

SYMULACJE KOMPUTEROWE

Marian Soida
OA UJ

Literatura

- David Potter „Metody fizyki obliczeniowej”, PWN 1982 (wyd. II)
- Hy Trac, Ue-Li Pen „A Primer on Eulerian Computational Fluid Dynamics for Astrophysics”, 2003, PASP 115, 303
- R.J. LeVeque, D.Michalas, E.A.Dorfi, E.Müller „Computational Methods for Astrophysical Fluid Flow”, Saas-Fee Advanced Course 27, Springer 1998
- Janina i Michał Jankowscy „Przegląd metod i algorytmów numerycznych” Cz... I, WNT 1981
- Maksymilian Dryja, Janina i Michał Jankowscy „Przegląd metod i algorytmów numerycznych” Cz... II, WNT 1982
- W.H. Press, S.A. Teukolski, W.T. Vetterling, B.P. Flannery „Numerical Recipes in C – The Art of Scientific Computing” Cambridge University Press 1992 (wyd. 2)
- Ue-Li Pen, Phil Arras, Shing Kwong Wong „A Free, Fast, Simple, and Efficient Total Variation Diminishing Magnetohydrodynamic Code”, 2003, ApJSS 149,447
- ...

<http://www.oa.uj.edu.pl/~soida/wyklady/SymKom/SK.pdf>

rozgrzewka: jak policzyć różnicę kwadratów dwóch liczb ?

rozgrzewka: jak policzyć różnicę kwadratów dwóch liczb ?

można wprost

```
#include <stdio.h>
int main(){
    double a,b;
    scanf("%lf%lf",&a,&b);
    printf("%lf\n",a*a-b*b);
}
```

rozgrzewka: jak policzyć różnicę kwadratów dwóch liczb ?

można wprost

```
#include <stdio.h>

int main(){
    double a,b;
    scanf("%lf%lf",&a,&b);
    printf("%lf\n",a*a-b*b);
}
```

można też inaczej

```
#include <stdio.h>

int main(){
    double a,b;
    scanf("%lf%lf",&a,&b);
    printf("%lf\n",(a-b)*(a+b));
}
```

dlaczego aż taka różnica ?

- policzmy jak propagują się błędy zaokrągleń

$$(a-b)*(a+b)$$

$$(a - b)$$

dlaczego aż taka różnica ?

- policzmy jak propagują się błędy zaokrągleń

$$(a-b) \cdot (a+b)$$

$$(a - b)(1 + \epsilon_1) \cdot (a + b)$$

dlaczego aż taka różnica ?

- policzmy jak propagują się błędy zaokrągleń

$$(a-b) \cdot (a+b)$$

$$(a - b)(1 + \epsilon_1) \cdot (a + b)(1 + \epsilon_2)$$

dlaczego aż taka różnica ?

- policzmy jak propagują się błędy zaokrągleń

$$(a-b) \cdot (a+b)$$

$$(a - b)(1 + \epsilon_1) \cdot (a + b)(1 + \epsilon_2)(1 + \epsilon_3)$$

dlaczego aż taka różnica ?

- policzmy jak propagują się błędy zaokrągleń

$$(a-b) \cdot (a+b)$$

$$\begin{aligned}(a-b)(1+\epsilon_1) \cdot (a+b)(1+\epsilon_2)(1+\epsilon_3) &\simeq \\ &\simeq (a^2 - b^2)(1 + \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3)\end{aligned}$$

dlaczego aż taka różnica ?

- policzmy jak propagują się błędy zaokrągleń

$(a-b) \cdot (a+b)$

$$\begin{aligned}(a-b)(1+\epsilon_1) \cdot (a+b)(1+\epsilon_2)(1+\epsilon_3) &\simeq \\ &\simeq (a^2 - b^2)(1 + \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3)\end{aligned}$$

$a*a-b*b$

$$((a \cdot a) - (b \cdot b))$$

dlaczego aż taka różnica ?

- policzmy jak propagują się błędy zaokrągleń

$$(a-b) \cdot (a+b)$$

$$\begin{aligned}(a-b)(1+\epsilon_1) \cdot (a+b)(1+\epsilon_2)(1+\epsilon_3) &\simeq \\ &\simeq (a^2 - b^2)(1+\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3)\end{aligned}$$

$$a*a - b*b$$

$$((a \cdot a)(1+\epsilon_1) - (b \cdot b))$$

dlaczego aż taka różnica ?

- policzmy jak propagują się błędy zaokrągleń

(a-b)*(a+b)

$$\begin{aligned}(a - b)(1 + \epsilon_1) \cdot (a + b)(1 + \epsilon_2)(1 + \epsilon_3) &\simeq \\ &\simeq (a^2 - b^2)(1 + \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3)\end{aligned}$$

a*a-b*b

$$((a \cdot a)(1 + \epsilon_1) - (b \cdot b)(1 + \epsilon_2))$$

dlaczego aż taka różnica ?

- policzmy jak propagują się błędy zaokrągleń

(a-b)*(a+b)

$$\begin{aligned}(a - b)(1 + \epsilon_1) \cdot (a + b)(1 + \epsilon_2)(1 + \epsilon_3) &\simeq \\ &\simeq (a^2 - b^2)(1 + \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3)\end{aligned}$$

a*a-b*b

$$((a \cdot a)(1 + \epsilon_1) - (b \cdot b)(1 + \epsilon_2))(1 + \epsilon_3)$$

dlaczego aż taka różnica ?

- policzmy jak propagują się błędy zaokrągleń

(a-b)*(a+b)

$$\begin{aligned} (a - b)(1 + \epsilon_1) \cdot (a + b)(1 + \epsilon_2)(1 + \epsilon_3) &\simeq \\ &\simeq (a^2 - b^2)(1 + \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3) \end{aligned}$$

a*a-b*b

$$\begin{aligned} ((a \cdot a)(1 + \epsilon_1) - (b \cdot b)(1 + \epsilon_2))(1 + \epsilon_3) &= \\ = \left[(a^2 - b^2) + a^2\epsilon_1 - b^2\epsilon_2 \right] (1 + \epsilon_3) \end{aligned}$$

dlaczego aż taka różnica ?

- policzmy jak propagują się błędy zaokrągleń

(a-b)*(a+b)

$$\begin{aligned}(a - b)(1 + \epsilon_1) \cdot (a + b)(1 + \epsilon_2)(1 + \epsilon_3) &\simeq \\ &\simeq (a^2 - b^2)(1 + \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3)\end{aligned}$$

a*a-b*b

$$\begin{aligned}((a \cdot a)(1 + \epsilon_1) - (b \cdot b)(1 + \epsilon_2))(1 + \epsilon_3) &= \\ = \left[(a^2 - b^2) + a^2\epsilon_1 - b^2\epsilon_2 \right] (1 + \epsilon_3) &= \\ = (a^2 - b^2) \left(1 + \frac{a^2\epsilon_1 - b^2\epsilon_2}{a^2 - b^2} \right) (1 + \epsilon_3)\end{aligned}$$

dlaczego aż taka różnica ?

- policzmy jak propagują się błędy zaokrągleń

(a-b)*(a+b)

$$\begin{aligned} (a-b)(1+\epsilon_1) \cdot (a+b)(1+\epsilon_2)(1+\epsilon_3) &\simeq \\ &\simeq (a^2 - b^2)(1 + \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3) \end{aligned}$$

a*a-b*b

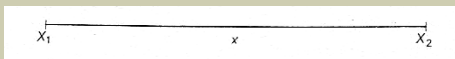
$$\begin{aligned} ((a \cdot a)(1+\epsilon_1) - (b \cdot b)(1+\epsilon_2))(1+\epsilon_3) &= \\ = \left[(a^2 - b^2) + a^2\epsilon_1 - b^2\epsilon_2 \right] (1+\epsilon_3) &= \\ = (a^2 - b^2) \left(1 + \frac{a^2\epsilon_1 - b^2\epsilon_2}{a^2 - b^2} \right) (1+\epsilon_3) &\simeq \\ \simeq (a^2 - b^2) \left(1 + \frac{a^2\epsilon_1 - b^2\epsilon_2}{a^2 - b^2} + \epsilon_3 \right) \end{aligned}$$

Reprezentacja dyskretna zmiennej ciągłej

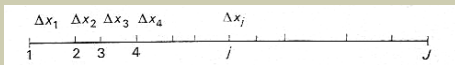
ciągłą zmienną x określoną w obszarze X

$$X = [X_1, X_2]$$

$$X_1 \leq x \leq X_2$$



zastępujemy *siatką* punktów, dzieląc X na $J - 1$ elementów Δx_j .



i definiujemy wektor $\{x_j\}$

$$x_j = X_1 + \sum_{\nu=1}^{j-1} \Delta x_{\nu} \quad (1)$$

definiując ciągłą zmienną x jedynie w *węzłach siatki* j

Reprezentacja dyskretna zmiennej ciągłej

funkcję ciągłą $f(x)$ przybliżamy wektorem $\{f_j\}$ na siatce punktów $\{x_j\}$

$$f_j = f(x_j) \quad (2)$$

funkcję f możemy przybliżyć za pomocą reprezentacji $\{f_j\}$ w dowolnym punkcie $x_j \leq x \leq x_{j+1}$

$$f^*(x) = \varepsilon f_{j+1} + (1 - \varepsilon) f_j \quad (3)$$

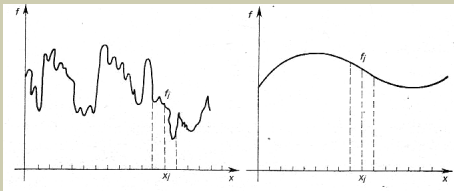
gdzie

$$\varepsilon = \frac{x - x_j}{x_{j+1} - x_j} \quad (4)$$

w pierwszym rzędzie interpolacji.

Uwagi:

- aproksymacja f^* opisuje jedynie „długofalowe” własności funkcji f
- im więcej punktów siatki tym lepsza ta aproksymacja



Analiza Fourierowska

Ilościowo pojęcie „dobroci” aproksymacji określa się stosując technikę analizy fourierowskiej

ciągłą funkcję $f(x)$ można rozłożyć na szereg Fouriera

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \hat{g}_k e^{i2\pi kx/X} \quad (5)$$

gdzie

$$\hat{g}_k = \frac{1}{X} \int_X f(x) e^{-i2\pi kx/X} dx \quad (6)$$

$\hat{g}_k$ to tzw. amplituda modu Fouriera o długości fali X/k

Analiza Fourierowska

dla reprezentacji dyskretnej

$$f_j = \sum_{k=1}^J \hat{g}_k e^{i2\pi k j / J} \quad (7)$$

gdzie amplitudy składowych

$$\hat{g}_k = \frac{1}{J} \sum_{j=1}^J f_j e^{-i2\pi k j / J} \quad (8)$$

bo mody Fouriera tworzą układ ortogonalny

$$\sum_{j=1}^J e^{i2\pi k j / J} \times e^{-i2\pi k' j / J} = J \delta_{kk'} \quad (9)$$

Uwagi:

- reprezentacja $\{f_j\}$ opisuje jedynie skończony zbiór długości fal
- istnieje graniczna długość fali (Δ) poniżej której żadne efekty nie dają się opisać
- reprezentacja $\{f_j\}$ stanowi „długofalowe” przybliżenie funkcji $f(x)$

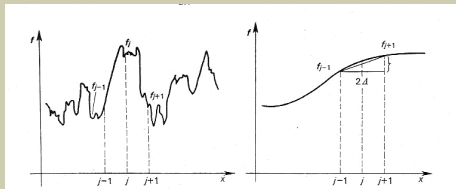
Pochodne różnicowe w przestrzeni

Pochodna df/dx informuje o zmienności funkcji w punkcie, pochodna różnicowa musi więc wiązać ze sobą sąsiednie węzły siatki.

Niech aproksymacją pierwszej pochodnej w węźle j siatki będzie

$$\Delta'_x f_j = \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2\Delta} \quad (10)$$

oczacujemy jakość tej aproksymacji.



Pochodna różnicowa pierwszego rzędu

Dla modu fourierowskiego

$$u = ge^{ikx} \quad (11)$$

pochodna ma postać

$$\frac{du}{dx} = ikge^{ikx} = iku \quad (12)$$

zaś pochodna różnicowa

$$\Delta'_x u = \frac{ge^{ikx_{j+1}} - ge^{ikx_{j-1}}}{2\Delta} \quad (13)$$

ale $x_{j+1} = x_j + \Delta$ i $x_{j-1} = x_j - \Delta$ więc

$$\Delta'_x u = \frac{g}{2\Delta} \left(e^{ik(x_j+\Delta)} - e^{ik(x_j-\Delta)} \right) = \frac{g}{\Delta} e^{ikx_j} \frac{1}{2} \left(e^{ik\Delta} - e^{-ik\Delta} \right) \quad (14)$$

a zatem

$$\Delta'_x u = \frac{iu}{\Delta} \sin k\Delta \quad (15)$$

Pochodna różnicowa pierwszego rzędu

dla małych $k\Delta$ jest to dobre przybliżenie, ponieważ

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{\sin k\Delta}{\Delta} = k \quad (16)$$

jeśli rozwiniemy ten wynik dla małych $k\Delta$

$$\Delta'_x u = \frac{iu}{\Delta} \left(k\Delta - \frac{(k\Delta)^3}{6} + O(k^5 \Delta^5) \right) = iuk \left(1 - \frac{k^2 \Delta^2}{6} + O(k^4 \Delta^4) \right) \quad (17)$$

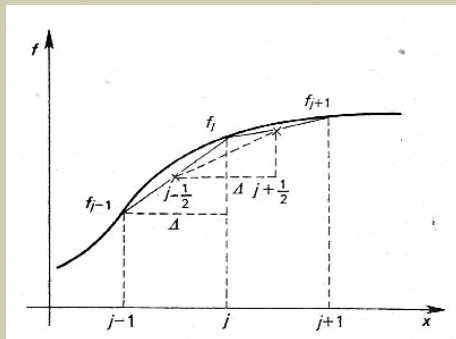
i ostatecznie

$$\Delta'_x = \left(1 - \frac{k^2 \Delta^2}{6} + O(k^4 \Delta^4) \right) \frac{d}{dx} \quad (18)$$

- operator różnicowy działa z dokładnością do wyrazów drugiego rzędu względem $k\Delta$

Pochodna różnicowa drugiego rzędu

Dla drugiej pochodnej prostą aproksymacją może być



$$\Delta_x'' f_j = \frac{f_{i+1} - 2f_j + f_{i-1}}{\Delta^2} \quad (19)$$

Pochodna różnicowa drugiego rzędu

i analogicznie dla modu Fouriera ge^{ikx}

$$\frac{d^2 u}{dx^2} = \frac{d^2}{dx^2} (ge^{ikx}) = -gk^2 e^{ikx} = -k^2 u \quad (20)$$

i dla operatora różnicowego drugiego rzędu

$$\Delta_x'' u = \frac{g}{\Delta^2} \left(e^{ik(x_j + \Delta)} - 2e^{ikx_j} + e^{ik(x_j - \Delta)} \right) \quad (21)$$

$$\Delta_x'' u = \frac{2ge^{ikx_j}}{\Delta^2} \left(\frac{1}{2}e^{ik\Delta} + \frac{1}{2}e^{-ik\Delta} - 1 \right) = \frac{2u}{\Delta^2} (\cos k\Delta - 1) \quad (22)$$

Pochodna różnicowa drugiego stopnia

i rozwijając dla małych $k\Delta$

$$\Delta_x'' u = \frac{2u}{\Delta^2} \left(1 - \frac{k^2 \Delta^2}{2} + \frac{k^4 \Delta^4}{24} - 1 + O(k^6 \Delta^6) \right) \quad (23)$$

$$\Delta_x'' u = -k^2 u \left(1 - \frac{k^2 \Delta^2}{12} + O(k^4 \Delta^4) \right) \quad (24)$$

i ostatecznie

$$\Delta_x'' = \left(1 - \frac{k^2 \Delta^2}{12} + O(k^4 \Delta^4) \right) \frac{d^2}{dx^2} \quad (25)$$

- operator drugich różnic jest dokładny do drugiego rzędu względem $k\Delta$

Ogólne sformułowanie zagadnienia początkowego

Z zagadnieniem początkowym mamy do czynienia tam, gdzie

- układ jest określony przez wektor stanu $u(r, t)$ w obszarze przestrzeni $R = R(r)$
- znamy *warunki początkowe* $u = u^0$ w chwili $t = 0$
- u jest określone na powierzchni S w R dla wszystkich czasów t

Stan układu dla wszystkich czasów t możemy otrzymać w postaci rozwiązania zagadnienia początkowego

$$\frac{du}{dt} = Lu \quad (26)$$

gdzie L jest nieliniowym operatorem

- algebraicznym – dla równań różniczkowych zwyczajnych
- przestrzennym – dla równań różniczkowych cząstkowych

Przykłady:

jednowymiarowy oscylator harmoniczny

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{k}{m}x \quad (27)$$

możemy zapisać jako układ równań pierwszego rzędu

$$\frac{dx}{dt} = v \quad (28)$$

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{k}{m}x \quad (29)$$

w naszej notacji zapiszemy to tak

$$u(t) = (x, v) \quad (30)$$

oraz

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{k}{m} & 0 \end{pmatrix} \quad (31)$$

warunek brzegowy (początkowy) domyka problem

$$u(t=0) = (x_0, v_0) \quad (32)$$

Przykłady:

przewodnictwo ciepła w jednowymiarowym pręcie

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \kappa \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad (33)$$

i po „naszemu”

$$u(x, t) = T \quad (34)$$

oraz

$$L = \frac{\partial}{\partial x} \kappa \frac{\partial}{\partial x} \quad (35)$$

i warunki brzegowe i początkowe

$$u(x = x_L, t) = T_L(t) \quad (36)$$

$$u(x = x_R, t) = T_R(t) \quad (37)$$

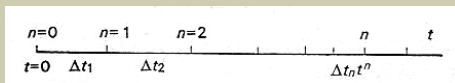
$$u(x, t = 0) = T_0(x) \quad (38)$$

Ogólne sformułowanie zagadnienia początkowego

Wróćmy do ogólnego zagadnienia

$$\frac{du}{dt} = Lu \quad (39)$$

Całkujemy je krok po kroku w czasie (na siatce czasowej)



$$t^n = \sum_{\nu=0}^n \Delta t_{\nu} \quad (40)$$

całkując wiążemy wartości wektora u w kolejnych krokach czasowych

$$u^{n+1} = u^n + \int_{t^n}^{t^{n+1}} Lu \, dt' \quad (41)$$

Ogólne sformułowanie zagadnienia początkowego

wyrażenie pod całką z prawej strony możemy rozwinąć

$$u^{n+1} = u^n + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left\{ \sum_{r=0}^{p-1} \left[\frac{d^r}{dt^r} (Lu) \right]_{t^n} \frac{t'^r}{r!} + O(t'^p) \right\} dt' \quad (42)$$

i scałkować wyraz po wyrazie

$$u^{n+1} = u^n + \sum_{r=1}^p \left[\frac{d^{r-1}}{dt^{r-1}} (Lu) \right]_{t^n} \frac{(\Delta t)^r}{r!} + O((\Delta t)^{p+1}) \quad (43)$$

ograniczmy się do wyrazów drugiego rzędu

$$u^{n+1} = u^n + Lu^n \Delta t + \left[\frac{d}{dt} (Lu) \right]_{t^n} \frac{(\Delta t)^2}{2} \quad (44)$$

pozostaje obliczyć pochodną po prawej stronie

Ogólne sformułowanie zagadnienia początkowego

$$u^{n+1} = u^n + Lu^n(1 - \varepsilon)\Delta t + Lu^{n+1}\varepsilon\Delta t \quad (45)$$

ogólnie $0 \leq \varepsilon \leq 1$ a dokładność drugiego rzędu utrzymujemy gdy $\varepsilon = \frac{1}{2}$
dla $\varepsilon = 0$ mówimy o metodzie *jawnej*

$$u^{n+1} = (I + \Delta t L)u^n \quad (46)$$

oraz dla $\varepsilon \neq 0$ o metodzie *niejawnej*

$$(I - \varepsilon\Delta t L)u^{n+1} = (I + (1 - \varepsilon)\Delta t L)u^n \quad (47)$$

i w końcu

$$u^{n+1} = (I - \varepsilon\Delta t L)^{-1}(I + (1 - \varepsilon)\Delta t L)u^n \quad (48)$$

lub

$$u^{n+1} = T(\Delta t, \Delta)u^n \quad (49)$$

Wymagania stawiane różnicowemu rozwiązaniu zagadnienia początkowego

Zgodność aproksymacji różnicowej

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{T(\Delta t, \Delta) - I}{\Delta t} = L \quad (50)$$

przy zachowanym skończonym $\Delta t / \Delta$

Dokładność aproksymacji różnicowej

- błąd obcięcia
- błąd reprezentacji (zaokrąglenia)

Efektywność schematu różnicowego

Stabilność schematu różnicowego

w najprostszym przypadku gdy u jest wielkością skalarną, błąd na kroku n niech wynosi ε^n , w kolejnym kroku

$$\varepsilon^{n+1} = g\varepsilon^n \quad (51)$$

warunek stabilności wymaga, żeby $|\varepsilon^{n+1}| \leq |\varepsilon^n|$ czyli

$$|g| \leq 1 \quad (52)$$

Uwaga:

w niektórych sytuacjach (rozwiązania szybko rosnące) można dopuścić złamanie tego warunku

Stabilność schematu różnicowego

Dla układu N równań różniczkowych należy zdefiniować wektor błędu ϵ^n i macierz wzmocnienia G

$$\epsilon^{n+1} = G\epsilon^n \quad (53)$$

związaną z operatorem całkowym $T(\Delta t, \Delta)$

$$u^{n+1} + \epsilon^{n+1} = T(u^n + \epsilon^n) \quad (54)$$

gdy T jest operatorem liniowym to $T = G$
ogólnie (dla małych błędów) możemy zlinearyzować

$$T(u^n + \epsilon^n) = Tu^n + \left\{ \frac{\partial}{\partial u}(Tu) \right\}_n \epsilon^n \quad (55)$$

odejmując rozwiązanie „dokładne” $u^{n+1} = Tu^n$

$$\epsilon^{n+1} = \left\{ \frac{\partial}{\partial u}(Tu) \right\}_n \epsilon^n \quad (56)$$

Stabilność schematu różnicowego

i macierz wzmocnienia

$$G_{\mu\nu} = \frac{\partial u_{\mu}^{n+1}}{\partial u_{\nu}^n} \quad (57)$$

warunek stabilności sprowadza się do żądania

$$|\epsilon_{\mu}^{n+1}| \leq |\epsilon_{\mu}^n| \quad (58)$$

czyli aby wartości własne macierzy wzmocnienia $|g_{\mu}| \leq 1$

Całkowanie równań różniczkowych zwyczajnych

Rozważmy równanie różniczkowe zwyczajne

$$\frac{du}{dt} + f(u, t) = 0 \quad (59)$$

gdzie $u = u(t)$, oraz warunki początkowe

$$u(t^0) = u^0 \quad (60)$$

równanie to można scałkować na siatce czasowej

$$u^{n+1} = u^n - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u, t) dt \quad (61)$$

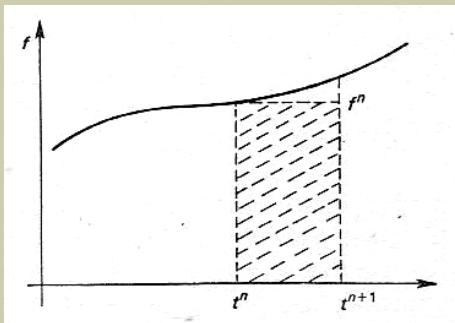
w przedziale czasu $\Delta t = t^{n+1} - t^n$

różne metody (schematy całkowania) różnie obliczają tę całkę

Metoda Eulera pierwszego rzędu

metoda jawna, pierwszego rzędu, prosta i efektywna

$$u^{n+1} = u^n - f(u^n, t^n) \Delta t \quad (62)$$



schemat Eulera

równanie rozpadu

$$\frac{dm}{dt} = -\frac{m}{\tau}$$

schemat całkowania

$$m^{n+1} = m^n - \frac{m^n}{\tau} \Delta t$$

warunek początkowy

$$m^0 = m_0$$

schemat Eulera

równanie oscylatora

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= v \\ \frac{dv}{dt} &= -\omega^2 x\end{aligned}$$

schemat całkowania

$$\begin{aligned}x^{n+1} &= x^n + v^n \Delta t \\ v^{n+1} &= v^n - \omega^2 x^n \Delta t\end{aligned}$$

przykładowy warunek początkowy

$$x^0 = 1, \quad v^0 = 0$$

co ze stabilnością

zakładamy, że u^n jest obarczone błędem ε^n i liczymy błąd u^{n+1}

$$u^{n+1} + \varepsilon^{n+1} = u^n + \varepsilon^n - f((u^n + \varepsilon^n), t^n) \Delta t \quad (63)$$

dla małego ε^n rozwijamy funkcję f wokół u^n

$$f(u^n + \varepsilon^n, t^n) = f(u^n, t^n) + \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n \varepsilon^n + O(\varepsilon^n) \quad (64)$$

stąd

$$\varepsilon^{n+1} = \varepsilon^n - \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n \Delta t \varepsilon^n + O(\varepsilon^n) \quad (65)$$

i współczynnik wzmocnienia dla schematu Eulera

$$g = 1 - \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n \Delta t \quad (66)$$

i pamiętamy warunek stabilności $|g| \leq 1$

Przypadek I: równanie typu rozpadu – $\partial f / \partial u > 0$

$$\frac{du}{dt} + \frac{u}{\tau} = 0 \quad (67)$$

gdzie $\tau > 0$ i warunek początkowy $u(0) = 1$
rozwiązanie analityczne znamy

$$u = e^{-t/\tau} \quad (68)$$

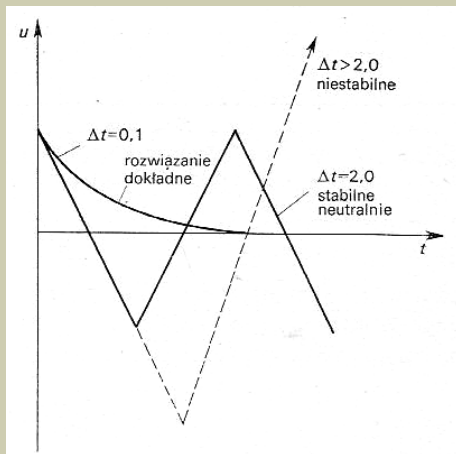
ponieważ $\partial f / \partial u = 1/\tau$ to warunek stabilności

$$|g| = \left| 1 - \frac{\partial f}{\partial u} \Delta t \right| \leq 1 \quad (69)$$

$$\Delta t \leq 2\tau \quad (70)$$

Przypadek I: równanie typu rozpadu – $\partial f / \partial u > 0$

wyniki dla różnych Δt



Przypadek II: równanie typu oscylatora ($\partial f / \partial u$ jest urojone)

równanie

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \omega^2 x = 0 \quad (71)$$

można rozpisać

$$\frac{dx}{dt} - \omega v = 0 \quad (72)$$

$$\frac{dv}{dt} + \omega x = 0 \quad (73)$$

lub oznaczając $u = x + iv$

$$\frac{du}{dt} + i\omega u = 0 \quad (74)$$

współczynnik wzmocnienia $g = 1 - i\omega\Delta t$ i warunek stabilności

$$|g|^2 = 1 + \left| \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n^2 (\Delta t)^2 \leq 1 \quad (75)$$

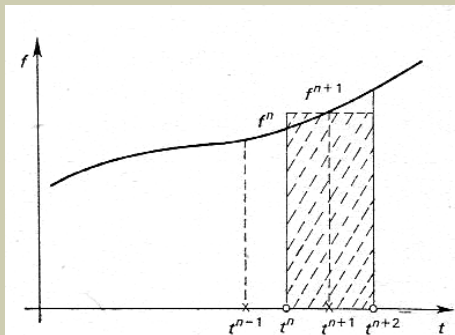
dla każdego Δt NIE JEST spełniony!

Uwaga:

zwykle (gdy $\partial f / \partial u$ zależy od u) krok Δt dobiera się na każdym kroku, żeby spełnić warunek stabilności.

Metoda skokowa

metoda „centruje” w czasie całkowanie, uzyskując dokładność drugiego rzędu



$$u^{n+1} = u^{n-1} - f(u^n, t^n) 2\Delta t \quad (76)$$

$$u^{n+2} = u^n - f(u^{n+1}, t^{n+1}) 2\Delta t \quad (77)$$

Metoda skokowa

ale

- potrzebne są warunki początkowe $u^0 = u(0)$ oraz $u^1 = u(\Delta t)$
- problemy w przypadkach nieliniowych (ze zmiennym krokiem całkowania)

Metoda skokowa

stabilność liczymy analogicznie (powiązane są ze sobą błędy na trzech kolejnych krokach)

$$\varepsilon^{n+1} = \varepsilon^{n-1} - \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n 2\Delta t \varepsilon^n \quad (78)$$

a stąd

$$g^2 = 1 - \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n 2\Delta t g \quad (79)$$

i podstawiając $\alpha = \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n \Delta t$

$$g = -\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 1} \quad (80)$$

i warunek stabilności jest spełniony (marginalnie – $|g| = 1$) tylko dla urojonego $\alpha = i\beta$ gdy $\beta \leq 1$

dla równania oscylatora $\beta = \omega \Delta t \leq 1$ czyli

$$\Delta t \leq \frac{1}{\omega} \quad (81)$$

stabilność schematu skokowego

Warto przeanalizować zachowanie się schematu skokowego na przykładzie równania typu rozpadu $du/dt + u/\tau = 0$ oznaczając zmienną u w parzystych punktach siatki czasowej jako ξ , a w nieparzystych jako ζ , wtedy

$$\xi^{2n} = \xi^{2n-2} - \zeta^{2n-1} \frac{2\Delta t}{\tau} \quad (82)$$

$$\zeta^{2n+1} = \zeta^{2n-1} - \xi^{2n} \frac{2\Delta t}{\tau} \quad (83)$$

równania te odpowiadają równaniom różniczkowym

$$\frac{d\xi}{dt} + \frac{\zeta}{\tau} = 0 \quad (84)$$

$$\frac{d\zeta}{dt} + \frac{\xi}{\tau} = 0 \quad (85)$$

odejmując i dodając te równania stronami, otrzymujemy

stabilność schematu skokowego

$$\frac{d(\xi + \zeta)}{dt} + \frac{(\xi + \zeta)}{\tau} = 0 \quad (86)$$

$$\frac{d(\xi - \zeta)}{dt} - \frac{(\xi - \zeta)}{\tau} = 0 \quad (87)$$

pierwsze z rozwiązań to to o co nam chodzi, a to drugie – to rozwiązanie „numeryczne” (ekspandujące od wartości $u^0 - u^1$)

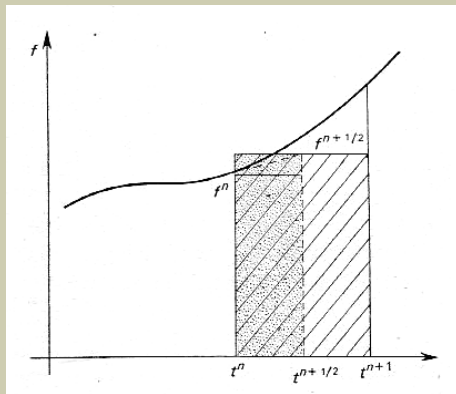
Jawna metoda dwustopniowa

wstępny etap wylicza wartość u w pośrednim czasie $t^{n+1/2}$

$$u^{n+1/2} = u^n - f(u^n, t^n) \frac{\Delta t}{2} \quad (88)$$

etap główny

$$u^{n+1} = u^n - f(u^{n+1/2}, t^{n+1/2}) \Delta t \quad (89)$$



Jawna metoda dwustopniowa

analiza stabilności daje

$$\varepsilon^{n+1} = \varepsilon^n - \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n \Delta t \left\{ 1 - \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n \frac{\Delta t}{2} \right\} \varepsilon^n \quad (90)$$

i współczynnik wzmocnienia

$$g = 1 - \alpha + \frac{1}{2}\alpha^2 \quad (91)$$

gdzie (jak zwykle) $\alpha = \left. \partial f / \partial u \right|_n \Delta t$

dla $\partial f / \partial u > 0$ stabilna dla małych kroków czasowych

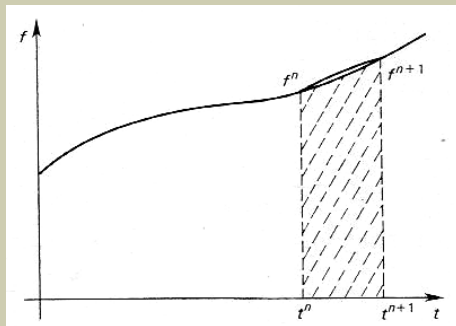
$$\Delta t \leq \frac{2}{\left. \partial f / \partial u \right|_n} \quad (92)$$

i marginalnie niestabilna dla α urojonego

Metoda niejawna drugiego rzędu

całkę z prawej strony (61) liczy się jako średnią (w czasie) funkcji f pomiędzy t^n a t^{n+1}

$$u^{n+1} = u^n - \left[f(u^n, t^n) + f(u^{n+1}, t^{n+1}) \right] \frac{\Delta t}{2} \quad (93)$$



Metoda niejawna drugiego rzędu

i współczynnik wzmocnienia

$$g = 1 - \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_n \frac{\Delta t}{2} - \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_{n+1} \frac{\Delta t}{2} g \quad (94)$$

czyli

$$g = \frac{1 - \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_n \frac{\Delta t}{2}}{1 + \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_{n+1} \frac{\Delta t}{2}} \quad (95)$$

lub jak zwykle podstawiając $\alpha = \partial f / \partial u|_n \Delta t$

$$g = \frac{1 - \alpha/2}{1 + \alpha/2} \quad (96)$$

stabilna dla dowolnego $\alpha \geq 0$ lub urojonego

Metoda Adamsa-Bashfortha

$$u^{n+1} = u^n - \frac{1}{2} \left[3f(u^n, t^n) - f(u^{n-1}, t^{n-1}) \right] \Delta t \quad (97)$$

jej współczynnik wzmocnienia

$$g = \frac{1}{2} - \frac{3}{4}\alpha \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{9}{4}\alpha^2 - \alpha + 1} \quad (98)$$

stabilna dla $\Delta t \leq 1/(\partial f/\partial u)|_n$ marginalnie niestabilna dla α urojonego

schemat niejawny

równanie oscylatora

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \omega v \\ \frac{dv}{dt} &= -\omega x\end{aligned}$$

schemat niejawny

równanie oscylatora

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \omega v \\ \frac{dv}{dt} &= -\omega x\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}x^{n+1} &= x^n + \frac{\omega \Delta t}{2}(v^n + v^{n+1}) \\ v^{n+1} &= v^n - \frac{\omega \Delta t}{2}(x^n + x^{n+1})\end{aligned}$$

schemat niejawny

równanie oscylatora

$$\frac{dx}{dt} = \omega v$$

$$\frac{dv}{dt} = -\omega x$$

$$x^{n+1} = x^n + \frac{\omega \Delta t}{2}(v^n + v^{n+1})$$

$$v^{n+1} = v^n - \frac{\omega \Delta t}{2}(x^n + x^{n+1})$$

$$x^{n+1} - \frac{\omega \Delta t}{2}v^{n+1} = x^n + \frac{\omega \Delta t}{2}v^n \quad | \times \frac{\omega \Delta t}{2} -$$

$$\frac{\omega \Delta t}{2}x^{n+1} + v^{n+1} = -\frac{\omega \Delta t}{2}x^n + v^n \quad | \times \frac{\omega \Delta t}{2} +$$

schemat niejawny

$$\begin{aligned}
 x^{n+1} - \frac{\omega \Delta t}{2} v^{n+1} &= +x^n + \frac{\omega \Delta t}{2} v^n & | \times \frac{\omega \Delta t}{2} &- \\
 \frac{\omega \Delta t}{2} x^{n+1} + v^{n+1} &= -\frac{\omega \Delta t}{2} x^n + v^n & | \times \frac{\omega \Delta t}{2} &+
 \end{aligned}$$

schemat niejawny

$$\begin{aligned}
 x^{n+1} - \frac{\omega \Delta t}{2} v^{n+1} &= +x^n + \frac{\omega \Delta t}{2} v^n \quad | \times \frac{\omega \Delta t}{2} - \\
 \frac{\omega \Delta t}{2} x^{n+1} + v^{n+1} &= -\frac{\omega \Delta t}{2} x^n + v^n \quad | \times \frac{\omega \Delta t}{2} +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 x^{n+1} \left(1 + \frac{\omega^2 \Delta t^2}{4} \right) &= x^n \left(1 - \frac{\omega^2 \Delta t^2}{4} \right) + v^n \omega \Delta t \\
 v^{n+1} \left(1 + \frac{\omega^2 \Delta t^2}{4} \right) &= v^n \left(1 - \frac{\omega^2 \Delta t^2}{4} \right) - x^n \omega \Delta t
 \end{aligned}$$

schemat niejawny

$$\begin{aligned}x^{n+1} \left(1 + \frac{\omega^2 \Delta t^2}{4} \right) &= x^n \left(1 - \frac{\omega^2 \Delta t^2}{4} \right) + v^n \omega \Delta t \\v^{n+1} \left(1 + \frac{\omega^2 \Delta t^2}{4} \right) &= v^n \left(1 - \frac{\omega^2 \Delta t^2}{4} \right) - x^n \omega \Delta t\end{aligned}$$

schemat niejawny

$$\begin{aligned}
 x^{n+1} \left(1 + \frac{\omega^2 \Delta t^2}{4} \right) &= x^n \left(1 - \frac{\omega^2 \Delta t^2}{4} \right) + v^n \omega \Delta t \\
 v^{n+1} \left(1 + \frac{\omega^2 \Delta t^2}{4} \right) &= v^n \left(1 - \frac{\omega^2 \Delta t^2}{4} \right) - x^n \omega \Delta t
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 x^{n+1} &= \frac{x^n \left(1 - \frac{\omega^2 \Delta t^2}{4} \right) + v^n \omega \Delta t}{1 + \frac{\omega^2 \Delta t^2}{4}} \\
 v^{n+1} &= \frac{v^n \left(1 - \frac{\omega^2 \Delta t^2}{4} \right) - x^n \omega \Delta t}{1 + \frac{\omega^2 \Delta t^2}{4}}
 \end{aligned}$$

Metody Rungego-Kutty

ogólnie, to rodzina schematów całkowania

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \sum_{i=1}^r c_i k_i(u^n, t^n, \Delta t) \quad (99)$$

$$k_i = f \left(u^n + \Delta t \sum_{j=1}^r b_{ij} k_j, t^n + \Delta t \sum_{j=1}^r b_{ij} \right) \quad (100)$$

jeśli $b_{ij} = 0$ dla $j \geq i$ to nazywa się metodą *otwartą* i jej rząd wynosi maksymalnie r

w przypadku przeciwnym – metoda *zamknięta* – rząd maksymalnie $2r$

Metody Rungego-Kutty

najczęściej używana jest RK4 (czwartego rzędu)

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (101)$$

$$k_1 = f(u^n, t^n) \quad (102)$$

$$k_2 = f\left(u^n + \frac{1}{2}k_1\Delta t, t^n + \frac{1}{2}\Delta t\right) \quad (103)$$

$$k_3 = f\left(u^n + \frac{1}{2}k_2\Delta t, t^n + \frac{1}{2}\Delta t\right) \quad (104)$$

$$k_4 = f(u^n + k_3\Delta t, t^n + \Delta t) \quad (105)$$

współczynnik wzmocnienia $g = 1 - \alpha + \frac{1}{2}\alpha^2 - \frac{1}{6}\alpha^3 + \frac{1}{24}\alpha^4$
 stabilna dla $\Delta t \leq 2.8/(\partial f/\partial u)|_n$ dla obu typów równań

schemat RK4

równanie rozpadu

$$\frac{dm}{dt} = -\frac{m}{\tau}$$

schemat RK4

równanie rozpadu

$$\frac{dm}{dt} = -\frac{m}{\tau}$$

$$m^{n+1} = m^n + \frac{\Delta t}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

$$k_1 = -m^n/\tau$$

$$k_2 = -(m^n + k_1 \frac{\Delta t}{2})/\tau$$

$$k_3 = -(m^n + k_2 \frac{\Delta t}{2})/\tau$$

$$k_4 = -(m^n + k_3 \Delta t)/\tau$$

schemat RK4

równanie oscylatora

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \omega v \\ \frac{dv}{dt} &= -\omega x\end{aligned}$$

schemat RK4

równanie oscylatora

$$\frac{dx}{dt} = \omega v$$

$$\frac{dv}{dt} = -\omega x$$

x^{n+1}	$=$	$x^n + \frac{\Delta t}{6}(k_{x_1} + 2k_{x_2} + 2k_{x_3} + k_{x_4})$	v^{n+1}	$=$	$v^n + \frac{\Delta t}{6}(k_{v_1} + 2k_{v_2} + 2k_{v_3} + k_{v_4})$
k_{x_1}	$=$	ωv^n	k_{v_1}	$=$	$-\omega x^n$
k_{x_2}	$=$	$\omega(v^n + k_{v_1} \frac{\Delta t}{2})$	k_{v_2}	$=$	$-\omega(x^n + k_{x_1} \frac{\Delta t}{2})$
k_{x_3}	$=$	$\omega(v^n + k_{v_2} \frac{\Delta t}{2})$	k_{v_3}	$=$	$-\omega(x^n + k_{x_2} \frac{\Delta t}{2})$
k_{x_4}	$=$	$\omega(v^n + k_{v_3} \Delta t)$	k_{v_4}	$=$	$-\omega(x^n + k_{x_3} \Delta t)$

schemat RK4

ruch masy w polu grawitacyjnym

$$\frac{dx}{dt} = v_x$$

$$\frac{dy}{dt} = v_y$$

$$\frac{dv_x}{dt} = -GM \frac{x}{r^3}$$

$$\frac{dv_y}{dt} = -GM \frac{y}{r^3}$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

schemat RK4

ruch masy w polu grawitacyjnym

$$\frac{dx}{dt} = v_x$$

$$\frac{dy}{dt} = v_y$$

$$\frac{dv_x}{dt} = -GM \frac{x}{r^3}$$

$$\frac{dv_y}{dt} = -GM \frac{y}{r^3}$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

$$x^{n+1} = x^n + \frac{\Delta t}{6}(k_{x1} + 2k_{x2} + 2k_{x3} + k_{x4})$$

$$k_{x1} = v_x^n$$

$$k_{x2} = v_x^n + k_{v_{x1}} \frac{\Delta t}{2}$$

$$k_{x3} = v_x^n + k_{v_{x2}} \frac{\Delta t}{2}$$

$$k_{x4} = v_x^n + k_{v_{x3}} \Delta t$$

$$v_x^{n+1} = v_x^n + \frac{\Delta t}{6}(k_{v_{x1}} + 2k_{v_{x2}} + 2k_{v_{x3}} + k_{v_{x4}})$$

$$k_{v_{x1}} = -GM x^n / r_1^3$$

$$k_{v_{x2}} = -GM(x^n + k_{x1} \frac{\Delta t}{2}) / r_2^3$$

$$k_{v_{x3}} = -GM(x^n + k_{x2} \frac{\Delta t}{2}) / r_3^3$$

$$k_{v_{x4}} = -GM(x^n + k_{x3} \Delta t) / r_4^3$$

zachowanie energii

energia w objętości V

$$\iiint_V \varepsilon(x, t) dV \quad (106)$$

strumień przez powierzchnię S

$$\oiint_S q \cdot dS \quad (107)$$

zmiana energii w objętości V równa jest strumieniowi energii wpływającej do tej objętości (przepływającemu przez S)

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \varepsilon(x, t) dV = - \oiint_S q \cdot dS \quad (108)$$

całkę po prawej możemy zastąpić

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \varepsilon(x, t) dV = - \iiint_V \nabla q \cdot dV \quad (109)$$

przenieść na lewą stronę

zachowanie energii

$$\iiint_V \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot q \right) dV = 0 \quad (110)$$

i pozbyć się całki

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot q = 0 \quad (111)$$

jeśli $\varepsilon \propto T$ i $q \propto \nabla T$ to mamy

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot \kappa \nabla T = 0 \quad (112)$$

zachowanie masy

strumień masy przez element dS to $\rho v \cdot dS$

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho dV = - \oiint_S \rho v \cdot dS \quad (113)$$

co daje równanie zachowania masy (w postaci zachowawczej)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho v = 0 \quad (114)$$

zachowanie pędu

całkowity pęd w kierunku X

$$\iiint_V \rho v_x dV \quad (115)$$

składowa v_x rośnie dzięki konwekcji pędu i działaniu ciśnienia

$$\oiint_S (\rho v_x v + p \hat{e}_x) \cdot dS \quad (116)$$

czyli zachowanie pędu w kierunku X daje

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho v_x dV = - \iiint_V \nabla \cdot (\rho v_x v + p \hat{e}_x) dV \quad (117)$$

czyli

$$\frac{\partial \rho v_x}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v_x v + p \hat{e}_x) = 0 \quad (118)$$

i łącznie z równaniami dla pozostałych kierunków

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v v + p I) = 0 \quad (119)$$

zachowanie ładunku elektrycznego

strumień to gęstość prądu przez powierzchnię

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho dV = - \oiint_S j \cdot dS \quad (120)$$

czyli

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot j = 0 \quad (121)$$

ale z prawa Gaussa $\nabla \cdot E = 4\pi\rho/\varepsilon$

$$\nabla \cdot \left(\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{4\pi j}{\varepsilon} \right) = 0 \quad (122)$$

czyli to co w nawiasie jest rotacją pewnej wielkości

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{4\pi j}{\varepsilon} = \nabla \times B \quad (123)$$

zachowanie strumienia magnetycznego

z prawa Faradaya strumień magnetyczny przez powierzchnię S jest całką pola elektrycznego po jej obwodzie

$$\frac{\partial}{\partial t} \iint_S B \cdot dS = - \oint_L E \cdot dl \quad (124)$$

i z twierdzenia Stokesa

$$\frac{\partial B}{\partial t} + \nabla \times E = 0 \quad (125)$$

jak widać wszystkie z w/w zasad zachowania można przedstawić w tzw. postaci zachowawczej

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot f = 0 \quad (126)$$

gdzie „strumień” $f = f(u)$ (oczywiście $u = u(x, t)$)

Związek dyspersyjny dla zjawisk fizycznych

Równania różniczkowe cząstkowe wiążą punkty w czasie i przestrzeni. Proste, liniowe własności tych równań można opisać przez zachowanie się fali w czasie i przestrzeni, rozważając pojedynczą falę (mod Fouriera)

$$u(x, t) = \hat{u}e^{i(\omega t - kx)} \quad (127)$$

po podstawieniu do równania opisującego zjawisko otrzymujemy tzw. związek dyspersyjny

$$\omega = \omega(k) \quad (128)$$

czyli związek pomiędzy charakterystyczną skalą czasową a długością fali zjawiska opisywanego przez równanie

równanie falowe

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} - V_s^2 \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} = 0 \quad (129)$$

po podstawieniu $\xi(x, t) = \hat{\xi} e^{i(\omega t - kx)}$ otrzymamy związek dyspersyjny

$$-\omega^2 + k^2 V_s^2 = 0 \quad (130)$$

lub

$$\tau = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi}{V_s k} = \frac{\lambda}{V_s} \quad (131)$$

równanie adwekcji

opisuje sytuację, gdy własności np. cieczy są unoszone przez samą ciecz – np. unoszenie masy

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho v = 0 \quad (132)$$

rozpisując iloczyn pod pochodną

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + v \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot v = 0 \quad (133)$$

dla cieczy nieściśliwej ($\nabla \cdot v = 0$) mamy postać równania adwekcji

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + v \cdot \nabla \rho = 0 \quad (134)$$

podstawiając mod Fouriera $\rho = \hat{\rho} e^{i(\omega t - kx)}$ otrzymamy

$$\omega = kv \quad (135)$$

lub

$$\tau = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi}{vk} = \frac{\lambda}{v} \quad (136)$$

równanie dyfuzji

w najprostszym (jednowymiarowym) przypadku

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \kappa \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (137)$$

podstawiając $u = \hat{u}e^{i(\omega t - kx)}$ otrzymamy

$$i\omega + \kappa k^2 = 0 \quad (138)$$

czyli

$$\omega = i\kappa k^2 \quad (139)$$

częstość jest urojona, czyli mod zanika w skali czasowej

$$\tau = \frac{2\pi}{i\omega} = \frac{2\pi}{\kappa k^2} = \frac{\lambda^2}{2\pi\kappa} \quad (140)$$

równanie eliptyczne

równania typu Laplace'a i Poissona

$$\nabla^2 \Phi = -\rho \quad (141)$$

opisują układy statyczne, lub zakładające natychmiastowe rozchodzenie się informacji

$$\omega \rightarrow \infty \quad (142)$$

lub

$$\tau \rightarrow 0 \quad (143)$$

ogólnie, równanie drugiego stopnia możemy zapisać

$$a \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + d \frac{\partial \Phi}{\partial x} + e \frac{\partial \Phi}{\partial y} + f \Phi + g = 0 \quad (144)$$

i klasyfikuje się je na

hiperboliczne	gdy	$b^2 - 4ac > 0$
paraboliczne	gdy	$b^2 - 4ac = 0$
eliptyczne	gdy	$b^2 - 4ac < 0$

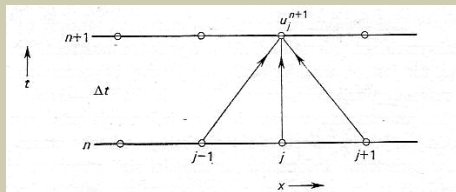
Całkowanie jawne pierwszego rzędu równania dyfuzji

chcemy scałkować równanie

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad (145)$$

używając schematu Eulera mamy

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2} (u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n) \quad (146)$$



Całkowanie jawne pierwszego rzędu równania dyfuzji

wyliczmy współczynnik wzmocnienia dla przestrzennego modu Fouriera

$$u = \hat{u}(t)e^{ikx} \quad (147)$$

podstawiając, mamy

$$\hat{u}^{n+1}e^{ikx_j} = \hat{u}^n e^{ikx_j} + \frac{\kappa\Delta t}{\Delta^2}\hat{u}^n(e^{ikx_{j-1}} - 2e^{ikx_j} + e^{ikx_{j+1}}) \quad (148)$$

czyli

$$\hat{u}^{n+1} = \hat{u}^n \left\{ 1 + \frac{2\kappa\Delta t}{\Delta^2} \left(\frac{1}{2}e^{ik\Delta} + \frac{1}{2}e^{-ik\Delta} - 1 \right) \right\} \quad (149)$$

i współczynnik wzmocnienia

$$g(\Delta t, \Delta, k) = 1 + 2\frac{\kappa\Delta t}{\Delta^2}[\cos(k\Delta) - 1] \quad (150)$$

lub

Całkowanie jawne pierwszego rzędu równania dyfuzji

$$g(\Delta t, \Delta, k) = 1 - \frac{4\kappa\Delta t}{\Delta^2} \sin^2\left(\frac{k\Delta}{2}\right) \quad (151)$$

żeby spełnić $|g| \leq 1$ dla każdego k musi zachodzić

$$-4\frac{\kappa\Delta t}{\Delta^2} \geq -2 \quad (152)$$

czyli

$$\Delta t \leq 0.5 \frac{\Delta^2}{\kappa} \quad (153)$$

dokładność metody Eulera jest $O(\Delta t) + O(\Delta^2)$

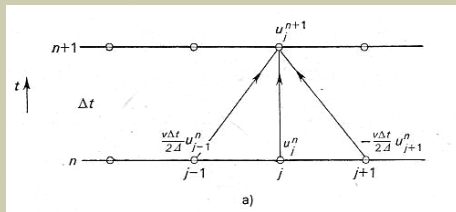
Całkowanie jawne pierwszego rzędu równania adwekcji

zrobmy to samo dla równania adwekcji

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (154)$$

na dyskretnej siatce w pierwszym rzędzie mamy

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{v\Delta t}{2\Delta}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) \quad (155)$$



Całkowanie jawne pierwszego rzędu równania adwekcji

podstawiając przestrzenny mod Fouriera

$$\hat{u}^{n+1} e^{ikx_j} = \hat{u}^n e^{ikx_j} - \frac{v\Delta t}{2\Delta} \hat{u}^n (e^{ikx_{j+1}} - e^{ikx_{j-1}}) \quad (156)$$

lub

$$\hat{u}^{n+1} = \hat{u}^n \left\{ 1 - i \frac{v\Delta t}{\Delta} \sin(k\Delta) \right\} \quad (157)$$

jeśli $\alpha = (v\Delta t/\Delta) \sin(k\Delta)$ to współczynnik wzmocnienia

$$|g|^2 = 1 + \alpha^2 \quad (158)$$

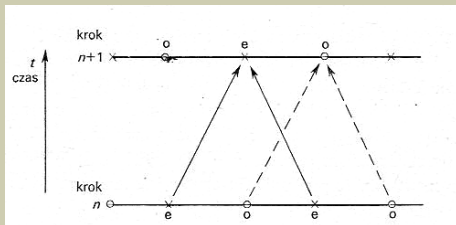
i schemat jest niestabilny(!)

Całkowanie jawne pierwszego rzędu równania adwekcji

spróbujemy zastąpić u_j^n przez średnią z sąsiednich punktów w przestrzeni

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) - \frac{v\Delta t}{2\Delta}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) \quad (159)$$

taki schemat nazywa się schematem Laxa



Całkowanie jawne pierwszego rzędu równania adwekcji

dla przestrzennego modu Fouriera

$$\hat{u}^{n+1} = \hat{u}^n \left\{ \cos(k\Delta) - i \frac{v\Delta t}{\Delta} \sin(k\Delta) \right\} \quad (160)$$

i amplituda współczynnika wzmocnienia

$$|g|^2 = \cos^2(k\Delta) + \left(\frac{v\Delta t}{\Delta} \right)^2 \sin^2(k\Delta) \quad (161)$$

lub

$$|g|^2 = 1 - \sin^2(k\Delta) \left\{ 1 - \left(\frac{v\Delta t}{\Delta} \right)^2 \right\} \quad (162)$$

warunek stabilności będzie spełniony dla

$$\frac{|v\Delta t|}{\Delta} \leq 1 \quad (163)$$

czyli

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{|v|} \quad (164)$$

Całkowanie jawne pierwszego rzędu równania adwekcji

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{|v|}$$

dla równań hiperbolicznych to tzw. warunek
Couranta–Friedrichsa–Lewy’ego

Dyspersja i dyfuzja na siatce różnicowej

Dlaczego metoda Eulera dla adwekcji nie jest stabilna a Laxa tak – obie są pierwszego rzędu, obie nie są wycentrowana w czasie.

przepiszmy schemat Laxa do postaci

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}(u_j^{n+1} - u_j^{n-1}) + \frac{1}{2}(u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_j^{n-1}) \\ &= \frac{1}{2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) - \frac{v\Delta t}{2\Delta}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) \end{aligned} \quad (165)$$

odpowiada to schematowi drugiego rzędu dla równania różniczkowego

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\Delta^2}{2\Delta t} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + v \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (166)$$

drugi człon powoduje niestabilność, trzeci stabilizuje, żeby zapewnić stabilność potrzeba aby

Dyspersja i dyfuzja na siatce różnicowej

$$\frac{\Delta^2 k^2}{2\Delta t} \geq \frac{\Delta t}{2} \omega^2 \quad (167)$$

dla modu Fouriera liczbie falowej k i częstości $\omega \sim vk$

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{|v|} \quad (168)$$

To co powyżej dotyczy stabilności schematu, ale to nie wszystko. Jakie są własności numeryczne schematu związane z dyfuzją i dyspersją rozwiązania – można to analizować przy pomocy związku dyspersyjnego.

$$\omega = \omega(k, \Delta, \Delta t) \quad (169)$$

Dyspersja i dyfuzja na siatce różnicowej

podstawiając mod Fouriera $u(x, t) = \hat{u}e^{i(\omega t - kx)}$ do równania różniczkowego (adwekcji) otrzymamy

$$\omega = vk \quad (170)$$

ω jest rzeczywiste, nie ma ani dyfuzji ani dyspersji w schemacie różnicowym (Laxa)

$$\hat{u}e^{i[\omega(t^n + \Delta t) - kx_j]} = \frac{1}{2}\hat{u}e^{i(\omega t - kx_j)} \left\{ (e^{ik\Delta} + e^{-ik\Delta}) - \frac{v\Delta t}{\Delta}(e^{ik\Delta} - e^{-ik\Delta}) \right\} \quad (171)$$

po skróceniu

$$e^{i\omega\Delta t} = \cos(k\Delta) - \frac{v\Delta t}{\Delta}i \sin(k\Delta) \quad (172)$$

ogólnie ω jest zespolone: $\omega = \Omega + i\gamma$ i porównując części urojone i rzeczywiste w związku dyspersyjnym otrzymujemy

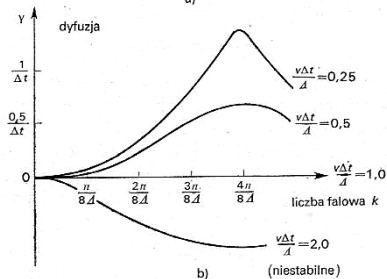
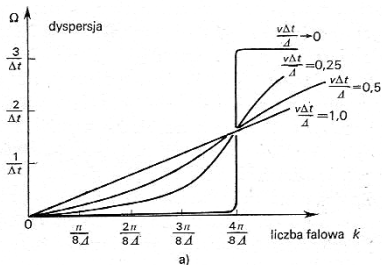
Dyspersja i dyfuzja na siatce różnicowej

$$\operatorname{tg}(\Omega\Delta t) = \frac{v\Delta t}{\Delta} \operatorname{tg}(k\Delta) \quad (173)$$

$$e^{-2\gamma\Delta t} = \cos^2(k\Delta) + \left(\frac{v\Delta t}{\Delta}\right)^2 \sin^2(k\Delta) \quad (174)$$

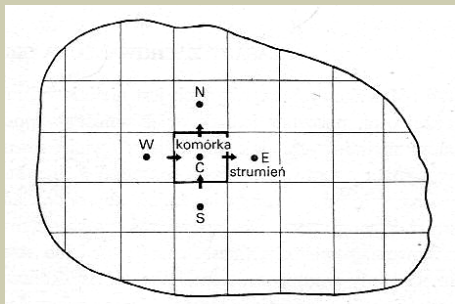
dla $v\Delta t/\Delta = 1$ jak dla równania różniczkowego $\gamma = 0$ i $\Omega = vk$
dla małych liczb falowych (długich fal) dyfuzja i dyspersja jest (może być)
akceptowalna, dla dużych k (krótkich fal) jest znacznie gorzej

Dyspersja i dyfuzja na siatce różnicowej



Zasady zachowania na siatce różnicowej

Rozważmy pewien prostokątny obszar R ograniczony przez brzeg B i dzielimy go na zbiór $I \times J$ elementarnych komórek o objętości ΔV każda.



całkując równanie zachowacze

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot f = 0 \quad (175)$$

po każdej komórce czasowo-przestrzennej C (z brzegiem, A)

Zasady zachowania na siatce różnicowej

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \iint_C \frac{\partial u}{\partial t} dV dt = - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \iint_C \nabla \cdot f dV dt \quad (176)$$

czyli

$$\iint_C u^{n+1} dV - \iint_C u^n dV = - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \oint_A f \cdot dS dt \quad (177)$$

jeśli oznaczymy wartości „globalne” (w komórce)

$$\Delta V \tilde{u}_{ij}^n = \iint_C u^n dV \quad (178)$$

i strumieniu przez poszczególne powierzchnie

$$\sum_{\alpha=\{E,N,W,S\}} F_{\alpha ij} = \oint_A f \cdot dS \quad (179)$$

to

Zasady zachowania na siatce różnicowej

$$\tilde{u}_{ij}^{n+1} = \tilde{u}_{ij}^n - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{1}{\Delta t} \sum_{\alpha} F_{\alpha ij} dt \quad (180)$$

taki schemat jest schematem zachowawczym (niezależnie od sposobu wyliczania strumienia) – jeśli równanie różniczkowe zachowuje $\int_R u dV$ to i schemat różnicowy zachowuje te zmienne
zauważmy, że np.

$$F_{Eij} = -F_{Wi+1,j} \quad (181)$$

to sumując po całym obszarze R

$$\sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \tilde{u}_{ij}^{n+1} = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \tilde{u}_{ij}^n - \sum_B \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{1}{\Delta V} F_{\alpha} dt \quad (182)$$

zmiana całkowitej wartości u wynika tylko z przepływu strumienia tej wielkości przez brzeg B

zachowawcza metoda Laxa

dla przypomnienia równanie hiperboliczne

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (183)$$

i sam schemat Laxa

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) - (f_{j+1}^n - f_{j-1}^n) \frac{\Delta t}{2\Delta} \quad (184)$$

jeśli $f = vu$ to mamy równanie adwekcji, i warunek stabilności

$$\Delta t \leq \Delta/|v|$$

dla przykładu weźmy równania opisujące rozchodzenie się spolaryzowanej fali elektromagnetycznej

$$\frac{\partial B}{\partial t} + c \frac{\partial E}{\partial x} = 0 \quad (185)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + c \frac{\partial B}{\partial x} = 0 \quad (186)$$

gdzie $E = E_y$, $B = cB_z$ (i $c = 1/\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}$)

zachowawcza metoda Laxa

wstawiając w metodzie Laxa $u = (E, B)$ i strumień $f = (cB, cE)$ mamy

$$E_j^{n+1} = \frac{1}{2}(E_{j+1}^n + E_{j-1}^n) - (B_{j+1}^n - B_{j-1}^n) \frac{c\Delta t}{2\Delta} \quad (187)$$

$$B_j^{n+1} = \frac{1}{2}(B_{j+1}^n + B_{j-1}^n) - (E_{j+1}^n - E_{j-1}^n) \frac{c\Delta t}{2\Delta} \quad (188)$$

podstawiając mod Fouriera

$$u^n = (\hat{E}^n e^{ikx}, \hat{B}^n e^{ikx}) \quad (189)$$

otrzymamy macierz wzmocnienia

$$G = \begin{bmatrix} \cos(k\Delta) & \frac{-ic\Delta t}{\Delta} \sin(k\Delta) \\ \frac{-ic\Delta t}{\Delta} \sin(k\Delta) & \cos(k\Delta) \end{bmatrix} \quad (190)$$

i wartości własne

$$[\cos(k\Delta) - g]^2 = \frac{c^2(\Delta t)^2}{\Delta^2} \sin^2(k\Delta) \quad (191)$$

zachowawcza metoda Laxa

czyli

$$g = \cos(k\Delta) \pm \frac{ic\Delta t}{\Delta} \sin(k\Delta) \quad (192)$$

obie dają

$$|g|^2 = 1 - \sin^2(k\Delta) \left[1 - \frac{c^2(\Delta t)^2}{\Delta^2} \right] \quad (193)$$

i jak ostatnio

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{c} \quad (194)$$

ale dla przypomnienia – metoda nie jest wycentryczona w czasie i pojawia się człon destabilizujący – konieczność ekstra dyfuzji i w efekcie rozmywanie rozwiązania

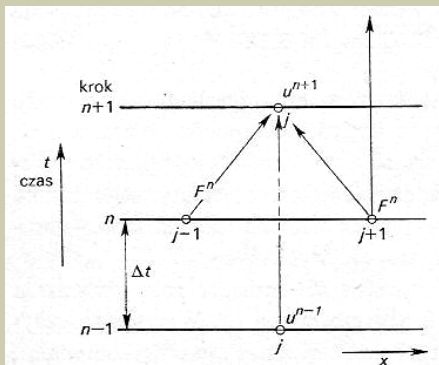
zachowawcza metoda skokowa

spróbujemy wycentrować w czasie schemat – jak w metodzie skokowej

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} - \frac{\Delta t}{\Delta} (f_{j+1}^n - f_{j-1}^n) \quad (195)$$

gdzie $f_j^n = f(u_j^n)$, i w następnym kroku

$$u_{j+1}^{n+2} = u_{j+1}^n - \frac{\Delta t}{\Delta} (f_{j+2}^{n+1} - f_j^{n+1}) \quad (196)$$



zachowawcza metoda skokowa

w najprostszym przypadku ($f = vu$) mamy współczynnik wzmocnienia

$$g^2 = 1 - i \frac{2\Delta t}{\Delta} v \sin(k\Delta) g \quad (197)$$

czyli

$$g = i\alpha \pm \sqrt{-\alpha^2 + 1} \quad (198)$$

gdzie $\alpha = (\Delta t/\Delta)v \sin(k\Delta)$, dla $|\alpha| \leq 1$ mamy $|g| = 1$ czyli (jak zwykle)

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{|v|} \quad (199)$$

Dwustopniowy schemat Laxa-Wendroffa

krok pomocniczy – jak w metodzie Laxa

$$u_{j+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2}(u_j^n + u_{j+1}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta}(f_{j+1}^n - f_j^n) \quad (200)$$

stąd wyliczamy strumienie w punktach „połówkowych”

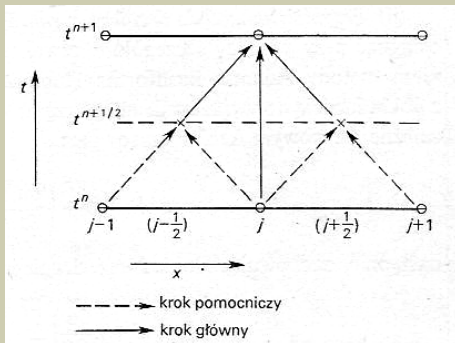
$$f_{j+1/2}^{n+1/2} = f\left(u_{j+1/2}^{n+1/2}\right) \quad (201)$$

oraz krok główny

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta} \left(f_{j+1/2}^{n+1/2} - f_{j-1/2}^{n+1/2} \right) \quad (202)$$

wartości $u_{j+1/2}^{n+1/2}$ nie są pamiętane

Dwustopniowy schemat Laxa-Wendroffa



stabilność dla $f = vu$ dostaniemy podstawiając mod Fouriera

$$g = 1 - \frac{v\Delta t}{\Delta} \left\{ i \sin(k\Delta) - \frac{v\Delta t}{\Delta} [\cos(k\Delta) - 1] \right\} \quad (203)$$

lub jeśli $\alpha = v\Delta t/\Delta$

$$g = 1 - i\alpha \sin(k\Delta) + \alpha^2 [\cos(k\Delta) - 1] \quad (204)$$

Dwustopniowy schemat Laxa-Wendroffa

i moduł

$$|g|^2 = 1 - \alpha^2(1 - \alpha^2)[1 - \cos(k\Delta)]^2 \quad (205)$$

i znowu – stabilny schemat dla $\alpha^2 \leq 1$, i stąd

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{|v|} \quad (206)$$

zauważmy, że dla $\alpha < 1$ współczynnik wzmocnienia jest mniejszy od 1, czyli krótsze mody Fouriera zanikają, ale

$$|g|^2 = 1 - \alpha^2(1 - \alpha^2)\frac{k^4\Delta^4}{4} + O(k^4\Delta^4) \quad (207)$$

dyfuzja numeryczna jest efektem dopiero czwartego rzędu (niewielka dyfuzja jest zwykle korzystna)

Przybliżona metoda drugiego rzędu

jeśli zachować drugi wyraz rozwinięcia w szereg Taylora

$$u^{n+1} = u^n + \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_n \Delta t + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right)_n \frac{(\Delta t)^2}{2} \quad (208)$$

i dalej

$$u^{n+1} = u^n + \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_n \Delta t + \left[\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_n - \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_{n-1} \right] \frac{\Delta t}{2} \quad (209)$$

i dla zachowawczych równań hiperbolicznych mamy

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \left(\frac{3}{2} + \varepsilon \right) \frac{\Delta t}{2\Delta} (f_{j+1}^n - f_{j-1}^n) + \left(\frac{1}{2} + \varepsilon \right) \frac{\Delta t}{2\Delta} (f_{j+1}^{n-1} - f_{j-1}^{n-1}) \quad (210)$$

dla jakiegoś małego ε

Przybliżona metoda drugiego rzędu

współczynnik wzmocnienia dla $f = vu$

$$g^2 = g - (3/2 + \varepsilon)i\alpha g + (1/2 + \varepsilon)i\alpha \quad (211)$$

gdzie $\alpha = (v\Delta t/\Delta) \sin(k\Delta)$

dla $|\alpha| \leq 1/2$ otrzymamy $|g| < 1$ jeśli

$$\varepsilon > \frac{1}{4}\alpha^2 + \frac{1}{2}\alpha^4 + O(\alpha^4) \quad (212)$$

np. dla $\Delta t = \frac{1}{2} \frac{\Delta}{|v|}$ potrzeba aby $\varepsilon \geq 3/32$

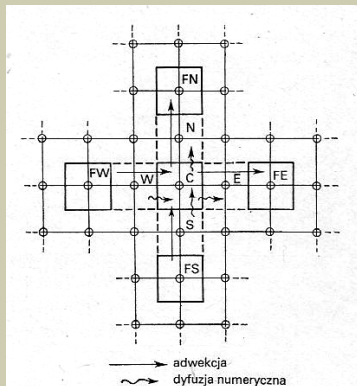
koszt małego Δt można wybrać dowolnie małe ε i przez to dowolnie zbliżyć się do dokładności rzędu drugiego

Wielowymiarowe metody jawne

W przypadku N wymiarowym schemat Laxa ma postać

$$u^{n+1} = \frac{1}{2N} \sum_{\alpha=-N}^N u_{\alpha}^n - \sum_{\alpha=1}^N (f_{\alpha}^n - f_{-\alpha}^n) \frac{\Delta t}{2\Delta} \quad (213)$$

gdzie α odnosi się do $2N$ sąsiadujących komórek w N wymiarach przestrzennych



Wielowymiarowe metody jawne

w analizie stabilności (np. w dwóch wymiarach) podstawiamy

$u = \hat{u}e^{ik_x x + ik_y y}$ i np. dla równania adwekcji $f_x = v_x u$ i $f_y = v_y u$

$$u_{ij}^{n+1} = \frac{1}{4} \left(u_{i+1,j}^n + u_{i-1,j}^n + u_{i,j+1}^n + u_{i,j-1}^n \right) \quad (214)$$

$$- \frac{\Delta t}{2\Delta} v_x \left(u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n \right) - \frac{\Delta t}{2\Delta} v_y \left(u_{i,j+1}^n - u_{i,j-1}^n \right)$$

oznaczając $\theta_x = v_x \Delta t / \Delta$, $\theta_y = v_y \Delta t / \Delta$, $\alpha = k_x \Delta$ i $\beta = k_y \Delta$ mamy

$$g = \frac{1}{2} \cos \alpha + \frac{1}{2} \cos \beta - i\theta_x \sin \alpha - i\theta_y \sin \beta \quad (215)$$

oraz

$$|g|^2 = 1 - (\sin^2 \alpha + \sin^2 \beta) \left[\frac{1}{2} - (\theta_x^2 + \theta_y^2) \right] \quad (216)$$

$$- \frac{1}{4} (\cos \alpha - \cos \beta)^2 - (\theta_y \sin \alpha - \theta_x \sin \beta)^2$$

Wielowymiarowe metody jawne

warunek stabilności będzie spełniony, gdy

$$\frac{1}{2} - (\theta_x^2 + \theta_y^2) \geq 0 \quad (217)$$

lub

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{(v_x^2 + v_y^2)^{1/2} \sqrt{2}} \quad (218)$$

w innych schematach mogą się pojawić problemy ze słabym sprzężeniem siatki w różnych kierunkach – może się okazać konieczne stosowanie sztucznej dyfuzji „po przekątnej”

Metoda jawna pierwszego rzędu

ustalmy uwagę na równaniu dyfuzji

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad (219)$$

schemat Eulera

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \quad (220)$$

jak już wiemy, stabilny dla

$$\Delta t \leqslant \frac{1}{2} \cdot \frac{\Delta^2}{\kappa} \quad (221)$$

Metoda niejawna Cranka-Nicholsona

analogiczna do metody niejawnej drugiego rzędu

$$\begin{aligned}
 u_j^{n+1} = u_j^n &+ \frac{\kappa \Delta t}{2\Delta^2} \left(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1} \right) \\
 &+ \frac{\kappa \Delta t}{2\Delta^2} \left(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n \right)
 \end{aligned} \tag{222}$$

podobnie, współczynnik wzmocnienia

$$g = \frac{1 - \frac{2\kappa \Delta t}{\Delta^2} \sin^2 \left(\frac{k\Delta}{2} \right)}{1 + \frac{2\kappa \Delta t}{\Delta^2} \sin^2 \left(\frac{k\Delta}{2} \right)} \tag{223}$$

i metoda jest bezwzględnie stabilna

Niestabilna metoda skokowa

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + 2\frac{\kappa\Delta t}{\Delta^2} \left(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n \right) \quad (224)$$

ale dla niej współczynnik wzmocnienia

$$g = -\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 1} \quad (225)$$

gdzie

$$\alpha = \frac{4\kappa\Delta t}{\Delta^2} \sin\left(\frac{k\Delta}{2}\right) \quad (226)$$

jest zawsze niestabilna

Metoda Duforta-Frankla

weźmy następującą modyfikację metody skokowej

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + 2 \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2} \left[u_{j+1}^n - (u_j^{n+1} + u_j^{n-1}) + u_{j-1}^n \right] \quad (227)$$

można przekształcić to do postaci jawnej

$$u_j^{n+1} = \left(\frac{1 - \alpha}{1 + \alpha} \right) u_j^{n-1} + \frac{\alpha}{1 + \alpha} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) \quad (228)$$

gdzie $\alpha = 2\kappa\Delta t/\Delta^2$ i tradycyjnie współczynnik wzmocnienia

$$g = \frac{1}{1 + \alpha} \left[\alpha \cos(k\Delta) \pm \sqrt{1 - \alpha^2 \sin^2(k\Delta)} \right] \quad (229)$$

dla małych kroków czasowych $\alpha^2 \sin^2(k\Delta) \leq 1$ jest rzeczywisty i mniejszy od jedności dla obu pierwiastków

dla dużych kroków czasowych $\alpha^2 \sin^2(k\Delta) > 1$ jest zespolony, ale

$$|g| = \frac{1 - \alpha}{1 + \alpha} \quad (230)$$

i metoda jest zawsze stabilna

Metody „upwind” typu Godunova

Przestrzenna dyskretyzacja oparta na centrowanym schemacie

$$\frac{\partial u}{\partial x} \rightarrow \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} \quad (231)$$

nie odzwierciedla natury adwekcji – nie wyróżnia kierunku. Z kolei jednostronne ilorazy różnicowe odzwierciedlają naturę równania tylko dla konkretnego kierunku unoszenia. Rozważmy taką dyskretyzację równania adwekcji

$$\begin{aligned} \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + v \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} &= 0 \quad , \quad v > 0 \\ \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + v \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x} &= 0 \quad , \quad v < 0 \end{aligned} \quad (232)$$

schemat ten jest stabilny odpowiednio dla

$$\begin{aligned} 0 &\leq \frac{v\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad , \quad v > 0 \\ -1 &\leq \frac{v\Delta t}{\Delta x} \leq 0 \quad , \quad v < 0 \end{aligned} \quad (233)$$

Metody „upwind” typu Godunova

można to zapisać dla równań zachowawczych $\partial u / \partial t + \partial f / \partial x = 0$, gdzie $f = vu$

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \frac{f_{i+1/2}^n - f_{i-1/2}^n}{\Delta x} = 0 \quad (234)$$

gdzie

$$\begin{aligned} f_{i+1/2}^n &= v^+ u_i^n + v^- u_{i+1}^n \\ f_{i-1/2}^n &= v^+ u_{i-1}^n + v^- u_i^n \end{aligned} \quad (235)$$

przy czym

$$\begin{aligned} v^+ &= \max(v, 0) = (v + |v|)/2 \\ v^- &= \min(v, 0) = (v - |v|)/2 \end{aligned} \quad (236)$$

niestety jest to schemat tylko pierwszego rzędu.

Metody „upwind” typu Godunova

Istnieje kilka modyfikacji schematu Godunova poprawiające rząd dokładności:

- MUSCL (*monotonic upwind scheme for conservation flows*) – drugiego rzędu;
- PPM (*piecewise parabolic method*) – trzeciego;
- ENO (*essentially non-oscillatory scheme*) – czwartego i wyższych.

Metody „upwind” typu Godunova

Np. dla schematu MUSCL $u(x, t)$ aproksymuje się na obszarze komórki w każdym kroku czasowym

$$\bar{u}(x, t) = u_i + s_i(x - \bar{x}_i) \quad (237)$$

gdzie $\bar{x}_i = (x_i + x_{i+1})/2$, a nachylenie s_i może mieć postać

$s_i = 0$ – schemat Godunova

$s_i = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x}$ – schemat Fromma

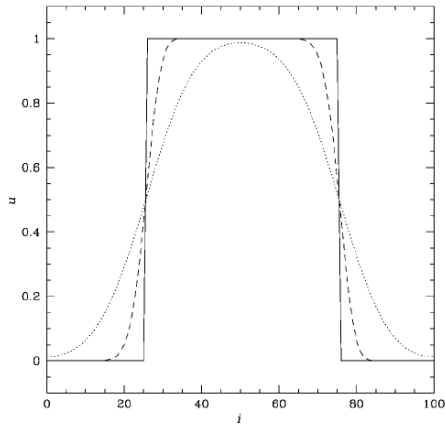
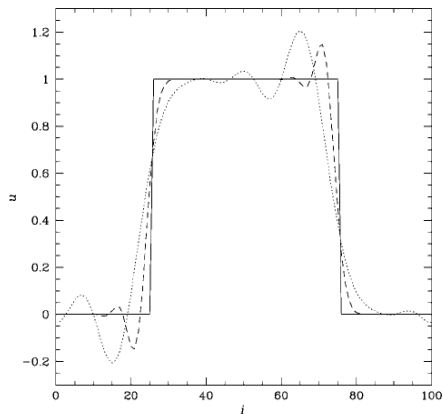
$s_i = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}$ – schemat Beamu-Warmminga

$s_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$ – schemat Laxa-Wendroffa

$s_i = \minmod(\frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}, \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x})$ – schemat minmod

$$\minmod(a, b) = \begin{cases} a, & |a| < |b|, \quad ab > 0 \\ b, & |a| > |b|, \quad ab > 0 \\ 0, & ab < 0 \end{cases} \quad (238)$$

Metody „upwind” typu Godunova



Lax-Wendroff i "upwind" 1. stopnia

Metody TVD

Jeśli funkcja jest monotoniczna w kroku n ,

$$\min(u_{i-1}, u_{i+1}) \leq u_i \leq \max(u_{i-1}, u_{i+1}) \quad (239)$$

to chcemy, żeby pozostała taką w kroku $n + 1$.

Zdefiniujemy całkowitą zminenność (*total variation*)

$$TV(u^n) = \sum_i |u_i^n - u_{i-1}^n| \quad (240)$$

metodę definiujemy jako stabilną ze względu na całkowitą zmienność, jeśli

$$TV(u^n) \leq c \quad (241)$$

dla każdego kroku czasowego.

Metody TVD (*total variation diminishing*) wymagają, żeby

$$TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n) \quad (242)$$

Metody TVD

Rozważmy przykład metody TVD drugiego rzędu – strumień (pierwszego rzędu) na brzegu kostki

$$f_{i+1/2}^n = \begin{cases} f_i^n, & v > 0 \\ f_{i+1}^n, & v < 0 \end{cases} \quad (243)$$

poprawiamy o poprawki dla
 $v > 0$

oraz dla $v < 0$

$$\Delta f_{i+1/2}^{L,n} = \frac{f_i^n - f_{i-1}^n}{2} \quad (244)$$

$$\Delta f_{i+1/2}^{L,n} = -\frac{f_{i+1}^n - f_i^n}{2} \quad (245)$$

$$\Delta f_{i+1/2}^{R,n} = \frac{f_{i+1}^n - f_i^n}{2}$$

$$\Delta f_{i+1/2}^{R,n} = -\frac{f_{i+2}^n - f_{i+1}^n}{2}$$

i samą poprawkę wyliczamy z Δf^L i Δf^R

$$\Delta f_{i+1/2}^n = \phi \left(\Delta f_{i+1/2}^{L,n}, \Delta f_{i+1/2}^{R,n} \right) \quad (246)$$

gdzie ϕ to tzw. ogranicznik (*limiter*).

Metody TVD

Drugi rząd obliczeń otrzymujemy stosując schemat Rungego-Kutty 2. stopnia:

– krok pomocniczy (połówkowy):

$$u_i^{n+1/2} = u_i^n - \frac{f_{i+1/2}^n - f_{i-1/2}^n}{\Delta x} \cdot \frac{\Delta t}{2} \quad (247)$$

i następnie pełny krok:

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{f_{i+1/2}^{n+1/2} - f_{i-1/2}^{n+1/2}}{\Delta x} \cdot \Delta t \quad (248)$$

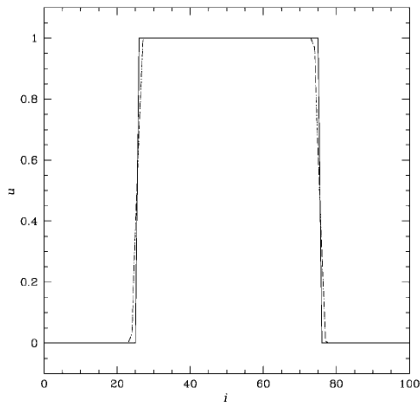
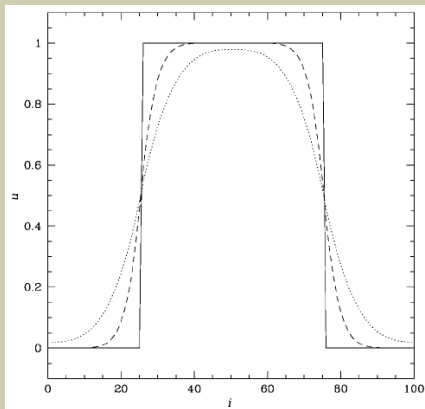
jako *limiter* używa się:

$$\phi(a, b) = \text{minmod}(a, b) \quad (249)$$

$$\phi(a, b) = \text{superbee}(a, b) = \begin{cases} \text{minmod}(a, 2b), & |a| \geq |b| \\ \text{minmod}(2a, b), & |a| \leq |b| \end{cases} \quad (250)$$

$$\phi(a, b) = \text{vanleer}(a, b) = \frac{2ab}{a + b}, \quad ab > 0 \quad (251)$$

Metody TVD



minmod i superbee

Zastosowanie do równiań hydrodynamiki

Przepływający ośrodek możemy traktować jako sumę lewo- i prawobieżnego przepływu $u = u^R + u^L$, gdzie dla $c = |v|$

$$u^R = \left(\frac{1 + v/c}{2} \right) u \quad (252) \quad u^L = \left(\frac{1 - v/c}{2} \right) u \quad (253)$$

Oba strumienie płyną w przeciwnych kierunkach z prędkością c i można je opisać równaniami adwekcji

$$\frac{\partial u^R}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(cu^R) = 0 \quad (254)$$

$$\frac{\partial u^L}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}(cu^L) = 0 \quad (255)$$

i możemy łatwo zastosować schemat MUSCL do równania adwekcji

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f^R}{\partial x} - \frac{\partial f^L}{\partial x} = 0 \quad (256)$$

gdzie strumienie w obu kierunkach $f^R = cu^R$ i $f^L = cu^L$.

Zastosowanie do równań hydrodynamiki

Dla dowolnego równania w postaci zachowawczej

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0 \quad (257)$$

(np. dla $u = (\rho, \rho v, e)$) możemy zastąpić je równaniami

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(cw) = 0 \quad (258)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(cu) = 0 \quad (259)$$

gdzie $c(x, t)$ jest dowolną dodatnią funkcją. W praktyce kładzie się $w = f(u)/c$.

Zastosowanie do równań hydrodynamiki

Możemy rozwinąć ten układ równań podstawiając

$$u^R = \frac{u + w}{2} \quad (260)$$

$$u^L = \frac{u - w}{2} \quad (261)$$

co daje

$$\frac{\partial u^R}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(cu^R) = 0 \quad (262)$$

$$\frac{\partial u^L}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}(cu^L) = 0 \quad (263)$$

i jak poprzednio dla $f^R = cu^R$ i $f^L = cu^L$ mamy

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f^R}{\partial x} - \frac{\partial f^L}{\partial x} = 0 \quad (264)$$

Pozostaje dobrać wartość c tak, żeby zachować stabilność schematu – c musi być większe od charakterystycznych szybkości danych przez wartości własne Jacobianu $\frac{\partial f(u)}{\partial u}$

Zastosowanie do równań hydrodynamiki

Dla równań hydrodynamiki

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j) = 0 \quad (265)$$

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_i v_j + p \delta_{ij}) = 0 \quad (266)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}[(e + p)v_j] = 0 \quad (267)$$

gdzie gęstość energii

$$e = \varepsilon + \frac{1}{2}\rho v^2 \quad (268)$$

uzupełnione przez równanie stanu

$$p = (\gamma - 1)\varepsilon \quad (269)$$

Zastosowanie do równań hydrodynamiki

Warunek stabilności wymaga, żeby szybkość „zamrożenia” c była większe od charakterystycznej szybkości – największej wartości własnej Jakobianu $\partial F(u)/\partial u$.

Dla układu równań hydrodynamiki prędkość dźwięku $c_s^2 = \gamma p / \rho$ i wystarczy żeby

$$c \geqslant |v| + c_s \quad (270)$$

i warunek na krok czasowy

$$\Delta t \leqslant \frac{\Delta x}{c_{\max}} \quad (271)$$

równania hydrodynamiki

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j) = 0$$

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_i v_j + p \delta_{ij}) = 0$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}[(e + p)v_j] = 0$$

$$p = (\gamma - 1)\varepsilon$$

$$e = \varepsilon + \rho v^2/2$$

$$c_s^2 = \gamma \frac{p}{\rho}$$

... w jednym wymiarze

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v) = 0$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v^2 + p) = 0$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}[(e + p)v] = 0$$

$$p = (\gamma - 1)\varepsilon = (\gamma - 1) \cdot (e - \rho v^2/2)$$

$$c_s^2 = \gamma \frac{p}{\rho}$$

... w jednym wymiarze

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v) = 0$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v^2 + p) = 0$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}[(e + p)v] = 0$$

$$p = (\gamma - 1)\varepsilon = (\gamma - 1) \cdot (e - \rho v^2/2)$$

$$c_s^2 = \gamma \frac{p}{\rho}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v) = 0$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left((\gamma - 1)e + \frac{3 - \gamma}{2} \rho v^2 \right) = 0$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\gamma e v + \frac{1 - \gamma}{2} \rho v^3 \right) = 0$$

$$c_s^2 = \gamma(\gamma - 1) \cdot \left(\frac{e}{\rho} - \frac{v^2}{2} \right)$$

wszystko co potrzebne razem

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v) = 0$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left((\gamma - 1)e + \frac{3 - \gamma}{2} \rho v^2 \right) = 0$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\gamma e v + \frac{1 - \gamma}{2} \rho v^3 \right) = 0$$

$$c_s^2 = \gamma(\gamma - 1) \cdot \left(\frac{e}{\rho} - \frac{v^2}{2} \right)$$

$$\gamma = 5/3$$

$$w = f(u)/c$$

$$u^R = \frac{u + w}{2}$$

$$u^L = \frac{u - w}{2}$$

$$\frac{\partial u^R}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(cu^R) = 0$$

$$\frac{\partial u^L}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}(cu^L) = 0$$

$$f^R = cu^R \quad f^L = cu^L$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f^R}{\partial x} - \frac{\partial f^L}{\partial x} = 0$$

Układy równań liniowych

Rachunek różnicowy sprawia, że równania różniczkowe zamieniają się w równania macierzowe. Powstaje zatem potrzeba sprawnego rozwiązywania takich równań.

$$\begin{aligned}
 a_{11}u_1 + a_{12}u_2 + \cdots + a_{1n}u_n &= w_1 \\
 a_{21}u_1 + a_{22}u_2 + \cdots + a_{2n}u_n &= w_2 \\
 &\vdots \\
 a_{m1}u_1 + a_{m2}u_2 + \cdots + a_{mn}u_n &= w_m
 \end{aligned} \tag{272}$$

lub jak ktoś woli

$$Au = w \tag{273}$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_m \end{bmatrix} \tag{274}$$

Układy równań liniowych

jeśli macierz A jest kwadratowa ($m = n$), to rozwiązanie

$$u = A^{-1}w \quad (275)$$

A^{-1} możemy policzyć np. ze wzorów Cramera

$$(A^{-1})_{ij} = (-1)^{i+j} \frac{|A_{ij}|}{|A|} \quad (276)$$

i wyznacznik

$$|A| = \sum_{j=1}^n (-1)^{i+j} |A_{ij}| a_{ij} \quad (277)$$

ale sam wyznacznik to $n!$ operacji!

Zatem potrzeba bardziej wydajnych metod.

Macierze powstające w rachunku różnic skończonych

Często macierze mają szczególną postać, np. dla równania Poissona

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = -\rho \quad (278)$$

na siatce przestrzennej (z krokiem Δ) mamy

$$\Phi_{j+1} - 2\Phi_j + \Phi_{j-1} = \Delta^2\rho_j \quad (279)$$

jeśli położymy warunki brzegowe $\Phi_1 = w_1$, $\Phi_J = w_J$ to

$$\begin{array}{rcccccl} \Phi_1 & & & & & = & w_1 \\ \Phi_1 & -2\Phi_2 & +\Phi_3 & & & = & \Delta^2\rho_2 \\ & \Phi_2 & -2\Phi_3 & +\Phi_4 & & = & \Delta^2\rho_3 \\ & & & \dots & & & \\ & & & & & & \\ & \Phi_{J-2} & -2\Phi_{J-1} & \Phi_J & = & \Delta^2\rho_{J-1} \\ & & & \Phi_J & = & w_J \end{array} \quad (280)$$

i jeśli $A\Phi = w$ to macierz A ma postać *trójkątniową*

Macierze powstające w rachunku różnic skończonych

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ & & & \cdots & & \\ 0 & & \cdots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (281)$$

ogólnie macierze trójp przekątniowe powstają w problemach jedowymiarowych – w ogólnym przypadku

$$f \frac{d^2 u}{dx^2} + g \frac{du}{dx} + hu = w \quad (282)$$

to w postaci różnicowej

$$\frac{f_j}{\Delta^2} (u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}) + \frac{g_j}{2\Delta} (u_{j+1} - u_{j-1}) + h_j u_j = w_j \quad (283)$$

Macierze powstające w rachunku różnic skończonych

można je przepisać następująco

$$\alpha_j u_{j+1} + \beta_j u_j + \gamma_j u_{j-1} = w_j \quad (284)$$

gdzie

$$\alpha_j = \frac{f_j}{\Delta^2} + \frac{g_j}{2\Delta} \quad (285)$$

$$\beta_j = h_j - \frac{2f_j}{\Delta^2}$$

$$\gamma_j = \frac{f_j}{\Delta^2} - \frac{g_j}{2\Delta}$$

dla $1 < j < J$ i warunki brzegowe

$$\left(a \frac{du}{dx} + bu \right)_{x_1} = c \quad (286)$$

$$\left(a' \frac{du}{dx} + b'u \right)_{x_J} = c'$$

Macierze powstające w rachunku różnic skończonych

można je przedstawić w postaci różnicowej

$$\begin{aligned} au_2 + (b\Delta - a)u_1 &= c\Delta \\ -a'u_{J-1} + (b'\Delta + a')u_J &= c'\Delta \end{aligned} \quad (287)$$

lub jeszcze „ładniej”

$$\begin{aligned} \alpha_1 u_2 + \beta_1 u_1 &= w_1 \\ \gamma_J u_{J-1} + \beta_J u_J &= w_J \end{aligned} \quad (288)$$

i układ równań jest określony przez trójkątniową macierz

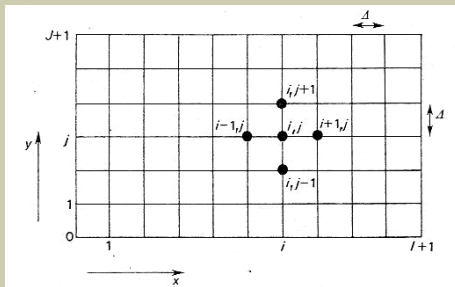
$$A = \begin{bmatrix} \beta_1 & \alpha_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \gamma_2 & \beta_2 & \alpha_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \gamma_3 & \beta_3 & \alpha_3 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ & & & \cdots & & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \gamma_J & \beta_J \end{bmatrix} \quad (289)$$

Macierze powstające w rachunku różnic skończonych

Dla dwuwymiarowego problemu macierz jest dalej *rzadka*, ale już nie trójkątniowa – dla równania Poissona

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = -\rho \quad (290)$$

na dwuwymiarowej siatce przestrzennej



Macierze powstające w rachunku różnic skończonych

$$(\Phi_{i+1,j} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i-1,j}) + (\Phi_{i,j+1} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i,j-1}) = \Delta^2 \rho_{i,j} \quad (291)$$

lub

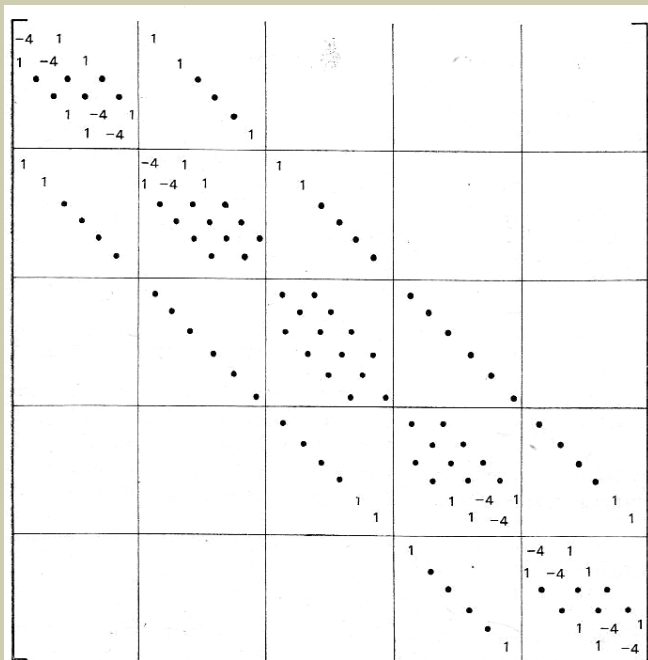
$$(\Phi_{i+1,j} + \Phi_{i-1,j} + \Phi_{i,j+1} + \Phi_{i,j-1}) - 4\Phi_{i,j} = \Delta^2 \rho_{i,j} \quad (292)$$

jeśli siatka ma rozmiar $I \times J$ to możemy $\Phi_{i,j}$ zastąpić wektorem u_k o rozmiarze $I \cdot J$

$$u_k = u_{i \cdot J + j} = \Phi_{i,j} \quad (293)$$

i podobnie

$$w_k = w_{i \cdot J + j} = -\Delta^2 \rho_{i,j} \quad (294)$$



Macierze powstające w rachunku różnic skończonych

Przypomnijmy jak to było przy metodzie niejawnej (Cranka-Nicholsona) dla równania dyfuzji

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\kappa \Delta t}{2\Delta^2} (u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) + \frac{\kappa \Delta t}{2\Delta^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \quad (295)$$

czyli (podstawiając $\alpha = \kappa \Delta t / 2\Delta^2$):

$$-\alpha u_{j+1}^{n+1} + (1 + 2\alpha) u_j^{n+1} - \alpha u_{j-1}^{n+1} = u_j^n + \alpha (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) = w_j \quad (296)$$

otrzymujemy do rozwiązania równanie z macierzą trójkątniową, a dla większej liczby wymiarów jakąś inną – ale dalej rzadką.

Rozwiązanie rekurencyjne równania z macierzą trójkątniową

Mamy układ równań

$$\alpha_j u_{j+1} + \beta_j u_j + \gamma_j u_{j-1} = w_j \quad (297)$$

dla $1 < j < J$, z warunkami brzegowymi

$$\alpha_1 u_2 + \beta_1 u_1 = w_1 \quad (298)$$

$$\gamma_J u_{J-1} + \beta_J u_J = w_J$$

i szukamy rozwiązania, w którym mając u_j możemy wyliczyć u_{j+1} , czyli poszukujemy takich x_j i y_j , że

$$u_{j+1} = x_j u_j + y_j \quad (299)$$

podstawiając u_{j+1} mamy

$$\alpha_j (x_j u_j + y_j) + \beta_j u_j + \gamma_j u_{j-1} = w_j \quad (300)$$

czyli

$$u_j = \frac{-\gamma_j}{\alpha_j x_j + \beta_j} u_{j-1} + \frac{w_j - \alpha_j y_j}{\alpha_j x_j + \beta_j} \quad (301)$$

Rozwiązanie rekurencyjne równania z macierzą trójkątnową

ale chcemy, żeby też

$$u_j = x_{j-1}u_{j-1} + y_{j-1} \quad (302)$$

co daje

$$\begin{aligned} x_{j-1} &= \frac{-\gamma_j}{\alpha_j x_j + \beta_j} \\ y_{j-1} &= \frac{w_j - \alpha_j y_j}{\alpha_j x_j + \beta_j} \end{aligned} \quad (303)$$

dla wszystkich $j > 1$.

Warunki brzegowe dają

$$\begin{aligned} x_{J-1} &= \frac{-\gamma_J}{\beta_J} = \frac{a'}{b'\Delta + a'} \\ y_{J-1} &= \frac{w_J}{\beta_J} = \frac{c'\Delta}{b'\Delta + a'} \end{aligned} \quad (304)$$

oraz

$$u_1 = \frac{w_1 - \alpha_1 y_1}{\beta_1 + \alpha_1 x_1} = \frac{-c\Delta + ay_1}{a - b\Delta - ax_1} \quad (305)$$

Rozwiązanie rekurencyjne równania z macierzą trójkątną

często mamy dwa szczególne przypadki

- albo u jest określone na brzegu ($a' = 0$), czyli $x_{J-1} = 0$ i $y_{J-1} = u_J$
- albo pochodna na brzegu znika ($b' = 0$), czyli $x_{J-1} = 1$ i $y_{J-1} = 0$

„Dokładne” rozwiązanie równania Poissona

Ogólnie równania eliptyczne prowadzą do trudnych i czasochłonnych układów równań, ale do równania Poissona można zastosować szczególne metody rozwiązywania.

Weźmy równanie Poissona w dwóch wymiarach

$$(\Phi_{i+1,j} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i-1,j}) + (\Phi_{i,j+1} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i,j-1}) = \Delta^2 \rho_{i,j} \quad (306)$$

oznaczymy przez P pięciopunktowy operator po lewej stronie

$$P\Phi_{i,j} = (\Phi_{i+1,j} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i-1,j}) + (\Phi_{i,j+1} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i,j-1}) \quad (307)$$

i zauważmy, że mod Fouriera

$$s_{i,j}(k, l) = \hat{\Phi}(k, l) \sin \frac{\pi k j}{J} \sin \frac{\pi l i}{I} \quad (308)$$

jest funkcją własną operatora P dla całkowitych (k, l)

„Dokładne” rozwiązanie równania Poissona

$$\begin{aligned}
 P s_{i,j}(k, l) &= \quad (309) \\
 &= \hat{\Phi}(k, l) \sin \frac{\pi k j}{J} \left[\sin \frac{\pi l(i+1)}{I} - 2 \sin \frac{\pi l i}{I} + \sin \frac{\pi l(i-1)}{I} \right] \\
 &+ \hat{\Phi}(k, l) \sin \frac{\pi l i}{I} \left[\sin \frac{\pi k(j+1)}{J} - 2 \sin \frac{\pi k j}{J} + \sin \frac{\pi k(j-1)}{J} \right] \\
 &= \hat{\Phi}(k, l) \sin \frac{\pi k j}{J} \left[2 \cos \frac{\pi l}{I} \sin \frac{\pi l i}{I} - 2 \sin \frac{\pi l i}{I} \right] \\
 &+ \hat{\Phi}(k, l) \sin \frac{\pi l i}{I} \left[2 \cos \frac{\pi k}{J} \sin \frac{\pi k j}{J} - 2 \sin \frac{\pi k j}{J} \right]
 \end{aligned}$$

a stąd

$$P s_{i,j}(k, l) = \left(2 \cos \frac{\pi l}{I} + 2 \cos \frac{\pi k}{J} - 4 \right) s_{i,j}(k, l) \quad (310)$$

gdzie wartości własne do funkcji własnych $s_{i,j}(k, l)$ wynoszą

$$\alpha_{kl} = 2 \cos \frac{\pi l}{I} + 2 \cos \frac{\pi k}{J} - 4 \quad (311)$$

„Dokładne” rozwiązanie równania Poissona

Możemy równanie Poissona rozwiązać dla każdej funkcji własnej oddzielnie (i na koniec zsumować rozwiązania), co więcej – wykorzystując symetrię operatora Laplace’a – możemy to zrobić dla każdego wymiaru oddzielnie. W efekcie otrzymujemy rozwiązanie w pięciu krokach

1) rozkład źródeł względem jednego wymiaru

$$\hat{\rho}_i(k) = \frac{2}{J} \sum_{j=1}^J \rho_{i,j} \sin \frac{\pi k j}{J} \quad (312)$$

2) rozkład względem drugiego wymiaru

$$\hat{\rho}(k, l) = \frac{2}{I} \sum_{i=1}^I \hat{\rho}_i(k) \sin \frac{\pi l i}{I} \quad (313)$$

3) dla każdego modu Fouriera liczymy amplitudę potencjału

$$\hat{\Phi}(k, l) = \frac{\hat{\rho}(k, l) \Delta^2}{2 \cos \frac{\pi k}{J} + 2 \cos \frac{\pi l}{I} - 4} \quad (314)$$

„Dokładne” rozwiązanie równania Poissona

4) synteza dla jednego wymiaru

$$\hat{\Phi}_i(k) = \sum_{l=1}^I \hat{\Phi}(k, l) \sin \frac{\pi l i}{I} \quad (315)$$

5) i względem drugiego wymiaru

$$\Phi_{ij} = \sum_{k=1}^J \hat{\Phi}_i(k) \sin \frac{\pi k j}{J} \quad (316)$$

„Dokładne” rozwiązanie równania Poissona

Dla jednego wymiaru mamy tylko trzy kroki

1) rozkład źródeł

$$\hat{\rho}(k) = \frac{2}{J} \sum_{j=1}^J \rho_j \sin \frac{\pi k j}{J} \quad (317)$$

2) dla każdego modu Fouriera liczymy amplitudę potencjału

$$\hat{\Phi}(k) = \frac{\hat{\rho}(k) \Delta^2}{2 \cos \frac{\pi k}{J} - 2} \quad (318)$$

3) i synteza

$$\Phi_j = \sum_{k=1}^J \hat{\Phi}(k) \sin \frac{\pi k j}{J} \quad (319)$$

„Dokładne” rozwiązanie równania Poissona

Warunki brzegowe wymuszają jakie mamy funkcje własne. To co powyżej to jest dla stałego (zerowego) potencjału na brzegu.

Dla np. znikania pochodnej potencjału na brzegu mamy

$$\Phi_j = \frac{1}{2}\hat{\Phi}(0) + \sum_{k=1}^{J-1} \hat{\Phi}(k) \cos \frac{\pi k j}{J} \quad (320)$$

dla syntezy i

$$\hat{\rho}(k) = \frac{2}{J} \sum_{j=1}^{J-1} \rho_j \cos \frac{\pi k j}{J} \quad (321)$$

dla analizy.

„Dokładne” rozwiązanie równania Poissona

Przy okresowych warunkach brzegowych musimy użyć szeregu z sinusami i cosinusami. Dla kroku syntezy

$$\Phi_j = \frac{1}{2}\hat{\Phi}^c(0) + \sum_{k=1}^{J/2-1} \hat{\Phi}^c(k) \cos \frac{2\pi k j}{J} + \hat{\Phi}^s(k) \sin \frac{2\pi k j}{J} \quad (322)$$

i dla analizy

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^c(k) &= \frac{2}{J} \sum_{j=1}^{J-1} \rho_j \cos \frac{2\pi k j}{J} \\ \hat{\rho}^s(k) &= \frac{2}{J} \sum_{j=1}^{J-1} \rho_j \sin \frac{2\pi k j}{J} \end{aligned} \quad (323)$$

Dokładne rozwiązanie ogólnego równania macierzowego

Mamy układ równań

$$\begin{array}{cccccc}
 a_{11}u_1 & +a_{12}u_2 & +\cdots & +a_{1n}u_n & = & w_1 \\
 a_{21}u_1 & +a_{22}u_2 & +\cdots & +a_{2n}u_n & = & w_2 \\
 & & \cdots & & & \\
 a_{i1}u_1 & +a_{i2}u_2 & +\cdots & +a_{in}u_n & = & w_i \\
 & & \cdots & & & \\
 a_{n1}u_1 & +a_{n2}u_2 & +\cdots & +a_{nn}u_n & = & w_n
 \end{array} \tag{324}$$

w metodzie eliminacji Gaussa bierzemy np. pierwsze równanie i dodając z odpowiednim czynnikiem do pozostałych zerujemy np. pierwszą kolumnę

$$\begin{array}{cccccc}
 a_{11}u_1 & +a_{12}u_2 & a_{13}u_3 & +\cdots & +a_{1n}u_n & = & w_1 \\
 & a'_{22}u_2 & +a'_{23}u_3 & +\cdots & +a'_{2n}u_n & = & w'_2 \\
 & a'_{32}u_2 & +a'_{33}u_3 & +\cdots & +a'_{3n}u_n & = & w'_3 \\
 & & \cdots & & & & \\
 & a'_{n2}u_2 & +a'_{n3}u_3 & +\cdots & +a'_{nn}u_n & = & w'_n
 \end{array} \tag{325}$$

Dokładne rozwiązanie ogólnego równania macierzowego

gdzie

$$a'_{ij} = a_{ij} - \frac{a_{i1}}{a_{11}}a_{1j} \quad , \quad w'_i = w_i - \frac{a_{i1}}{a_{11}}w_1 \quad (326)$$

po powtórzeniu tej procedury $n - 1$ razy otrzymujemy

$$\begin{array}{cccccc} a_{11}u_1 & +a_{12}u_2 & +a_{13}u_3 & +\cdots & +a_{1n}u_n & = w_1 \\ & a'_{22}u_2 & +a'_{23}u_3 & +\cdots & +a'_{2n}u_n & = w'_2 \\ & & a''_{33}u_3 & +\cdots & +a''_{3n}u_n & = w''_3 \\ & & & \cdots & & \\ & & & & a^{(n-1)}_{nn}u_n & = w^{(n-1)}_n \end{array} \quad (327)$$

i teraz „od tyłu” kolejno obliczamy u_n , u_{n-1} itd. do u_1

Metoda Gaussa odpowiada rozkładowi macierzy A na iloczyn dwóch trójkątnych – górnej i dolnej $A = LU$.

Do rozwiązania potrzeba $\frac{2}{3}n^3$ operacji.

eliminacja Gaussa

				j			k			
	0									
	0	0								
	0	0		a_{jj}			a_{jk}			
i				a_{ij}			a_{ik}			

zerujemy a_{ij} dla $i > j$

$$a_{ik} = a_{ik} - \frac{a_{ij}}{a_{jj}} a_{jk}$$

oraz

$$w_i = w_i - \frac{a_{ij}}{a_{jj}} w_j$$

na koniec

$$u_i = \frac{w_i - \sum_{k=i+1}^N a_{ik} u_k}{a_{ii}}$$

Iteracyjne metody rozwiązywania równań macierzowych

Mamy równanie

$$Au = w \quad (328)$$

założmy jakieś rozwiązanie $u = u^{(0)}$ i poprzez liniową operację wyliczamy kolejne przybliżenia $u^{(p)}$

$$u^{(p+1)} = Pu^{(p)} + c \quad (329)$$

jeśli taki proces jest zbieżny, czyli

$$\lim_{p \rightarrow \infty} u^{(p)} = Pu^{(p)} + c \quad (330)$$

to graniczny wektor $u^{(\infty)}$ spełnia równanie

$$(I - P)u^{(\infty)} = c \quad (331)$$

Iteracyjne metody rozwiązywania równań macierzowych

jeśli

$$c = Tw \quad (332)$$

to

$$T^{-1}(I - P) = A \quad (333)$$

czyli

$$P = I - TA \quad (334)$$

Zauważmy, że procedura ta odpowiada całkowaniu równania

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla^2 u = \rho \quad (335)$$

w jawnym schemacie

$$u^{(p+1)} = u^{(p)} + \Delta t \Delta'' u^{(p)} + \rho \Delta t \quad (336)$$

Konstrukcja i własności macierzy iteracyjnej

Trzeba zapewnić zbieżność procesu iteracji, najlepiej dla każdego $u^{(0)}$ i żeby zbieżność osiągana była jak najmniejszą ilością iteracji.
i jeśli u to rozwiązanie dokładne, to oczywiście chcemy, żeby

$$u = Pu + c \quad (337)$$

zajmijmy się „odchyłkami” od rozwiązania dokładnego

$$\epsilon^{(p)} = u^{(p)} - u \quad (338)$$

wtedy

$$\epsilon^{(p+1)} = P\epsilon^{(p)} \quad (339)$$

żeby proces był zbieżny potrzeba, żeby

$$|\epsilon^{(p+1)}| < |\epsilon^{(p)}| \quad (340)$$

lub tzw. norma spektralna

$$\|P\| = \frac{|P\epsilon^{(p)}|}{|\epsilon^{(p)}|} < 1 \quad (341)$$

Konstrukcja i własności macierzy iteracyjnej

jeśli s_i to wektory własne P i ρ_i odpowiadające im wartości własne, to możemy zapisać

$$\epsilon^{(0)} = \sum_{i=1}^n \alpha_i s_i \quad (342)$$

i po p iteracjach mamy

$$\epsilon^{(p)} = P\epsilon^{(p-1)} = P^p \epsilon^{(0)} \quad (343)$$

podstawiając rozwinięcie $\epsilon^{(0)}$

$$\epsilon^{(p)} = P^p \sum_{i=1}^n \alpha_i s_i = \sum_{i=1}^n \alpha_i \rho_i^p s_i \quad (344)$$

w granicy dużych p

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \epsilon^{(p)} = \alpha_m \rho_m^p s_m \quad (345)$$

gdzie m spełnia

$$|\rho_m| = \max(|\rho_1|, |\rho_2|, \dots, |\rho_n|) \quad (346)$$

Konstrukcja i własności macierzy iteracyjnej

Dla przedstawienia metod iteracyjnych macierz A separuje się na macierze diagonalną D , trójkątną górną U i dolną L

$$A = D + U + L \quad (347)$$

dotatkowo zakłada się, że elementy D są niezerowe, i przepisuje się zasadnicze równanie do postaci

$$A'u = w' \quad (348)$$

gdzie

$$A' = D^{-1}A \quad (349)$$

wtedy

$$A' = I + U' + L' \quad (350)$$

macierz

$$B = -(U' + L') \quad (351)$$

nazywa się macierzą blokową Jacobiego – zauważmy, że wartości własne A' i B (λ_i i μ_i) spełniają zależność $\lambda_i + \mu_i = 1$

Konstrukcja i własności macierzy iteracyjnej

Proste schematy iteracyjne otrzymamy przez analogię do ewolucji układu

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -A'u + w' \quad (352)$$

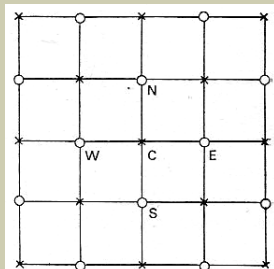
z „krokiem” iteracji $\Delta t = \omega$, czyli

$$u^{(p+1)} = u^{(p)} - \omega A'u^{(p)} + \omega w' \quad (353)$$

lub

$$u^{(p+1)} = (I - \omega A')u^{(p)} + \omega w' \quad (354)$$

dla przykładu – równanie Poissona na siatce 2D



Konstrukcja i własności macierzy iteracyjnej

$$u_C - \frac{1}{4}(u_N + u_S + u_E + u_W) = \frac{1}{4}\rho_C\Delta^2 = w_C \quad (355)$$

wartości własne przy siatce $I \times J$ spełniają

$$1 - \frac{1}{2} \cos \frac{\pi}{J} - \frac{1}{2} \cos \frac{\pi}{I} \leq \lambda_i \leq 1 \quad (356)$$

w metodzie iteracyjnej mamy

$$u_C^{(p+1)} = (1 - \omega)u_C^{(p)} + \frac{1}{4}\omega(u_N^{(p)} + u_S^{(p)} + u_E^{(p)} + u_W^{(p)}) + \omega w_C \quad (357)$$

a to ma postać równania dyfuzji w „krokiem czasowym” $\omega/4$, i warunek zbieżności wymaga żeby

$$0 \leq \omega \leq 1 \quad (358)$$

Metoda Jacobiego

jeśli położymy $\omega = 1$ to

$$u^{(p+1)} = (I - A')u^{(p)} + w' \quad (359)$$

lub

$$u^{(p+1)} = -(L' + U')u^{(p)} + w' \quad (360)$$

i szybkość zbieżności

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \delta \epsilon^{(p)} = \epsilon^{(p-1)} - \epsilon^{(p)} = (\rho_m - 1)\epsilon^{(p)} \quad (361)$$

czyli

$$\frac{|\delta \epsilon^{(p)}|}{|\epsilon^{(p)}|} = |\rho_m - 1| \quad (362)$$

Metoda Jacobiego

dla równania Poissona na siatce $I \times J$

$$\mu_m = \frac{1}{2} \cos \frac{\pi}{J} + \frac{1}{2} \cos \frac{\pi}{I} \quad (363)$$

dla dużych I i J możemy przybliżyć

$$\mu_m \simeq 1 - \frac{\pi^2}{4J^2} - \frac{\pi^2}{4I^2} \quad (364)$$

i w końcu zbieżność

$$\frac{|\delta \epsilon^{(p)}|}{|\epsilon^{(p)}|} = \frac{\pi^2}{4J^2} + \frac{\pi^2}{4I^2} \quad (365)$$

Iteracja Gaussa-Seidla

jeśli liczymy punkty na siatce po kolei, to dochodząc do C mamy już policzone nowe wartości w punktach S i W

$$u_C^{(p+1)} = \frac{1}{4}(u_N^{(p)} + u_S^{(p+1)} + u_E^{(p)} + u_W^{(p+1)}) + w'_C \quad (366)$$

w ujęciu macierzowym to ma postać

$$(I + L')u^{(p+1)} = -U'u^{(p)} + w' \quad (367)$$

lub

$$u^{(p+1)} = -(I + L')^{-1}U'u^{(p)} + (I + L')^{-1}w' \quad (368)$$

szybkość zbieżności jest lepsza niż w metodzie Jacobbiego, ale niewiele

Metoda sukcesywnej nadrelaksacji

weźmy metodę Gaussa-Seidla i spróbujemy dobrać optymalny parametr relaksacji ω

$$(I + \omega L')u^{(p+1)} = (1 - \omega)Iu^{(p)} - \omega U'u^{(p)} + \omega w' \quad (369)$$

lub

$$u^{(p+1)} = (I + \omega L')^{-1}[(1 - \omega)I - \omega U']u^{(p)} + (I + \omega L')^{-1}\omega w' \quad (370)$$

optymalny czynnik relaksacji

$$\omega_b = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \mu_m^2}} \quad (371)$$

i sama szybkość zbieżności

$$\frac{|\delta\epsilon^{(p)}|}{|\epsilon^{(p)}|} = \sqrt{1 - \mu_m^2} \quad (372)$$

Metoda sukcesywnej nadrelaksacji

dla równania Poissona algorytm ma postać

$$u_C^{(p+1)} = (1 - \omega)u_C^{(p)} + \frac{1}{4}\omega(u_N^{(p)} + u_S^{(p+1)} + u_E^{(p)} + u_W^{(p+1)}) + \omega w_C \quad (373)$$

i podobnie dla dużych I i J szybkość zbieżności

$$\frac{|\delta\epsilon^{(p)}|}{|\epsilon^{(p)}|} = \pi\sqrt{\frac{1}{2J^2} + \frac{1}{2I^2}} \quad (374)$$

Metoda cykliczna Czebyszewa

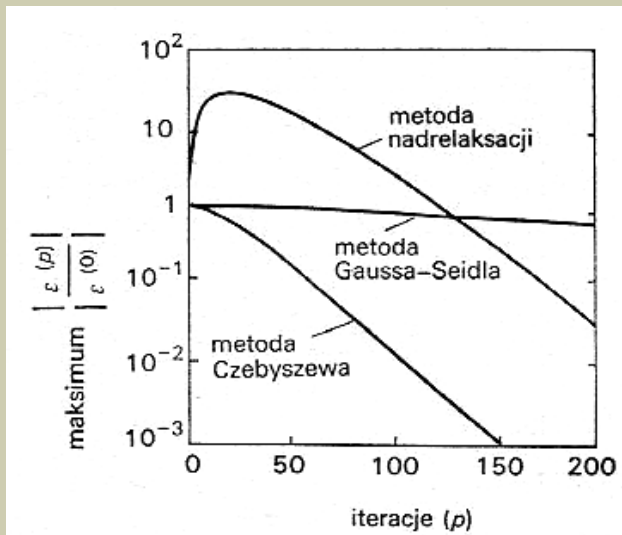
najpierw obliczamy $u^{(p+1)}$ w punktach parzystych, w drugim cyklu w nieparzystych

$$u_{\nu}^{(p+1)} = -\omega_p(L' + U')u_{1-\nu}^{(p)} + (1 - \omega_p)u_{\nu}^{(p-1)} + \omega_p w'_{\nu} \quad (375)$$

gdzie $\nu = 0$ dla parzystych p i $\nu = 1$ dla nieparzystych
na dodatek zmieniamy ω_p na każdym kroku p

$$\begin{aligned} \omega_0 &= 1 \\ \omega_1 &= \frac{1}{1 - \mu_m^2/2} \\ \omega_{p+1} &= \frac{1}{1 - \mu_m^2 \omega_p/4} \end{aligned} \quad (376)$$

szybkość zbieżności metod iteracyjnych



istnieją też metody z przemiennym kierunkiem iteracji.

iteracyjne rozwiązywanie r. Poissona

r. Poissona

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = \rho$$

w postaci różnicowej

$$\Phi_{j-1} - 2\Phi_j + \Phi_{j+1} = \Delta^2 \rho_j$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \\ \Phi_5 \end{bmatrix} = \Delta^2 \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \\ \rho_4 \\ \rho_5 \end{bmatrix}$$

macierz iteracyjna

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

macierz iteracyjna

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$D = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

macierz iteracyjna

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$D^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

macierz iteracyjna

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$D^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$D^{-1}A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

macierz iteracyjna

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$D^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$D^{-1}A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$I - D^{-1}A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

R. Schrödingera

w jednym wymiarze

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi$$

schemat Cranka-Nicholsona

$$\begin{aligned} \psi_j^{n+1} = \psi_j^n &+ \frac{i\Delta t}{2\Delta^2} (\psi_{j-1}^{n+1} - 2\psi_j^{n+1} + \psi_{j+1}^{n+1} + \psi_{j-1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j+1}^n) \\ &- \frac{iV_j\Delta t}{2} (\psi_j^{n+1} + \psi_j^n) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} -\frac{i\Delta t}{2\Delta^2} \psi_{j-1}^{n+1} + \left(1 + \frac{i\Delta t}{\Delta^2} + \frac{iV_j\Delta t}{2} \right) \psi_j^{n+1} - \frac{i\Delta t}{2\Delta^2} \psi_{j+1}^{n+1} = \\ = \frac{i\Delta t}{2\Delta^2} \psi_{j-1}^n + \left(1 - \frac{i\Delta t}{\Delta^2} - \frac{iV_j\Delta t}{2} \right) \psi_j^n + \frac{i\Delta t}{2\Delta^2} \psi_{j+1}^n \end{aligned}$$

R. Schrödingera

np. w przestrzeni $X = [0, 10]$, weźmy $N = 1000$ ($\Delta = 10/N$) z warunkami początkowymi

$$\psi(0) = e^{-2(j-j_0)^2\Delta^2} e^{ik(j-j_0)\Delta}$$

i do rozwiązania na każdym kroku czasowym układ równań

$$\begin{bmatrix} d_0 & a & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ b & d_1 & a & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & d_{N-2} & a \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & b & d_{N-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_0^{n+1} \\ \psi_1^{n+1} \\ \vdots \\ \psi_{N-2}^{n+1} \\ \psi_{N-1}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ \vdots \\ w_{N-2} \\ w_{N-1} \end{bmatrix}$$

$$d_j = 1 + i[V(j\Delta)/2 + 1/\Delta^2]\Delta t$$

$$a = b = -i\Delta t/\Delta^2/2$$

$$w_j = \psi_j^n \{1 - i[1/\Delta^2 + V(j\Delta)/2]\Delta t\} + i(\psi_{j-1}^n + \psi_{j+1}^n)\Delta t/\Delta^2/2$$

R. Schrödingera

$$d_j = 1 + i[V(j\Delta)/2 + 1/\Delta^2]\Delta t$$

$$a = b = -i\Delta t/\Delta^2/2$$

$$w_j = \psi_j^n \{1 - i[1/\Delta^2 + V(j\Delta)/2]\Delta t\} + i(\psi_{j-1}^n + \psi_{j+1}^n)\Delta t/\Delta^2/2$$

pamiętamy

$$u_j = x_{j-1}u_{j-1} + y_{j-1}$$

$$x_{j-1} = \frac{-\gamma_j}{\alpha_j x_j + \beta_j} \quad y_{j-1} = \frac{w_j - \alpha_j y_j}{\alpha_j x_j + \beta_j}$$

dla wszystkich $j > 1$.

Warunki brzegowe

$$x_{J-1} = \frac{-\gamma_J}{\beta_J} \quad y_{J-1} = \frac{w_J}{\beta_J}$$

oraz

$$u_1 = \frac{w_1 - \alpha_1 y_1}{\beta_1 + \alpha_1 x_1}$$

R. Schrödingera

$$d_j = 1 + i[V(j\Delta)/2 + 1/\Delta^2]\Delta t$$

$$a = b = -i\Delta t/\Delta^2/2$$

$$w_j = \psi_j^n \{1 - i[1/\Delta^2 + V(j\Delta)/2]\Delta t\} + i(\psi_{j-1}^n + \psi_{j+1}^n)\Delta t/\Delta^2/2$$

czyli

$$\psi_j = x_{j-1}\psi_{j-1} + y_{j-1}$$

$$x_{j-1} = \frac{-b}{ax_j + d_j} \quad y_{j-1} = \frac{w_j - ay_j}{ax_j + d_j}$$

dla wszystkich $j > 0$.

Warunki brzegowe

$$x_{J-2} = \frac{-b}{d_{N-1}} \quad y_{J-2} = \frac{w_{N-1}}{d_{N-1}}$$

oraz

$$\psi_0 = \frac{w_0 - ay_0}{d_0 + ax_0}$$

Ruch pojedynczej cząstki w polu zachowawczym

Stan cząstki w polu zachowawczym $E = -\nabla\Phi$ określa wektor stanu – położenia $x = (x, y, z)$ i prędkości $v = (v_x, v_y, v_z)$,
Współrzędne spełniają równania ruchu

$$\frac{dx}{dt} = v \quad (377)$$

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{e}{m}\nabla\Phi \quad (378)$$

potencjał Φ zależy tylko od położenia w przestrzeni (i czasu) – szczególnie stosowny jest schemat skokowy, bo na każdym kroku wystarczy położenia i prędkości wyliczać naprzemiennie co drugi krok

$$x^n = x^{n-2} + 2\Delta t v^{n-1} \quad (379)$$

$$v^{n+1} = v^{n-1} - 2\Delta t \frac{e}{m} \nabla\Phi(x^n, t^n) \quad (380)$$

Ruch pojedynczej cząstki w polu zachowawczym

Ruch cząstki w polu zachowawczym ma własności odwracalności w czasie i zachowania energii. Odwracalność schematu różnicowego możemy sprawdzić postawiając $\Delta t' = -\Delta t$

$$\begin{aligned} v^{n-1} &= v^{n+1} - 2\Delta t' \frac{e}{m} \nabla \Phi(x^n, t^n) \\ x^{n-2} &= x^n + 2\Delta t' v^{n-1} \end{aligned} \quad (381)$$

sprawdźmy zachowanie energii – podnosząc do kwadratu równanie

$$v^{n+1} - \Delta t \frac{e}{m} E^n = v^{n-1} + \Delta t \frac{e}{m} E^n \quad (382)$$

to różnica energii kinetycznej pomiędzy kolejnymi krokami

$$\frac{1}{2}m(v^{n+1})^2 - \frac{1}{2}m(v^{n-1})^2 = e(v^{n+1} - v^{n-1}) \cdot E^n \Delta t \quad (383)$$

Ruch pojedynczej cząstki w polu zachowawczym

i w końcu

$$\frac{1}{2}m(v^{n+1})^2 - \frac{1}{2}m(v^{n-1})^2 = \frac{1}{2}e(x^{n+2} - x^{n-2}) \cdot E^n \quad (384)$$

prawa strona jest aproksymacją całki

$$\int_{n-1}^{n+1} E^n \cdot dx \quad (385)$$

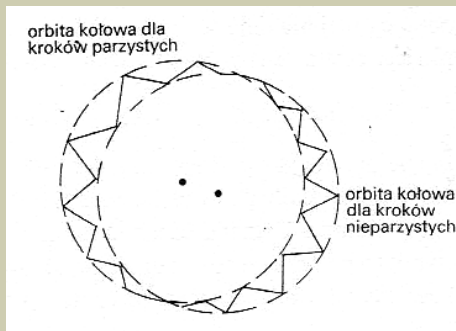
z dokładnością do drugiego rzędu.

Ruch cząstki w prostym polu magnetycznym

cząstka o masie m i ładunku e spełnia równania

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= v \\ \frac{dv}{dt} &= \frac{e}{m} v \times B\end{aligned}\tag{386}$$

i zastosowanie metody skokowej może napotkać na trudności



Ruch cząstki w prostym polu magnetycznym

Rozważmy zagadnienie dwuwymiarowe stosując metodę niejawną drugiego rzędu. Niech prędkość $v = (v_x, v_y, 0)$ i pole magnetyczne $B = (0, 0, B_z)$, wtedy częstość cyklotronowa

$$\Omega = \frac{eB_z}{m} \quad (387)$$

w ogólnym przypadku $\Omega = \Omega(x, t)$

jeśli wprowadzimy zespolone współrzędne $\hat{v} = v_x + iv_y$ i $\hat{x} = x + iy$ to

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \hat{v}, \quad \frac{d\hat{v}}{dt} = -i\Omega\hat{v} \quad (388)$$

i stosując dla prędkości niejawną metodę mamy

$$\hat{v}^{n+1} - \hat{v}^n = -i\phi(\hat{v}^{n+1} + \hat{v}^n) \quad (389)$$

gdzie $\phi = \Omega\Delta t/2$

Ruch cząstki w prostopadłym polu magnetycznym

można wyliczyć wprost, że

$$\hat{v}^{n+1} = \frac{1 - \phi^2 - i2\phi}{1 + \phi^2} \hat{v}^n \quad (390)$$

jeśli to rozpaść na rzeczywiste i urojone składniki

$$v_x^{n+1} = \frac{1 - \phi^2}{1 + \phi^2} v_x^n + \frac{2\phi}{1 + \phi^2} v_y^n \quad (391)$$

$$v_y^{n+1} = \frac{1 - \phi^2}{1 + \phi^2} v_y^n - \frac{2\phi}{1 + \phi^2} v_x^n$$

aby otrzymać wycelowane w czasie równania to kąt ϕ (pole B_z) powinien być wybrany w połowie kroku

$$\phi = \phi^{n+1/2} = \frac{\Delta t}{2} \frac{e}{m} B_z (x^n + \frac{\Delta t}{2} v^n, t^n + \frac{\Delta t}{2}) \quad (392)$$

Ruch cząstki w prostym polu magnetycznym

mając prędkości można wyliczyć położenie

$$x^{n+1} = x^n + (v^n + v^{n+1}) \frac{\Delta t}{2} \quad (393)$$

metoda jest stabilna dla dużego $\phi \gg 1$ (nawet dla dużego kroku czasowego), a również

$$|\hat{v}^{n+1}|^2 = |\hat{v}^n|^2 \cdot \frac{1 - \phi^2 - i2\phi}{1 + \phi^2} \cdot \frac{1 - \phi^2 + i2\phi}{1 + \phi^2} \quad (394)$$

czyli

$$|\hat{v}^{n+1}|^2 = |\hat{v}^n|^2 \quad (395)$$

i schemat zachowuje tożsamościowo energię.

Obliczenia w schemacie cząstka-pole

Można uniknąć śledzenia każdej pary N^2 oddziaływań wprowadzając średnią siłę (pole) od cząstek zespołu.
drugie z równań

$$\begin{aligned}\frac{dx_\mu}{dt} &= v_\mu \\ \frac{dv_\mu}{dt} &= \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \frac{e_\mu e_\nu (x_\mu - x_\nu)}{m_\mu |x_\mu - x_\nu|^3}\end{aligned}\tag{396}$$

zastępujemy

$$\frac{dv_\mu}{dt} = \frac{e_\mu}{m_\mu} E(x_\mu)\tag{397}$$

gdzie

$$E(x) = \sum_{\nu=1}^N \frac{e_\nu (x - x_\nu)}{|x - x_\nu|^3}\tag{398}$$

jest określone w każdym punkcie siatki

Obliczenia w schemacie cząstka-pole

zamiast pola wektorowego łatwiej wyznaczyć potencjał, i wtedy

$$\frac{dv_\mu}{dt} = \frac{e_\mu}{m_\mu} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial x_\mu} \quad (399)$$

i sam potencjał

$$\Phi(x) = \sum_{\nu=1}^N \Phi(x_\nu) = \sum_{\nu=1}^N \frac{e_\nu}{|x - x_\nu|} \quad (400)$$

jeśli same cząstki zastąpimy rozkładem ich gęstości ρ , to potencjał można wyliczać z równania Poissona

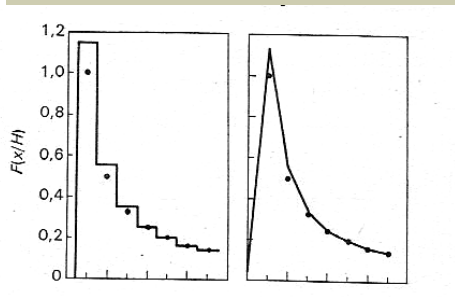
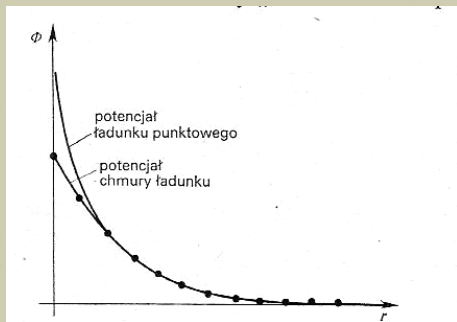
$$\nabla^2 \Phi = 4\pi\rho \quad (401)$$

Obliczenia w schemacie cząstka-pole

aby zapewnić dokładność takiego podejścia jak w schemacie cząstka-cząstka krok siatki musi być mniejszy od średniej odległości pomiędzy cząstkami

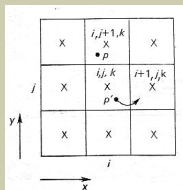
$$\Delta \ll \frac{L}{N^{1/3}} \quad (402)$$

efektywnie zastępujemy potencjał punktowej cząstki potencjałem „chmury” o objętości Δ^3



Obliczenia w schemacie cząstka-pole

wraz ze wzrostem ilości cząstek na komórkę siatki zwiększa się prawdopodobieństwo że cząstka „przeskoczy” do sąsiedniej komórki



sytuacja się dopiero „poprawia” dla dużej gęstości cząstek

$$\Delta \gg \frac{L}{N^{1/3}} \quad (403)$$

W sytuacjach pośrednich można podzielić przestrzeń na bliską (tzw. kula Debye’a), gdzie cząstki oddziałują ze sobą, i daleką, gdzie cząstka oddziałuje z zespołem.

Bezzderzeniowy model „cząstki w komórce”

Dla każdej cząstki μ pamiętamy jej położenie i prędkość $(x_\mu, y_\mu, v_{x_\mu}, v_{y_\mu})$, przestrzeń w której znajdują się cząstki dzielimy na komórki (np. $I \times j$) i każdej komórce (i, j) przypisujemy własności cząstek, które się w niej znajdują

$$i = \left\lfloor \frac{x_\mu^{n-1}}{\Delta} \right\rfloor, \quad j = \left\lfloor \frac{y_\mu^{n-1}}{\Delta} \right\rfloor \quad (404)$$

jeśli wyliczymy pole w komórce zajmowanej przez cząstkę μ

$$E_x^{n-1}{}_{ij} = - \frac{\Phi_{i+1,j}^{n-1} - \Phi_{i-1,j}^{n-1}}{2\Delta} \quad (405)$$

$$E_y^{n-1}{}_{ij} = - \frac{\Phi_{i,j+1}^{n-1} - \Phi_{i,j-1}^{n-1}}{2\Delta}$$

to użyjemy je do wyliczenia nowych współrzędnych cząstki μ

$$v_\mu^n = v_\mu^{n-2} + \frac{e_\mu}{m_\mu} 2\Delta t E_{ij}^{n-1} \quad (406)$$

$$x_\mu^{n+1} = x_\mu^{n-1} + v_\mu^n 2\Delta t$$

Bezzderzeniowy model „cząstki w komórce”

nową gęstość liczymy z nowych współrzędnych

$$\rho_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{\Delta^2} \sum_{\mu=1}^N e_{\mu} \delta \left(\left\lfloor \frac{x_{\mu}^{n+1}}{\Delta} \right\rfloor - i \right) \delta \left(\left\lfloor \frac{y_{\mu}^{n+1}}{\Delta} \right\rfloor - j \right) \quad (407)$$

i w końcu nowy potencjał z gęstości

$$\Phi_{i+1,j}^{n+1} + \Phi_{i-1,j}^{n+1} + \Phi_{i,j+1}^{n+1} + \Phi_{i,j-1}^{n+1} - 4\Phi_{i,j}^{n+1} = 4\pi\Delta^2\rho_{i,j}^{n+1} \quad (408)$$

Uwagi:

- warunki początkowe
początkowy rozkład cząstek losujemy z zadany rozkładem
- warunki brzegowe
stosowne do problemu, ale ostrożnie z okresowymi
- jednostki

Bezzderzeniowy model „cząstki w komórce”

zwykle stosuje się przeskalowanie

$$\begin{aligned}
 \tilde{x}_\mu &= x_\mu \cdot \frac{1}{\Delta} \\
 \tilde{v}_\mu &= v_\mu \cdot \frac{2\Delta t}{\Delta} \\
 \tilde{E} &= E \cdot \frac{4(\Delta t)^2}{\Delta} \frac{e}{m} \\
 \tilde{\Phi} &= \Phi \cdot \frac{2(\Delta t)^2}{\Delta^2} \frac{e}{m} \\
 \tilde{\rho} &= \rho \cdot \frac{\Delta^2}{4\pi en}
 \end{aligned} \tag{409}$$

wtedy upraszcza się schemat w każdym kroku

Bezzderzeniowy model „cząstki w komórce”

$$i = \lfloor \tilde{x}_\mu^{n-1} \rfloor, \quad j = \lfloor \tilde{y}_\mu^{n-1} \rfloor \quad (410)$$

$$E_x^{\tilde{n}-1}{}_{ij} = -\tilde{\Phi}_{i+1,j}^{n-1} + \tilde{\Phi}_{i-1,j}^{n-1} \quad (411)$$

$$E_y^{\tilde{n}-1}{}_{ij} = -\tilde{\Phi}_{i,j+1}^{n-1} + \tilde{\Phi}_{i,j-1}^{n-1}$$

$$\tilde{v}_\mu^n = \tilde{v}_\mu^{n-2} + \tilde{E}_{i,j}^{n-1}$$

$$\tilde{x}_\mu^{n+1} = \tilde{x}_\mu^{n-1} + \tilde{v}_\mu^n$$

$$\tilde{\rho}_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{n} \sum_{\mu=1}^N \delta(\lfloor \tilde{x}_\mu^{n+1} \rfloor - i) \delta(\lfloor \tilde{y}_\mu^{n+1} \rfloor - j)$$

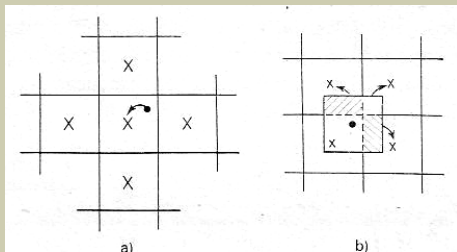
$$\tilde{\Phi}_{i+1,j}^{n+1} + \tilde{\Phi}_{i-1,j}^{n+1} + \tilde{\Phi}_{i,j+1}^{n+1} + \tilde{\Phi}_{i,j-1}^{n+1} - 4\tilde{\Phi}_{i,j}^{n+1} = -\theta \tilde{\rho}_{i,j}^{n+1} \quad (412)$$

$$\theta = \frac{4\pi n e^2}{\Delta^2 m} 2(\Delta t)^2 \quad (413)$$

i dla stabilności metody skokowej potrzeba aby $|\theta| \leq 1/2$

Bezzderzeniowy model „cząstki w komórce”

- ograniczenia
 - mała liczba cząstek, skończony krok (czasowy i przestrzenny),
 - niezachowanie energii
- ten pierwszy problem można częściowo ograniczyć stosując „chmurę” zamiast „cząstkę” w komórce



model PiC 1D

- śledzimy M cząstek (m_μ, x_μ, v_μ) w przestrzeni $[0, N\Delta)$ komórek ($i \in [0, N)$)
- położenie cząstki μ : $i = \left\lfloor \frac{x_\mu^n}{\Delta} \right\rfloor$
- rozkład gęstości: $\rho_i^n = \frac{1}{\Delta} \sum_{\mu=1}^M m_\mu \delta \left(\left\lfloor \frac{x_\mu^n}{\Delta} \right\rfloor - i \right)$
- potencjał: $\Phi_{i-1}^n - 2\Phi_i^n + \Phi_{i+1}^n = \Delta^2 \rho_i^n$

$$\Phi_i = \frac{1}{2} \hat{\Phi}^c(0) + \sum_{k=1}^{N/2-1} \hat{\Phi}^c(k) \cos \frac{2\pi k i}{N} + \hat{\Phi}^s(k) \sin \frac{2\pi k i}{N}$$

$$\hat{\rho}^c(k) = \frac{2}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \rho_i \cos \frac{2\pi k i}{N}$$

$$\hat{\rho}^s(k) = \frac{2}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \rho_i \sin \frac{2\pi k i}{N} \qquad \hat{\Phi}(k) = \frac{\hat{\rho}(k)}{2 - 2 \cos(2\pi k/N)}$$
- przyspieszenie: $a_i^n = -G \frac{\Phi_{i+1}^n - \Phi_{i-1}^n}{2\Delta}$
- nowa prędkość: $v_\mu^{n+1} = v_\mu^{n-1} + 2\Delta t a_i^n$
- nowe położenie: $x_\mu^{n+2} = x_\mu^n + 2\Delta t v_\mu^{n+1}$

FFT

Transformata Fouriera (DFT)

$$\phi_k = \sum_{j=0}^{N-1} \Phi_j e^{\frac{i2\pi kj}{N}} \quad (414)$$

i odwrotna

$$\Phi_j = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \phi_k e^{\frac{-i2\pi kj}{N}} \quad (415)$$

Można to policzyć wprost – wymaga N^2 operacji (sin i cos)

– koncepcja *Danielson&Lanczos (1942)*

też *Gauss (1805)* i *Cooley&Tuke y (1965)* Jeśli podzielić zbiór pomiarów $\{\Phi_j\}$ na pół – na elementy parzyste i nieparzyste $\{\Phi_j\} = \{\Psi_j\} + \{\Omega_j\}$

$$\begin{cases} \Phi_{2j} = \Psi_j \\ \Phi_{2j+1} = \Omega_j \end{cases} \quad (416)$$

FFT

$$\phi_k = \sum_{j=0}^{N-1} \Phi_j e^{\frac{i2\pi kj}{N}} = \quad (417)$$

$$= \sum_{j=0}^{N/2-1} \Phi_{2j} e^{\frac{i2\pi kj}{N/2}} + e^{\frac{i2\pi k}{N}} \sum_{j=0}^{N/2-1} \Phi_{2j+1} e^{\frac{i2\pi kj}{N/2}} = \quad (418)$$

$$= \sum_{j=0}^{N/2-1} \Psi_j e^{\frac{i2\pi kj}{N/2}} + e^{\frac{i2\pi k}{N}} \sum_{j=0}^{N/2-1} \Omega_j e^{\frac{i2\pi kj}{N/2}} = \quad (419)$$

$$= \begin{cases} \psi_k + e^{\frac{i2\pi k}{N}} \omega_k, & k = 0, \dots, N/2 - 1 \\ \psi_k - e^{\frac{i2\pi k}{N}} \omega_k, & k = N/2, \dots, N - 1 \end{cases} \quad (420)$$

FFT

A jak wygląda transformata Fouriera dla $N = 1$?

$$\phi_k = \sum_{j=0}^0 \Phi_j e^{i2\pi kj} = \Phi_k \quad (421)$$

Finalnie mamy rekurencyjny przepis na transformatę Fouriera

- dzielimy zbiór pomiarów na pół (parzyste i nieparzyste) – aż do uzyskania zbiorów jednoelementowych
- dla zbiorów jednoelementowych transformata jest identyczna z pomiarem
- ze zbiorów współczynników Fouriera M elementowych liczymy zbiór współczynników $2M$ elementowy – aż do uzyskania zbioru N elementowego

Uwaga: zbiór pomiarów musi mieć $N = 2^n$ elementów!

Na obrazkach to (algorytm Cooley-Tukey 1965) wygląda tak:

FFT

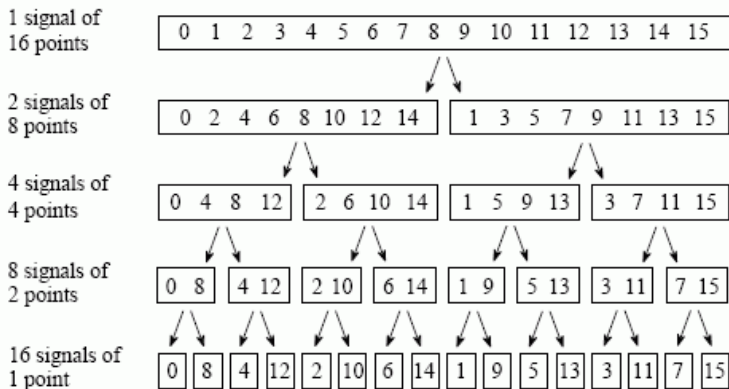


FIGURE 12-2

The FFT decomposition. An N point signal is decomposed into N signals each containing a single point. Each stage uses an *interleave decomposition*, separating the even and odd numbered samples.

FFT

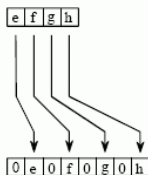
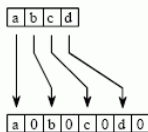
Sample numbers in normal order			Sample numbers after bit reversal	
<i>Decimal</i>	<i>Binary</i>		<i>Decimal</i>	<i>Binary</i>
0	0000		0	0000
1	0001		8	1000
2	0010		4	0100
3	0011		12	1100
4	0100		2	0010
5	0101		10	1010
6	0110		6	0100
7	0111		14	1110
8	1000		1	0001
9	1001		9	1001
10	1010		5	0101
11	1011		13	1101
12	1100		3	0011
13	1101		11	1011
14	1110		7	0111
15	1111		15	1111

FIGURE 12-3

The FFT bit reversal sorting. The FFT time domain decomposition can be implemented by sorting the samples according to bit reversed order.

FFT

Time Domain



Frequency Domain

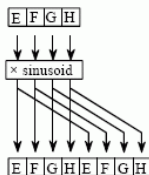
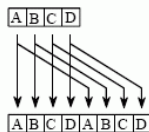


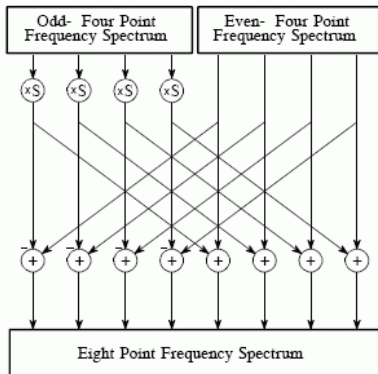
FIGURE 12-4

The FFT synthesis. When a time domain signal is diluted with zeros, the frequency domain is duplicated. If the time domain signal is also shifted by one sample during the dilution, the spectrum will additionally be multiplied by a sinusoid.

FFT

FIGURE 12-5

FFT synthesis flow diagram. This shows the method of combining two 4 point frequency spectra into a single 8 point frequency spectrum. The $\times S$ operation means that the signal is multiplied by a sinusoid with an appropriately selected frequency.



FFT wymaga $N \log_2 N$ operacji

algoritm FFT (Numerical Recipes r. 12.2)

```

/*****/
double sqr(double arg) { return arg*arg; }

void swap(double *a, double *b)
{ double t=*a; *a=*b; *b=t; }

void fft( double data[], int N, int isign ) {
    int n = N << 1;
    int i, j, m;
    double theta, wr, wpr, wpi, wi, wtemp;
    double tempr, tempi, sqrtN;
    int mmax, istep;
    j = 0;          /* bit reversal section */
    for( i = 0; i < n; i += 2 ) {
        if( j > i ) {
            swap( data+j, data+i);
            swap( data+j+1, data+i+1 );
        }
        m = N;
        while( m >= 2 && j >= m ) {
            j -= m;
            m >>= 1;
        }
        j += m;
    }
}

```

```

/* Daniel-Lanczos section */
for( mmax = 2; n > mmax; ) {
    istep = mmax << 1;
    theta = isign * ( 2.0*M_PI / mmax );
    wpr = -2.0 * sqr( sin( 0.5*theta ) );
    wpi = sin( theta );
    wr = 1.0; wi = 0.0;
    for( m = 0; m < mmax; m += 2 ) {
        for( i = m; i < n; i += istep ) {
            j = i + mmax;
            tempr = wr*data[j] - wi*data[j+1];
            tempi = wr*data[j+1] + wi*data[j];
            data[j] = data[i] - tempr;
            data[j+1] = data[i+1] - tempi;
            data[i] += tempr;
            data[i+1] += tempi;
        }
        wr = (wtemp=wr)*wpr - wi*wpi + wr;
        wi = wi*wpr + wtemp*wpi + wi;
    }
    mmax = istep;
}
sqrtN = sqrt( N ); /* normalisation section */
for( i = 0; i < n; i++ )
    data[i] /= sqrtN;
}

```

FFT – format danych

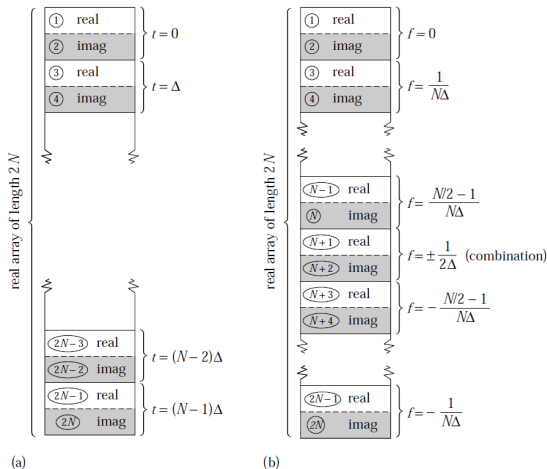


Figure 12.2.2. Input and output arrays for FFT. (a) The input array contains N (a power of 2) complex time samples in a real array of length $2N$, with real and imaginary parts alternating. (b) The output array contains the complex Fourier spectrum at N values of frequency. Real and imaginary parts again alternate. The array starts with zero frequency, works up to the most positive frequency (which is ambiguous with the most negative frequency). Negative frequencies follow, from the second-most negative up to the frequency just below zero.