

## METODA RÓŻNIC SKOŃCZONYCH

(omówienie na przykładzie równań liniowych)

niech  $N = 2$  (2 równania różniczkowe zwyczajne liniowe I-rz.)

lub jedno II-rzędu

$$f'' = p(x)f' + q(x)f + r(x)$$

$$a \leq x \leq b, \quad f(a) = \alpha, \quad f(b) = \beta$$

idea:

na siatce argumentu  $X \quad x_i, i=1,2, \dots, n$

dyskretyzujemy równanie wyrażając

$$f'', \quad f', \quad f$$

przez  $f_i = f(x_i)$  ;

obcinając odpowiednio rozwinięcie Taylora

$$f(x_{i+1}) \quad i \quad f(x_{i-1})$$

albo wyrażając pochodne przez odpowiednie różnice skończone

$$f'_i = \frac{1}{2h} [f_{i+1} - f_{i-1}] \quad \text{oraz}$$

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

otrzymujemy dla każdego  $i$

$$\left( \frac{2f_i - f_{i+1} - f_{i-1}}{h^2} \right) + p(x_i) \left( \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} \right) + q(x_i) f_i = -r(x_i)$$

albo inaczej (\*)

$$-\left(1 + \frac{h}{2} p_i\right) f_{i-1} + (2 + h^2 q_i) f_i - \left(1 - \frac{h}{2} p_i\right) f_{i+1} = -h^2 r_i$$

dla  $i = 2, \dots, n-1$ , czyli  $n-2$  równań na  $n$  niewiadomych pozostałe 2 równania to

$$f_1 = f(a) = \alpha, \quad f_n = f(b) = \beta$$

wstawiając wartości  $f_1 = \alpha$ ,  $f_n = \beta$

do (\*)

otrzymamy układ  $n-2$  liniowych równań

algebraicznych na  $n-2$  niewiadomych  $f_i$ ,

$i = 2, \dots, n-1$

$$\mathbf{A}\mathbf{f} = \mathbf{b} \quad (**)$$

który możemy rozwiązać znanymi już metodami

postać  $\mathbf{A}$  jest trójdzielna

dla  $N \gg 2$  mamy  $(N - 2) \times n$  równań (!)

do rozwiązania bardzo dużych (ale prawie "pustych")

równań trzeba stosować specjalne techniki -

- metody relaksacyjne

( np. iteracyjna metoda Jacobiego )

rozwiązanie  $\mathbf{A}\mathbf{f} = \mathbf{b}$  przebiega iteracyjnie

począwszy od przybliżonego rozwiązania  $\mathbf{f}^{(0)}$

$$\mathbf{f}^{(k)} = \mathbf{T}\mathbf{f}^{(k-1)} + \mathbf{c}$$

aż do osiągnięcia zbieżności;

Rozkładając  $\mathbf{A}$  na:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & \dots \\ \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & a_{nn} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ -a_{21} & 0 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & 0 \\ -a_{n1} & \dots & -a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & \dots & -a_{1n} \\ 0 & 0 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & -a_{n-1,n} \\ 0 & \dots & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$(\mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{U})\mathbf{f} = \mathbf{b}$$

$$\mathbf{f} = \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{f} + \mathbf{D}^{-1}\mathbf{b}$$

$$\mathbf{f}^{(k)} = \mathbf{T}\mathbf{f}^{(k-1)} + \mathbf{c}$$

jako  $\mathbf{f}^{(0)}$  może służyć np. przybliżone rozwiązanie analityczne (dla uproszczonych równań)

## RÓWNANIA RÓŻNICZKOWE CZĄSTKOWE

### Równania

- *eliptyczne,*

np. równanie Poissona

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x, y) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} f(x, y) = g(x, y)$$

w fizyce opisuje np.:

- rozkład pola grawitacyjnego w obecności źródeł ( $g$ )
- rozkład pola (potencjału) elektrycznego w obecności ładunków  
prawo Gaussa (3D)

$$\nabla^2 \varphi = -4\pi\rho$$

- rozkład pola prędkości cieczy wypływającej ze źródeł

lub Laplace'a  $g(x, y) = 0$

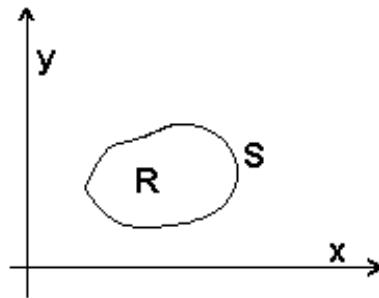
np. równanie Schroedingera (bez czasu)

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - E \right) \Psi(x, y, z) = 0$$

warunki brzegowe Dirichleta:

$$f(x, y) = B(x, y)$$

dla wszystkich  $x, y$  na brzegu  $S$  obszaru  $R$



- *paraboliczne*

np.

$$\frac{\partial}{\partial t} f(x, t) - \alpha^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x, t) = 0$$

równanie przewodnictwa cieplnego (w jednowymiarowym pręcie); równanie Schrödingera zależne od czasu w 1D; ...

warunki brzegowe:

1. w  $t = 0$  zadany rozkład  $f(x, t) = B(x)$
2. dla każdego  $t$ ,  $f$  spełnia war. na brzegu przedziału

$$f(0, t) = f_0, \quad f(l, t) = f_l$$

- *hiperboliczne*

np. klasyczne równanie falowe (drgania w 1D)

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} f(x, t) = \alpha^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x, t) .$$

Rozważmy równanie paraboliczne

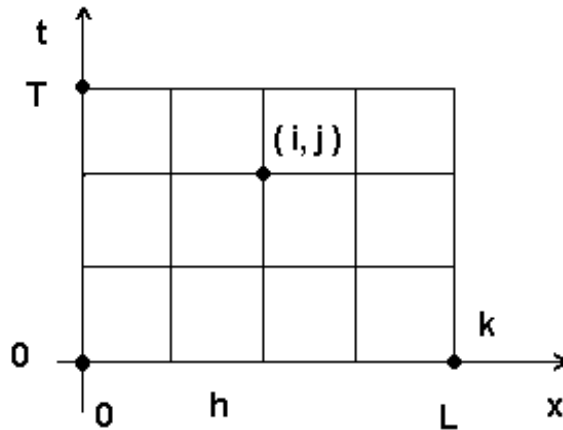
$$\frac{\partial}{\partial t} f(x, t) - \alpha^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x, t) = 0$$

metoda siatek

dyskretyzując czas  $t$  i położenie  $x$

w przedziałach np.  $0 < t < T$ ,  $0 < x < L$

dostajemy prostokątną siatkę:



w chwili  $t = 0$  znamy wartości  $f$  dla wszystkich  $x$   
 $j \rightarrow t_j$  nazywamy warstwą

z rozwinięcia  $f(x, t)$  w szereg Taylora  
względem  $t$  przybliżamy

$$\frac{\partial}{\partial t} f(x_i, t_j) \cong \frac{f(i, j+1) - f(i, j)}{k}$$

a z rozwinięcia  $f(x, t)$  względem  $x$

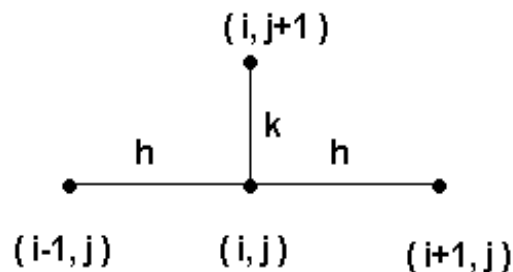
$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x_i, t_j) \cong \frac{f(i+1, j) - 2f(i, j) + f(i-1, j)}{h^2}$$



oznaczając  $f_{ij} = f(i, j) = f(x_i, t_j)$

równanie daje zapisać się jako

$$f_{i,j+1} = \left(1 - \frac{2\alpha^2 k}{h^2}\right) f_{ij} + \alpha^2 \frac{k}{h^2} (f_{i+1,j} + f_{i-1,j})$$



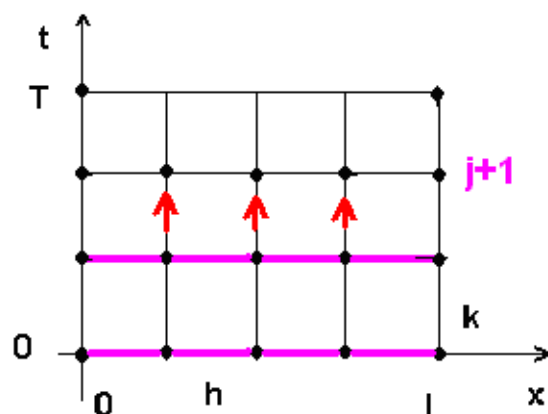
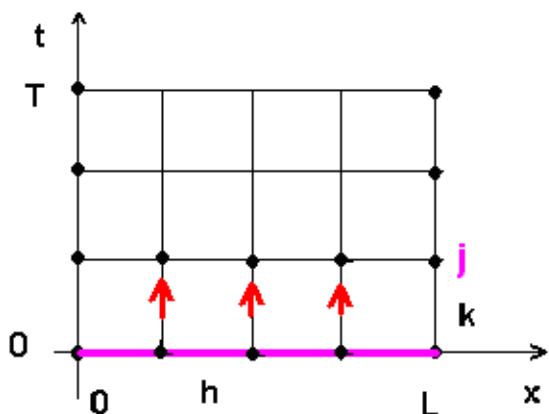
dodatkowo dochodzą równania brzegowe

$$f(0, t) = f_0, \quad f(l, t) = f_l$$

zatem, dla wszystkich  $i$  (w jednej warstwie  $j+1$ )

wartości  $f_{i,j+1}$  mogą być znalezione ze

znajomości wartości  $f_{i,j}$  w warstwie poprzedniej



$$\mathbf{f}^{(j+1)} = \mathbf{A}\mathbf{f}^{(j)}$$

gdzie

$\mathbf{A}$  jest trójdzielna

## Elementy modelowania i teorii aproksymacji

### Metoda najmniejszych kwadratów

zakładamy istnienie  $N$  punktów pomiarowych

$(x_i, y_i)$ , gdzie

- $x_i$  - wartości zmiennej niezależnej
- $y_i$  - wyniki pomiarów pewnej wielkości zależnej od  $x$

nie znamy "rzeczywistej" zależności  $y(x)$

modelujemy tę zależność za pomocą  $M$  - parametrowej funkcji

$$y(x) = y(x; a_1, a_2, \dots, a_M)$$

szukamy takich wartości parametrów  $a_i$

które minimalizują "rozbieżność" pomiędzy

wartościami pomiarowymi  $y_i$  a obliczonymi  $y(x_i)$

- problem **MINIMAX**

szukanie takich parametrów, które minimalizują

$$\max_i \{|y_i - y(x_i)|\}$$

- minimalizacja odchylenia bezwzględnego

$$\sum_{i=1}^N |y_i - y(x_i)|$$

$$\frac{\partial}{\partial a_j} \sum_{i=1}^N |y_i - y(x_i)| = 0, \quad j = 1, \dots, M$$

- zakładając, że każdy pomiar wykonany jest z

błędem  $\Delta y$ , oraz, że rozkład (rozrzut)

mierzonych wartości  $y_i$  wokół „prawdziwych”

$y(x_i)$  jest Gaussowski (normalny)

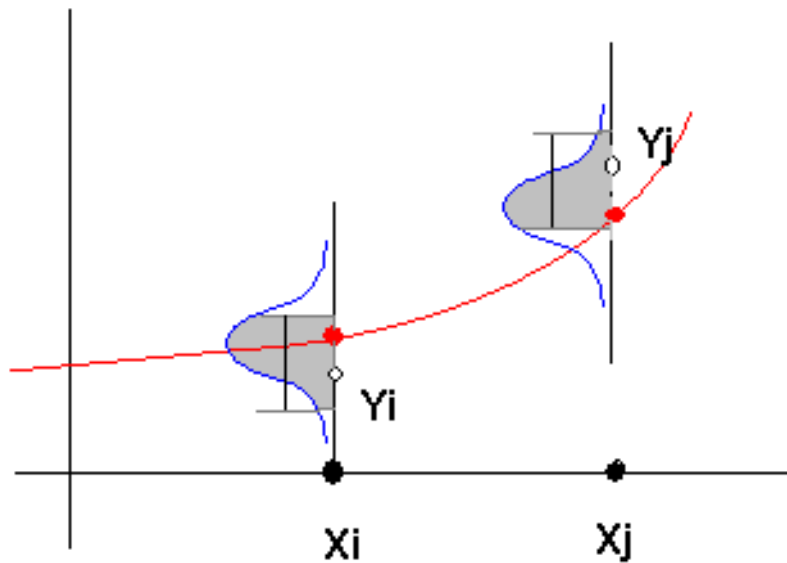
tzn. gdybyśmy wykonywali wiele pomiarów dla ustalonego  $x_i$

to prawdopodobieństwo uzyskania  $N$  wartości

$y(x_i)$  w wyniku  $N$  pomiarów jest:

$$P = \prod_{i=1}^N \left\{ \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{y_i - y(x_i)}{\sigma} \right)^2 \right] \Delta y \right\}$$

jako iloczyn prawdopodobieństw,



gdzie  $\sigma$  - odchylenie standardowe rozkładu

( iloczyn - iloczyn prawdopodobieństw dla  
poszczególnych punktów pomiaru )

maksymalizacja  $P$  - maksymalizacja  $\log P$   
lub minimalizacja  $-\log P$

$$\left[ \sum_{i=1}^N \frac{[y_i - y(x_i)]^2}{2\sigma^2} \right] - N \log \Delta y$$

$\sigma$  i  $\Delta y$  stałe,

sprowadza do minimalizacji

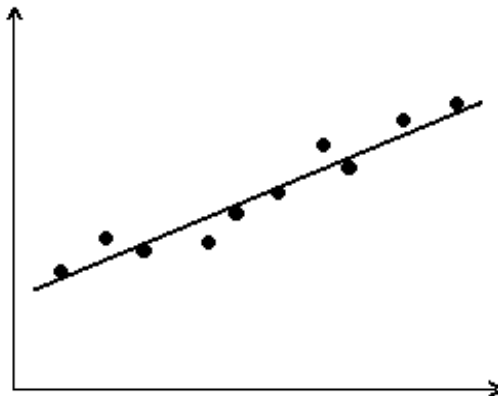
$$\sum_{i=1}^N [y_i - y(x_i)]^2,$$

tzn.

$$\frac{\partial}{\partial a_j} \sum_{i=1}^N [y_i - y(x_i, \mathbf{a})]^2 = 0, \quad j=1, \dots, M$$

punktów pomiarowych jest zwykle  $N > M$

dopasowanie do prostej (regresja liniowa)



$$0 = \frac{\partial}{\partial a} \sum_{i=1}^N [y_i - (ax_i + b)]^2 = 2 \sum_{i=1}^N (y_i - ax_i - b)(-x_i)$$

$$0 = \frac{\partial}{\partial b} \sum_{i=1}^N [y_i - (ax_i + b)]^2 = 2 \sum_{i=1}^N (y_i - ax_i - b)(-1)$$

**w rezultacie**

$$a = \frac{N(\sum x_i y_i) - (\sum x_i)(\sum y_i)}{N(\sum x_i^2) - (\sum x_i)^2}$$

$$b = \frac{(\sum x_i^2)(\sum y_i) - (\sum x_i)(\sum x_i y_i)}{N(\sum x_i^2) - (\sum x_i)^2}$$

**zauważmy, że mianownik**  $N(\sum x_i^2) - (\sum x_i)^2$

**sprowadza się do**

**wariancji rozkładu**  $\sigma^2 = \frac{1}{N} \sum (x_i - \bar{x})^2$

## dopasowanie do wielomianu

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^n a_k x^k$$

$$\sum_{i=1}^N [y_i - P(x_i)]^2 \quad \text{różniczkujemy po } a_k$$

w rezultacie

(n + 1) równań na (n + 1) niewiadomych  $a_k$

$$a_0 \sum x_i^0 + a_1 \sum x_i^1 + \dots + a_n \sum x_i^n = \sum y_i x_i^0$$

$$a_0 \sum x_i^1 + a_1 \sum x_i^2 + \dots + a_n \sum x_i^{n+1} = \sum y_i x_i^1$$

...

$$a_0 \sum x_i^n + a_1 \sum x_i^{n+1} + \dots + a_n \sum x_i^{2n} = \sum y_i x_i^n$$

rozwiązanie układu liniowych równań algebraicznych



na przykładzie „prostej” widać, że punktów pomiarowych nie może być mniej niż parametrów dopasowania

dopasowanie chi-kwadrat ( $\chi^2$ )

pomiar  $y_i$  dla  $x = x_i$  może być wielokrotnie powtarzany -

każdy punkt  $(x_i, y_i)$  może posiadać własne

odchylenie standardowe  $\sigma_i$

wówczas minimalizujemy wielkość

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \left( \frac{y_i - y(x_i, \mathbf{a})}{\sigma_i} \right)^2$$

oszacowanie „niedopasowania” (regresja liniowa)

$$\sigma^2_{a_j} = \sum_{i=1}^N \sigma^2_i \left( \frac{\partial a_j}{\partial y_i} \right)$$

pochodne łatwo policzyć z ostatecznych

wzorów na  $a$  i  $b$