_i + h^2 f''_i + O(h^4)$$



$$f''_i \approx \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{h^2}$$

Wyprowadzenie z interpolacji Lagrange'a:

$$\tilde{f} = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_{-1}-x_0)(x_{-1}-x_1)} f_{-1} + \frac{(x-x_{-1})(x-x_1)}{(x_0-x_{-1})(x_0-x_1)} f_0 + \frac{(x-x_{-1})(x-x_0)}{(x_1-x_{-1})(x_1-x_0)} f_1$$

$$x_1 - x_0 = h, \quad x_{-1} - x_0 = -h$$

$$\tilde{f} = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2h^2} f_{-1} + \frac{(x-x_{-1})(x-x_1)}{-h^2} f_0 + \frac{(x-x_{-1})(x-x_0)}{2h^2} f_1$$

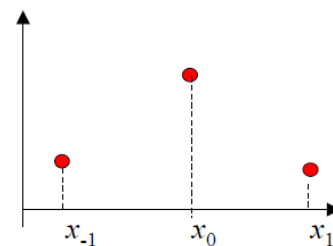
$$\tilde{f}' = \frac{f_{-1}}{2h^2}(x-x_1+x-x_0) - \frac{f_0}{h^2}(x-x_1+x-x_{-1}) + \frac{f_1}{2h^2}(x-x_0+x-x_{-1})$$

$$\tilde{f}'' = \frac{f_{-1}}{2h^2} \cdot 2 - \frac{f_0}{h^2} \cdot 2 + \frac{f_1}{2h^2} \cdot 2$$

→ $x = x_0$

$$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}$$

$$f''_i \approx \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{h^2}$$

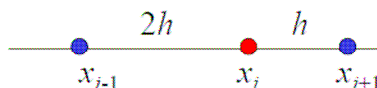


Metoda współczynników nieoznaczonych

Przykład

Dla danej gwiazdy wyprowadzić operator różnicowy w postaci

$$f'(x_i) = \alpha f_{i-1} + \beta f_i + \gamma f_{i+1}$$



Znaleźć

$$\alpha, \beta, \gamma \quad \text{przy} \quad x_{i+1} = x_i + h \quad x_{i-1} = x_i - 2h$$

- Rozwijamy w szereg Taylora

$$f_{i-1} = f(x_i - 2h) = f_i - 2hf'_i + \frac{4}{2}h^2 f''_i - \frac{8}{6}h^3 f'''_i + \dots \quad | \alpha$$

$$f_i = f_i \quad | \beta$$

$$f_{i+1} = f(x_i + h) = f_i + hf'_i + \frac{1}{2}h^2 f''_i + \frac{1}{6}h^3 f'''_i + \dots \quad | \gamma$$

$$\begin{array}{l} f \\ f' \\ f'' \\ f''' \end{array} \left| \begin{array}{l} \alpha + \beta + \gamma \\ -2h\alpha + h\gamma \\ 2h^2\alpha + \frac{h^2}{2}\gamma \\ \frac{-4}{3}h^3\alpha + \frac{h^3}{6}\gamma \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} 0f_i + 1f'_i + 0f''_i + \dots = f_i \overbrace{(\alpha + \beta + \gamma)}^{=0} + f'_i \overbrace{(-2h\alpha + h\gamma)}^{=1} + \\ + f''_i h^2 \overbrace{(2\alpha + 1/2\gamma)}^{=0} + f'''_i \frac{1}{6} h^3 \overbrace{(-8\alpha + \gamma)}^{=R} + \dots \end{array}$$

$$0f_i + 1f_i' + 0f_i'' + \dots = f_i \overbrace{(\alpha + \beta + \gamma)}^{=0} + f_i' \overbrace{(-2h\alpha + h\gamma)}^{=1} + \\ + f_i'' h^2 \overbrace{(2\alpha + 1/2\gamma)}^{=0} + f_i''' \frac{1}{6} h^3 \overbrace{(-8\alpha + \gamma)}^{=R} + \dots$$

$$\begin{cases} \alpha + \beta + \gamma = 0 \\ -2h\alpha + h\gamma = 1 \\ 2\alpha + 1/2\gamma = 0 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} \alpha = -\frac{1}{6h} \\ \beta = -\frac{3}{6h} \\ \gamma = \frac{4}{6h} \end{cases} \quad f_i' \approx \frac{1}{h} \begin{bmatrix} -\frac{1}{6} & -\frac{1}{2} & \frac{2}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_{i-1} \\ f_i \\ f_{i+1} \end{bmatrix}$$

$$f'(x_i) = \frac{4f_{i+1} - 3f_i - f_{i-1}}{6h} + \frac{h^3}{6} f_i''' + \dots \equiv \frac{4f_{i+1} - 3f_i - f_{i-1}}{6h} + O(h^2)$$

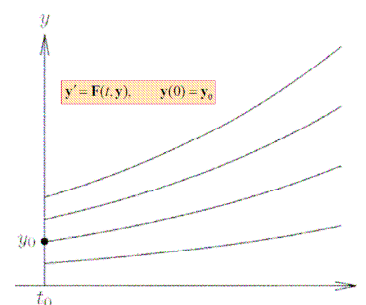
3. ZAGADNIENIA POCZĄTKOWE

Twierdzenie Picarda:

- Jeżeli
 - $f(x, y)$ - ciągła w obszarze $a \leq x \leq b, -\infty < y < \infty$;
 - $\exists L > 0: |f(x, y_1) - f(x, y_2)| < L|y_1 - y_2| \quad \forall (x, y_1), (x, y_2)$
(spełnia warunek Lipszitz)

- $\exists!$ rozwiązanie $y(x)$ zagadnienia początkowego

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y) \\ y(a) = y_0 \end{cases}$$



Każdy problem początkowy można zapisać w postaci:

$$\mathbf{y}' = \mathbf{F}(x, \mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0 \\ \mathbf{y} = \{y_1, \dots, y_n\}, \quad \mathbf{F} = \{y_2, y_3, \dots, y_n, f(x, \mathbf{y})\}$$

Równania wyższych rzędów sprowadza się do równania rzędu pierwszego

Przykład

Problem początkowy 2-go rzędu

$$Ay'' + By' + C = 0, \quad y(0) = y_0, \quad y'(0) = v_0$$

Dwa problemy początkowe 1-go rzędu

- $y' = z \quad y(0) = y_0,$
- $Az' + Bz + C = 0, \quad z(0) = v_0$

Metoda Eulera

$$y_{n+1} = y_n + hf_n$$

Metoda Runge-Kutty

wzór II rzędu

$$K_1 = hf(x_n, y_n)$$

$$K_2 = hf(x_n, y_n + K_1), \quad \text{lub w postaci} \quad K_2 = hf(x_n + h, y_n + K_1)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}(K_1 + K_2)$$

wzór IV rzędu

$$K_1 = hf(x_n, y_n)$$

$$K_2 = hf(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}K_1)$$

$$K_3 = hf(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}K_2)$$

$$K_4 = hf(x_n + h, y_n + K_3)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)$$

Metoda jest **jawna** (explicit, otwarta) jeżeli przy obliczeniu y_{n+1} wykorzystujemy poprzednie f_n

Niejawna (implicit, zamknięta) – przy wykorzystaniu f_{n+1}

Metoda **jednokrokowa** – zależy od jednego f_n

wielokrokowa – od wielu f_n, f_{n-1}, \dots

Przykład

$$\frac{dy}{dt} = -y^2 \quad y(0) = 1$$

R-K II:

$$K_1 = 0.1 \cdot (-1^2) = -0.1$$

$$y_1^0 = y_0 + K_1 = 1 - 0.1 = 0.9$$

$$K_2 = 0.1 \cdot (-0.9^2) = -0.081$$

$$y_1 = 1 + \frac{1}{2}(-0.1 - 0.081) = 0.9095$$

Rozwiązanie dokładne:

$$y_1 = 1 / (1 + 0.1) = 0.9090909$$

R-K IV:

$$K_1 = 0.1 \cdot (-1^2) = -0.1$$

$$y_1^0 = y_0 + 0.5K_1 = 1 - 0.05 = 0.95$$

$$K_2 = 0.1 \cdot (-0.95^2) = -0.09$$

$$y_1^1 = y_0 + 0.5K_2 = 0.955$$

$$K_3 = 0.1 \cdot (-0.955^2) = -0.091$$

$$y_1^2 = y_0 + K_3 = 0.909$$

$$K_4 = 0.1 \cdot (-0.909^2) = -0.083$$

$$y_1 = 1 + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) = 0.9090912$$

Metody wielokrokowe

Wzory Adamsa – Bashfortha (jawne, otwarte, explicit)

trzykrokowy:
$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12} [23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}]$$

Współczynniki wzorów explicit (*1/h)

n \ k	0	1	2	3
0	1	-	-	-
1	3/2	- 1/2	-	-
2	23/12	-16/12	5/12	-
3	55/24	-59/24	37/24	-9/24

Wzory Adamsa – Moultona (niejawne, zamknięte, implicit)

trzykrokowy:
$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12} (5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1})$$

Współczynniki wzorów implicit (*1/h)

n \ k	0	1	2	3
0	1	-	-	-
1	1/2	1/2	-	-
2	5/12	8/12	-1/12	-
3	9/24	19/24	-5/24	1/24

Metoda predyktor-korektor

Algorytm iteracyjny:

- **Wartości startowe** $y_1, y_2 \dots y_m$ znajdujemy metodą jednokrokową (Eulera, Runge-Kutta)
- Wstępnie **szacujemy** y_{m+1}^0 metodą wielokrokową *otwartą* (explicit) m -go rzędu
- Obliczamy $f_{m+1}^0 = f(x_{m+1}, y_{m+1}^0)$, następnie stosując metodę wielokrokową *zamkniętą* (implicit) m -go rzędu znajdujemy y_{m+1}^1
- Powtarzamy iteracje metodą zamkniętą aż do osiągnięcia żądanej dokładności $|y_{m+1}^k - y_{m+1}^{k-1}| / |y_{m+1}^k| < \varepsilon$ $y_{m+1}^k \approx y_{m+1}$

Wzory Adamsa predyktor – korektor

$$y_{n+1} = y_n + \Delta y_n$$

Rząd wzoru	Predyktor Δy_n	Korektor Δy_n
2	$\frac{h}{2}(3f_n - f_{n-1})$	$\frac{h}{2}(f_{n+1} + f_n)$
3	$\frac{h}{12}(23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2})$	$\frac{h}{12}(5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1})$
4	$\frac{h}{24}(55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3})$	$\frac{h}{24}(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2})$

Przykład

$$\frac{dy}{dt} = -y^2 \quad y(0) = 1$$

Rozwiązanie przybliżone:

$$y_{n+1} = y_n + h f_n$$

Krok $h = 0.1$

$$y_1 = 1 + 0.1(-1^2) = 0.9$$

$$y_2 = 0.9 + 0.1(-0.9^2) = 0.819$$

....

$$y_{10} = 0.4627810$$

Rozwiązanie przybliżone:

Krok $h = 0.05$

$$y_2 = 1 + 0.1(-1^2) = 0.905$$

$$y_4 = 0.9 + 0.1(-0.9^2) = 0.827$$

....

$$y_{20} = 0.4911049$$

Błąd: $\frac{0.4911049 - 0.4627810}{0.4911049} = 0.057674$

4. PODSTAWY METODY RÓŻNIC SKOŃCZONYCH

MRS jest ogólną metodą analizy numerycznej, którą stosujemy do rozwiązania problemów brzegowych.

Procedura postępowania w MRS:

1. Sformułowanie problemu brzegowego
2. Dyskretyzacja obszaru
3. Optymalny dobór gwiazd różnicowych
4. Generacja wzorów (operatorów) różnicowych
5. Generacja równań różnicowych
6. Dyskretyzacja różnicowa warunków brzegowych
7. Rozwiązanie układu równań różnicowych
8. Postprocessing

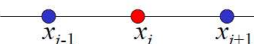
Sformułowanie problemu brzegowego

$$y'' = f(x, y, y'), \quad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta \quad \text{lub} \quad \begin{cases} y'(a) = \alpha, \\ y'(b) = \beta \end{cases}$$

Dyskretyzacja obszaru:

generacja siatki (zbioru węzłów);

Optymalny dobór gwiazd różnicowych

np. trzywęzłowa gwiazda 

Wzory (operatory) różnicowe

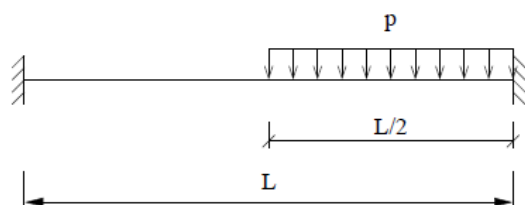
dla 3-ch węzłów $f'_i \approx \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}$ $f''_i \approx \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{h^2}$

dla 5-ciu węzłów $f' = [1 \ -8 \ 0 \ 8 \ -1] / (12h) * f$
 $f'' = [-1 \ 16 \ -30 \ 16 \ -1] / (12h^2) * f$
 $f''' = [-1 \ 2 \ 0 \ -2 \ 1] / (2h^3) * f$
 $f^{IV} = [1 \ -4 \ 6 \ -4 \ 1] / h^4 * f$

Przykład

Znaleźć ugięcia w belki jednoprzęsłowej

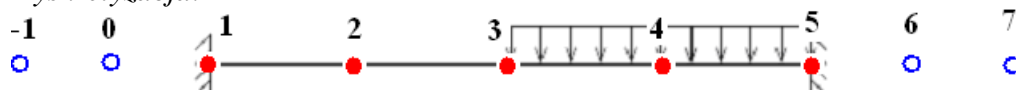
$$EI \frac{d^4 w}{dx^4} = p \quad \text{z odpowiednimi warunkami brzegowymi dla } p \in C^0(0, L) \text{ i } EI = \text{const}$$



$$EI = 1, \quad p = 10$$

warunki brzegowe: $u(0)=0; \quad u'(0)=0; \quad u(L)=0; \quad u'(L)=0;$

Dyskretyzacja:



5 węzłów podstawowych belki oraz po 2 węzły fikcyjne z każdej strony (ponieważ w war. brzegowych występują pochodne i chcemy zastosować 5-cio węzłowe wzory różnicowe)

Potrzebne w danym zadaniu 5-cio węzłowe wzory różnicowe (dla pierwszej i czwartej pochodnych)

$$y''''_i = \frac{y_{i-2} - 4y_{i-1} + 6y_i - 4y_{i+1} + y_{i+2}}{h^4}$$

$$y'_i = \frac{y_{i-2} - 8y_{i-1} + 8y_{i+1} - y_{i+2}}{12h}$$

Zapisujemy równania w *każdym węźle belki* (kollokacja):

1 węzeł ($x=0$)

1 war.brz. $u_1 = 0$

2 war.brz. $u'_1 = \frac{u_{-1} - 8u_0 + 8u_2 - u_3}{12h} = 0$

równ.głowne $u''''_1 = \frac{u_{-1} - 4u_0 + 6u_1 - 4u_2 + u_3}{h^4} = 0$ ($p=0$ w węźle1)

2 węzeł (równ.głowne)

$$u''''_2 = \frac{u_0 - 4u_1 + 6u_2 - 4u_3 + u_4}{h^4} = 0$$

3 węzeł (równ.głowne)

$$u''''_3 = \frac{u_1 - 4u_2 + 6u_3 - 4u_4 + u_5}{h^4} = 5 \quad (p = 10/2 \text{ w węźle3 na granicy obciążenia})$$

4 węzeł (równ.głowne)

$$u''''_4 = \frac{u_2 - 4u_3 + 6u_4 - 4u_5 + u_6}{h^4} = 10$$

5 węzeł ($x=L$)

równ.głowne $u''''_5 = \frac{u_3 - 4u_4 + 6u_5 - 4u_6 + u_7}{h^4} = 10$

3 war.brz. $u_5 = 0$

4 war.brz. $u'_5 = \frac{u_3 - 8u_4 + 8u_6 - u_7}{12h} = 0$

Rozwiązujemy uzyskany układ równań

$$\begin{matrix} \dots/12h \\ \dots/h^4 \\ \vdots \end{matrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -8 & 0 & 8 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -4 & 6 & -4 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -4 & 6 & -4 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -4 & 6 & -4 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -4 & 6 & -4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -4 & 6 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -8 & 0 & 8 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_{-1} \\ u_0 \\ u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \\ u_7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 5 \\ 10 \\ 10 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$