# Лекция 4

## Вычислительная физика

# План лекции

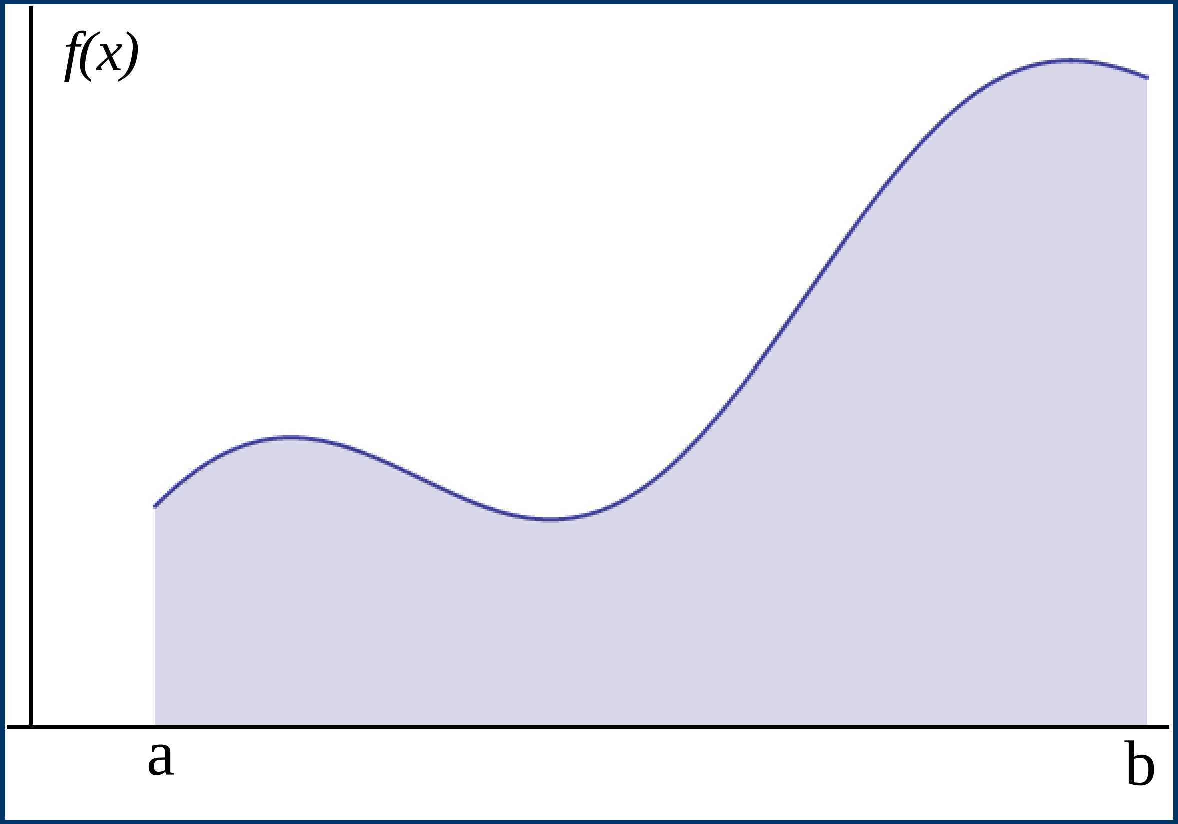
- Численное интегрирование. Определенные интегралы.
  - Метод трапеций и метод Симпсона
- Численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений. Задача Коши.
  - Схема Эйлера
  - Устойчивость схемы Эйлера
  - Обобщение на случай дифференциального уравнения n-го порядка
  - Алгоритм Верле

# Численное интегрированное (определенные интегралы)

$$\int_a^b f(x)dx \quad \text{на } [a, b], \quad f(x) \text{ - известная функция}$$

$$\textit{Первообразная} \quad I = \Phi(x)\Big|_a^b$$

# Геометрический смысл определенного интеграла

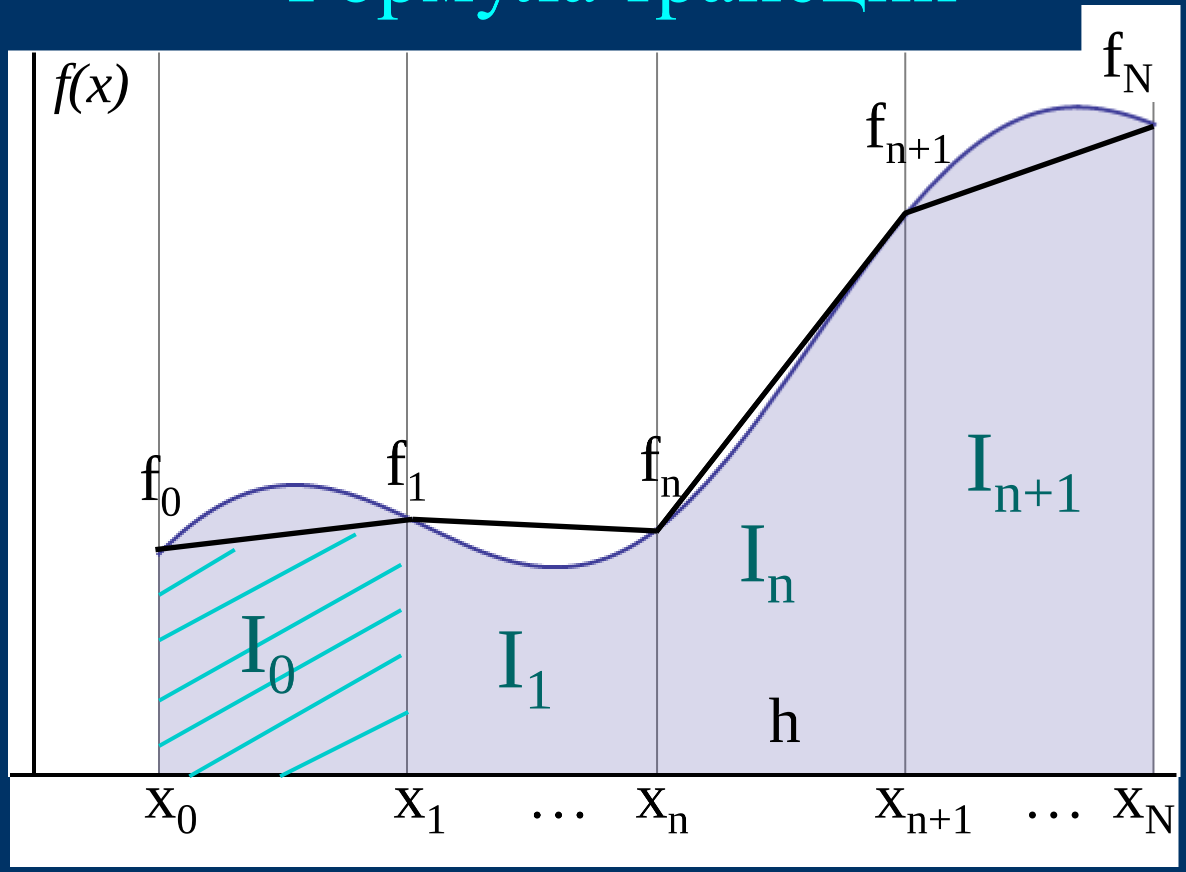


# Численное интегрирование

Разобьем [a, b] на N равных  интервалов $(x_n, x_{n-1})$:

$x_{n+1} - x_n = \Delta x \equiv h = (b-a)/N$ , $n = 0,1, \ldots N-1$

# Формула трапеций




$$I = \sum_n I_n \approx \sum_{n=0}^{N-1} \frac{f_n + f_{n+1}}{2} h = \left( \sum_{n=1}^{N-1} f_n + \frac{f_0 + f_N}{2} \right) h = I_т$$

# Погрешность формулы трапеций

$$I_т = \left( \sum_{n=1}^{N-1} f_n + \frac{f_0 + f_N}{2} \right) h$$

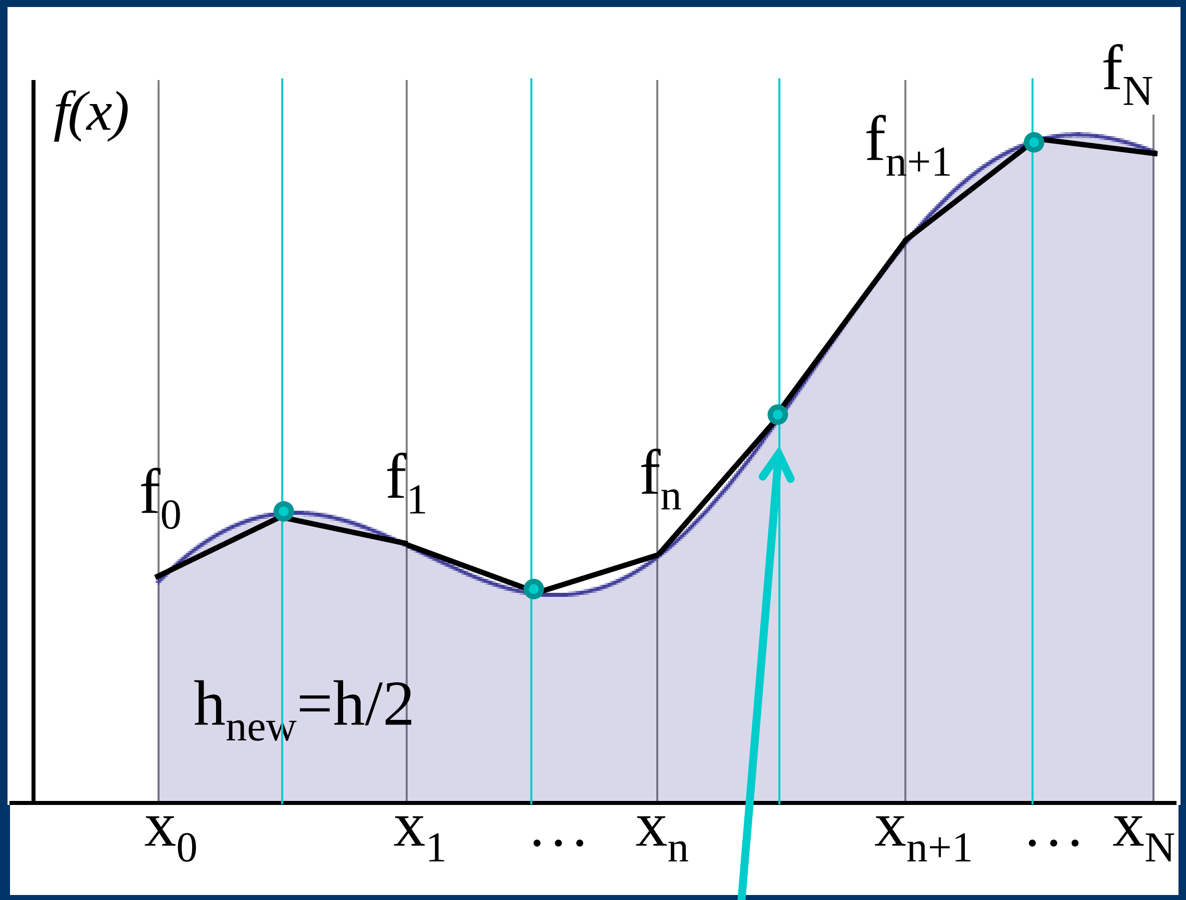
$$\left| I - I_т \right| \le \frac{h^2}{12} (b-a) \max_{[a,\, b]} \left( \left| f''(x) \right| \right)$$

Погрешность ↓ как $h^2$, если существует конечная f''(x)

Выбор шага интегрирования $\left| I_T^{(N)} - I_T^{(2N)} \right| < \varepsilon$

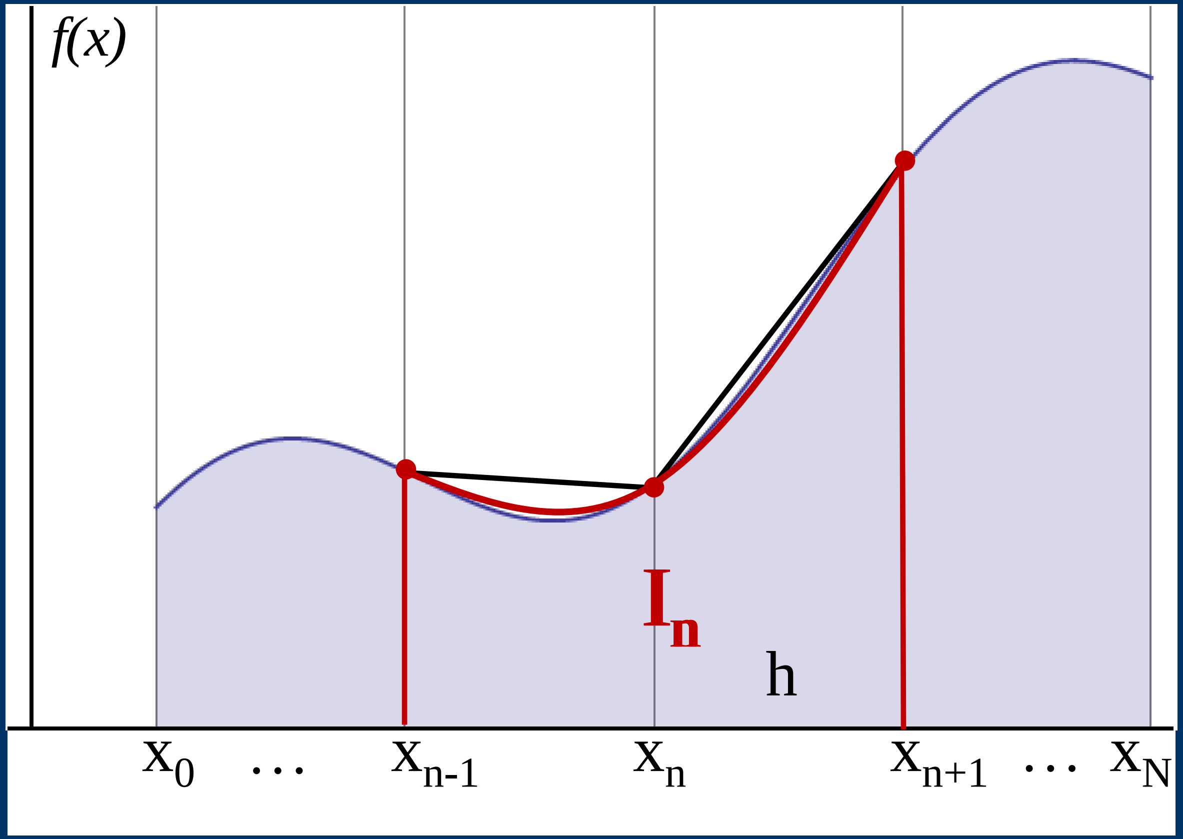
$$I_T^{(2N)} = I_T^{(N)}/2 + \sum_{new} f_{new} h_{new}$$

# Уменьшение шага интегрирования




$$I_T^{(2N)} = I_T^{(N)}/2 + \sum_{new} f_{new} h_{new}$$

# Формула Симпсона




$$I_n = \int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} f(x)dx \approx \left\{ f(x) \approx ax^2 + bx + c \right\} \approx \int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} (ax^2 + bx + c)dx$$

# Формула Симпсона

$$I_n = \int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} f(x)dx \approx \left\{ f(x) \approx ax^2 + bx + c \right\} \approx \int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} (ax^2 + bx + c)dx$$

Пусть $x_n = 0$, $x_{n+1} = h$, $x_{n-1} = -h$

$$\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} (ax^2 + bx + c)dx = \left. \frac{ax^3}{3} \right|_{-h}^{h} + cx\Big|_{-h}^{h} = \frac{2}{3}ah^3 + 2ch$$

$$f_{n-1} = f(-h) = ah^2 - bh + c$$

$$f_n = f(0) = c$$

$$f_{n+1} = f(+h) = ah^2 + bh + c$$

$$c = f_n$$

$$a = \frac{f_{n+1} + f_{n-1} - 2f_n}{2h^2}$$

# Формула Симпсона

$$\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} (ax^2 + bx + c)dx = \frac{2}{3}ah^3 + 2ch =$$

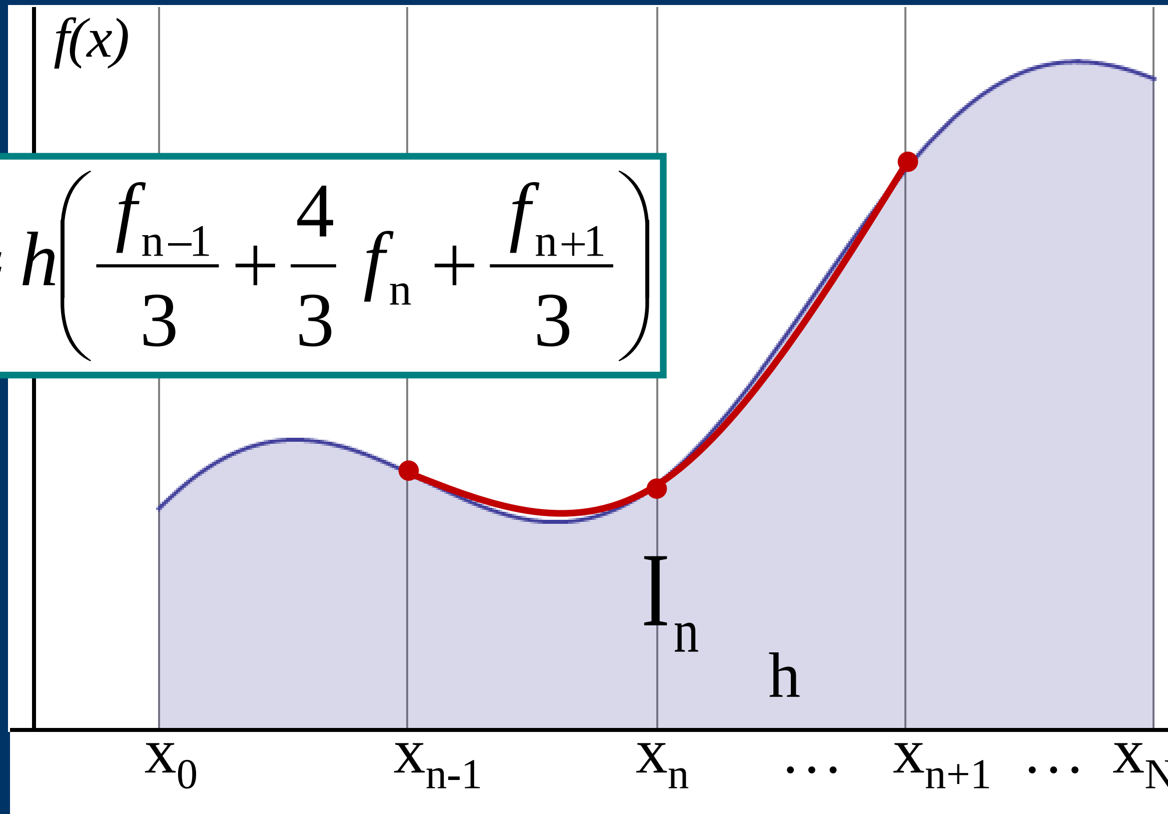
$$c = f_n$$

$$a = \frac{f_{n+1} + f_{n-1} - 2f_n}{2h^2}$$

$$= \left( \frac{f_{n-1} + f_{n+1}}{3} + \frac{4}{3} f_n \right) h = h \left( \frac{f_{n-1}}{3} + \frac{4}{3} f_n + \frac{f_{n+1}}{3} \right) \approx I_n$$

# Формула Симпсона

$$I_n \approx h\left(\frac{f_{n-1}}{3}+\frac{4}{3}f_n+\frac{f_{n+1}}{3}\right)$$




$$I=\sum_n I_n \approx h\left(\frac{f_0}{3}+\frac{4}{3}f_1+\frac{2}{3}f_2+\frac{4}{3}f_3+\cdots+\frac{4}{3}f_{N\text{-}1}+\frac{f_N}{3}\right)=I_c$$

$N = 2k,\ k = 1,2,\ \ldots$

# Погрешность формулы Симпсона

$$\mathrm{I_c} = h\left(\frac{f_0}{3} + \frac{4}{3} f_1 + \frac{2}{3} f_2 + \frac{4}{3} f_3 + \cdots + \frac{4}{3} f_{\mathrm{N-1}} + \frac{f_{\mathrm{N}}}{3}\right)$$

$$\left|\mathrm{I} - \mathrm{I_c}\right| \le \frac{\mathrm{h}^4}{180}(b-a)\max_{[a,\,b]}\left(\left|\mathrm{f}^{(4)}(x)\right|\right)$$

Погрешность ↓ как $h^4$, если существует конечная $f^{(4)}(x)$

Иногда лучше использовать более простую формулу трапеций

# Численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений. Задача Коши.

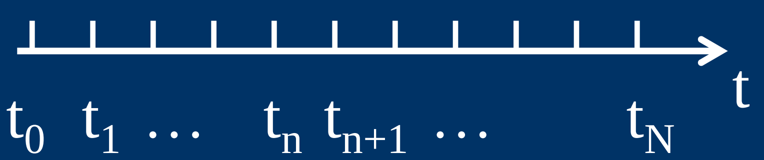
Уравнение первого порядка

$$
\begin{cases}
\dfrac{du}{dt} = f(u,t) \\
\mathrm{u}(t_0) = \mathrm{u}_0
\end{cases}
$$

u – неизвестная функция

t – независимая переменная

Хотим знать решение на отрезке $[t_0, t_N]$



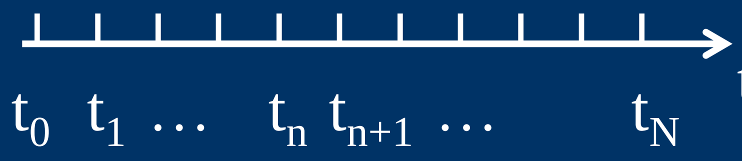

```
tn - узел, n = 0,1,2 … N
{tn} - расчетная сетка
Δtn = tn+1-tn  - шаг сетки

u(tn) ≡ un - сеточная функция
```

# Схема Эйлера

$$\begin{cases} \dfrac{du}{dt} = f(u,t) \\ u(t_0) = u_0 \end{cases}$$

$$du = f(u,t)dt$$




$$\int_{u_n}^{u_{n+1}} du = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u,t)dt$$

Аппроксимируем $f$ на $[t_n, t_{n+1}]$ значением $f(u_n, t_n) \equiv f_n = \mathrm{const}$

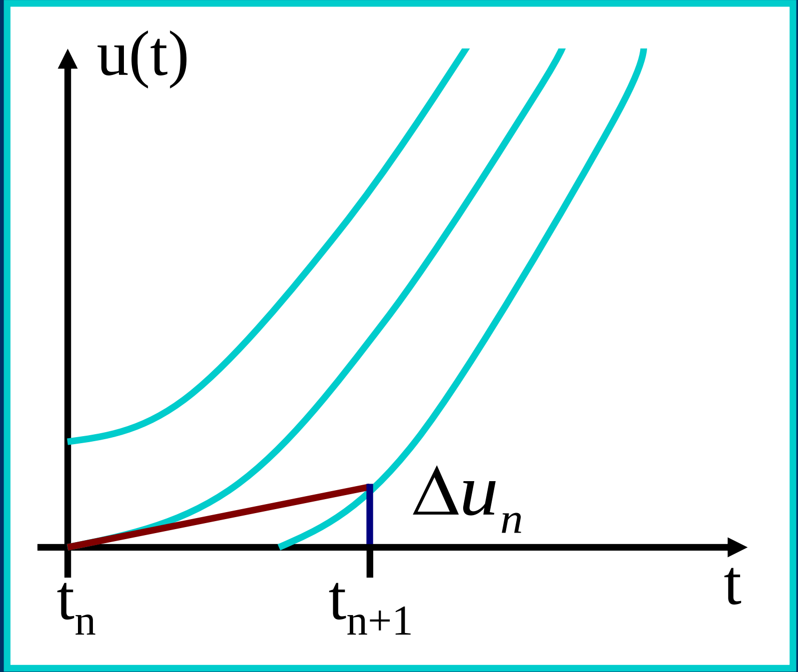
$$u_{n+1} = u_n + f_n \cdot \Delta t \qquad n = 0, 1, \ldots, N-1$$

# Геометрический смысл схемы Эйлера

$$\begin{cases} \dfrac{du}{dt} = f(u,t) \\ u(t_0) = u_0 \end{cases}$$

$$u_{n+1} = u_n + f_n \cdot \Delta t$$

$$\Delta u_n = u_{n+1} - u_n = f_n \cdot \Delta t$$



# Устойчивость численной схемы

Ошибка: $\varepsilon_n \to \varepsilon_{n+1}$

$$|\varepsilon_{n+1}| \le |\varepsilon_n|$$

схема устойчива

$$\varepsilon_{n+1} = \lambda \varepsilon_n$$

λ – множитель перехода

$$|\lambda| \le 1$$

# Устойчивость схемы Эйлера

$$\frac{du}{dt} = f(u,t)$$

$$u_{n+1} = u_n + f_n \cdot \Delta t$$

$$\cancel{u_{n+1}} + \varepsilon_{n+1} = u_n + \varepsilon_n + f_n(u_n + \varepsilon_n) \cdot \Delta t \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \cancel{u_n} + \varepsilon_n + \cancel{f_n}(u_n)\Delta t + \frac{df}{du}\varepsilon_n \Delta t + o(\varepsilon_n^2)\Delta t$$

# Устойчивость схемы Эйлера

$$\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n + \frac{df}{du}\varepsilon_n \Delta t + o(\varepsilon_n^2)\Delta t$$

$$\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n \left(1 + \frac{df}{du}\Delta t\right)$$

$$\lambda = 1 + \frac{df}{du}\Delta t$$

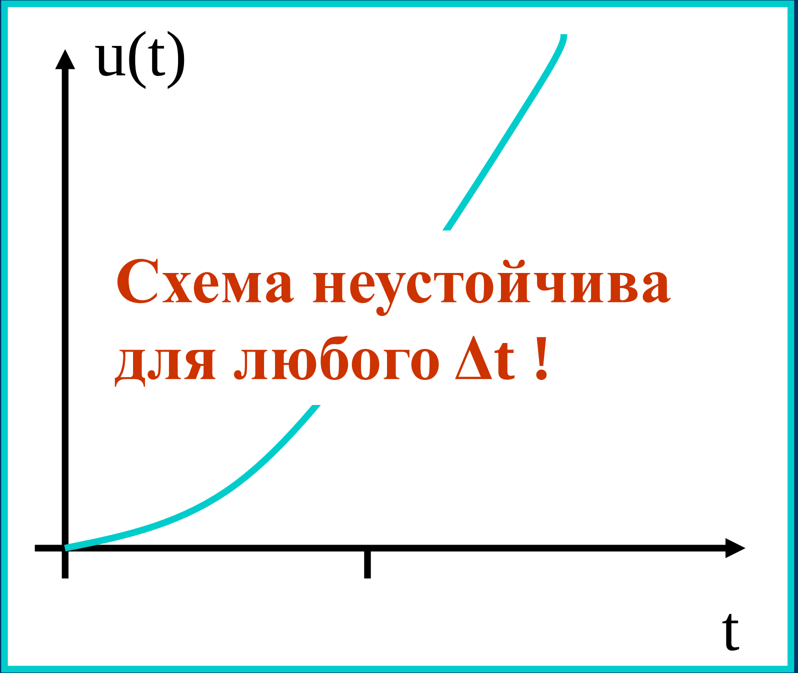
# Решение с нарастанием

$$|\lambda| \le 1 \qquad\qquad \lambda = 1 + \frac{df}{du}\Delta t$$

1) Решение с нарастанием

$$\frac{df}{du} > 0$$

$$\lambda > 1$$



# Решение с затуханием

$$|\lambda| \le 1 \qquad \lambda = 1 + \frac{df}{du}\Delta t$$

$$\frac{df}{du} < 0$$

$$1 + \frac{df}{du}\Delta t \ge -1$$

$$\frac{df}{du}\Delta t \ge -2$$

$$\left|\frac{df}{du}\right|\Delta t \le 2$$

$$\Delta t \le \frac{2}{\left|\dfrac{df}{du}\right|}$$

**Схема условно устойчива !**

# Система уравнений

$$\begin{cases} \dfrac{du_1}{dt} = f_1(u_1, u_2, t) & u_1(t_0) = u_{10} \\ \dfrac{du_2}{dt} = f_2(u_1, u_2, t) & u_2(t_0) = u_{20} \end{cases}$$

Схема Эйлера

$$u_{1n+1} = u_{1n} + f_1(u_{1n}, u_{2n}, t_n)\Delta t = u_{1n} + f_{1n}\Delta t$$

$$u_{2n+1} = u_{2n} + f_2(u_{1n}, u_{2n}, t_n)\Delta t = u_{2n} + f_{2n}\Delta t$$

# Векторный формализм

Пусть $$\vec{u} = \{u_1, u_2\} \quad \vec{f} = \{f_1, f_2\}$$

Задача Коши

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = \vec{f}(\vec{u}, t) \qquad \vec{u}(t_0) = \vec{u}_0$$

Численное решение по схеме Эйлера

$$\vec{u}_{n+1} = \vec{u}_n + \vec{f}_n \Delta t$$

# Обобщение на случай дифференциального уравнения *n*-го порядка

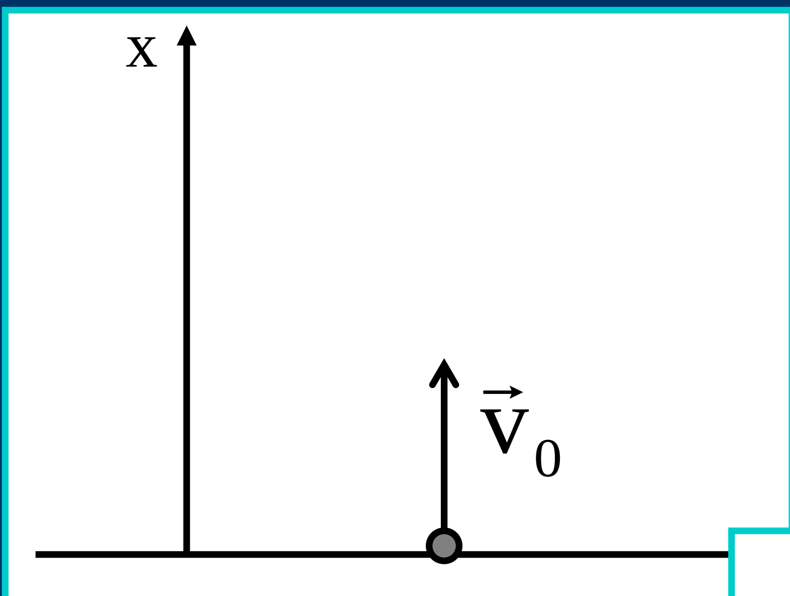
Пусть $n = 2$

$$\ddot{u} = f(u, \dot{u}, t) \qquad u(t_0) = u_0, \dot{u}(t_0) = \mathrm{v}_0$$

Замена $\boxed{\dot{u} = \mathrm{v}}$ тогда $\boxed{\ddot{u} = \dot{\mathrm{v}}}$

$$\begin{cases} \dfrac{d\mathrm{v}}{dt} = f(u, \mathrm{v}, t) & \mathrm{v}(\mathrm{t}_0) = \mathrm{v}_0 \\ \dfrac{du}{dt} = \mathrm{v} & u(\mathrm{t}_0) = \mathrm{u}_0 \end{cases}$$

# Пример. Численное решение задачи механики




Найти v(t), x(t)

Физическая модель: постоянная сила тяжести, вязкое трение

$$\vec{F} = -k\vec{v} \quad \text{Закон Стокса}$$

2-ой закон Ньютона

$$m\ddot{x} = -mg - k\dot{x}$$

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = v \\ \dfrac{dv}{dt} = \ddot{x} = -g\left(1 + \dfrac{kv}{mg}\right) \end{cases}$$

# Скорость

$$\boxed{m\ddot{x} = -mg - k\dot{x}}$$

Предельная скорость $\boxed{0 = -mg - k\mathrm{v}_t}$

$$\boxed{\mathrm{v}_t = -\frac{mg}{k}}$$

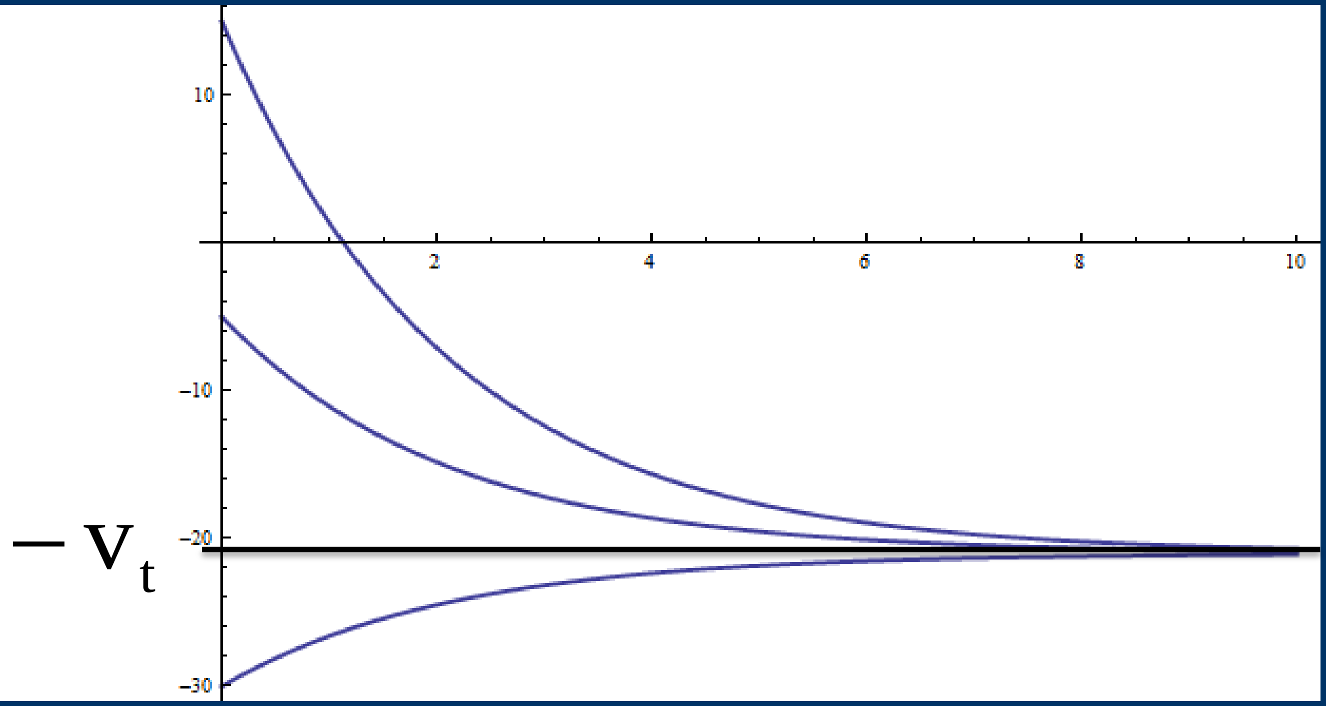
$$\boxed{\mathrm{v}_t \to |\mathrm{v}_t|}$$

$$\begin{cases} \dfrac{d\mathrm{v}}{dt} = -g\left(1 + \dfrac{\mathrm{v}}{\mathrm{v}_t}\right) = a(\mathrm{v}) \\ \mathrm{v}(t=0) = \mathrm{v}_0 \end{cases}$$

Задача Коши

# Аналитическое решение

$$v(t) = -v_t + (v_t + v_0)e^{-t/t_0}, \text{ где } t_0 = \frac{v_t}{g}$$



# Результаты из спорта

31м/с

25 м/с

20 м/с

16 м/с

9 м/с

# Численное решение. Схема Эйлера

$$\mathrm{v}_{n+1} = \mathrm{v}_n + a_n(\mathrm{v}_\mathrm{n}, t_n)\Delta t$$
$$\mathrm{x}_{n+1} = \mathrm{x}_n + \mathrm{v}_n \Delta t$$

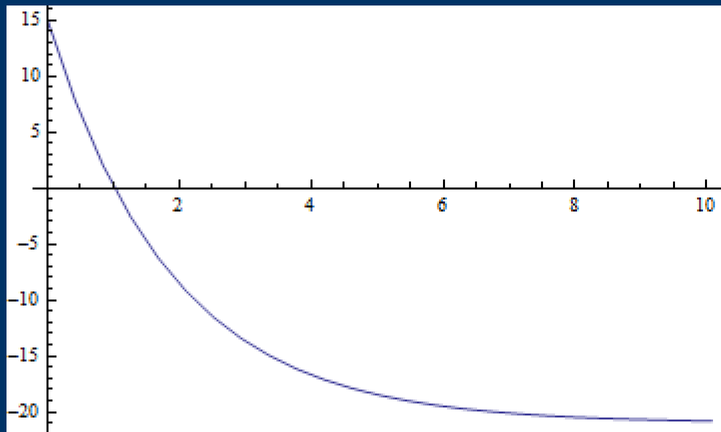
$$\ddot{x} \equiv a = -g\left(1 + \frac{\mathrm{v}}{\mathrm{v}_\mathrm{t}}\right)$$

$$a_n = -g\left(1 + \frac{\mathrm{v}_\mathrm{n}}{\mathrm{v}_\mathrm{t}}\right)$$

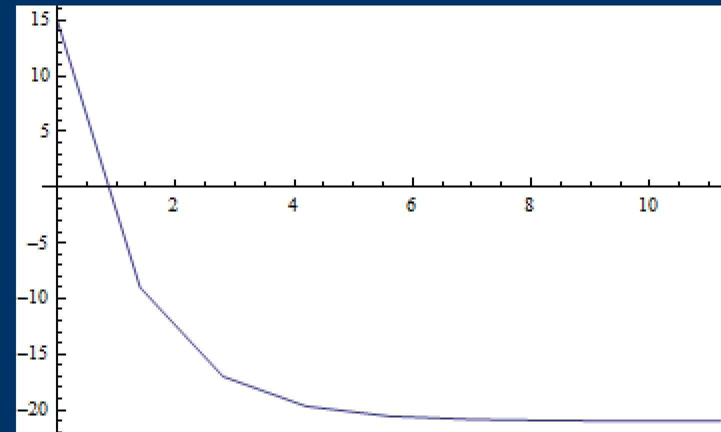
Устойчивость схемы

$$\Delta t \le \frac{2}{\left|\frac{da}{d\mathrm{v}}\right|} = \frac{2\mathrm{v}_\mathrm{t}}{g} \equiv 2t_0$$

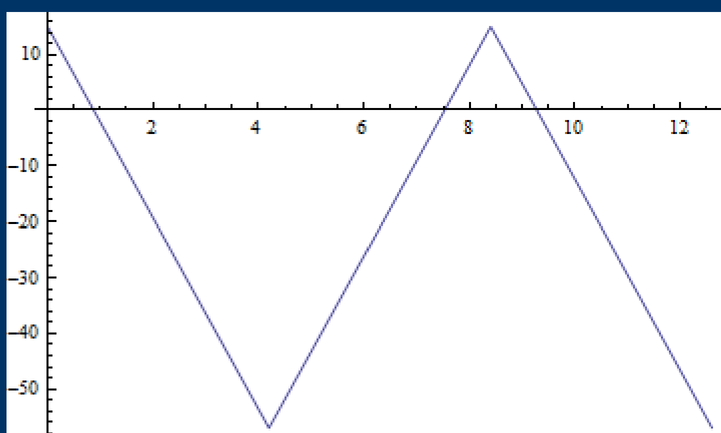
# Результаты численного решения



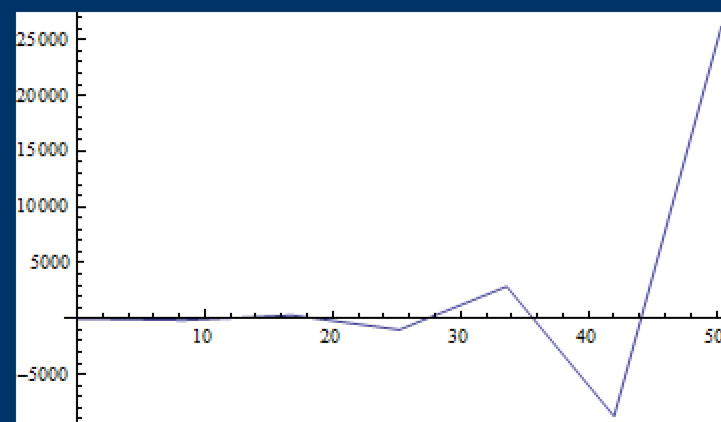

$dt = 2t_0/10$




$dt = 2t_0/3$




$dt = 2t_0$




$dt = 2 \cdot 2t_0$

# Алгоритм Верле

Схема Эйлера

$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t$$

Самостартующий алгоритм Верле

$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t + \frac{a_n}{2} \Delta t^2$$

$$v_{n+1} = v_n + \frac{1}{2}(a_n + a_{n+1})\Delta t$$

# Падение шарика в вязкой среде

$$a_n = -g\left(1 + \frac{\mathrm{v}_\mathrm{n}}{\mathrm{v}_\mathrm{t}}\right)$$

$$\mathrm{v}_{n+1} = \mathrm{v}_n + \frac{1}{2}(a_n + a_{n+1})\Delta t$$

$$\mathrm{v}_{n+1} = \mathrm{v}_n - \frac{g}{2}\left(\left(1 + \frac{\mathrm{v}_\mathrm{n}}{\mathrm{v}_\mathrm{t}}\right) + \left(1 + \frac{\mathrm{v}_\mathrm{n+1}}{\mathrm{v}_\mathrm{t}}\right)\right)\Delta t$$

# Явное выражение для алгоритма

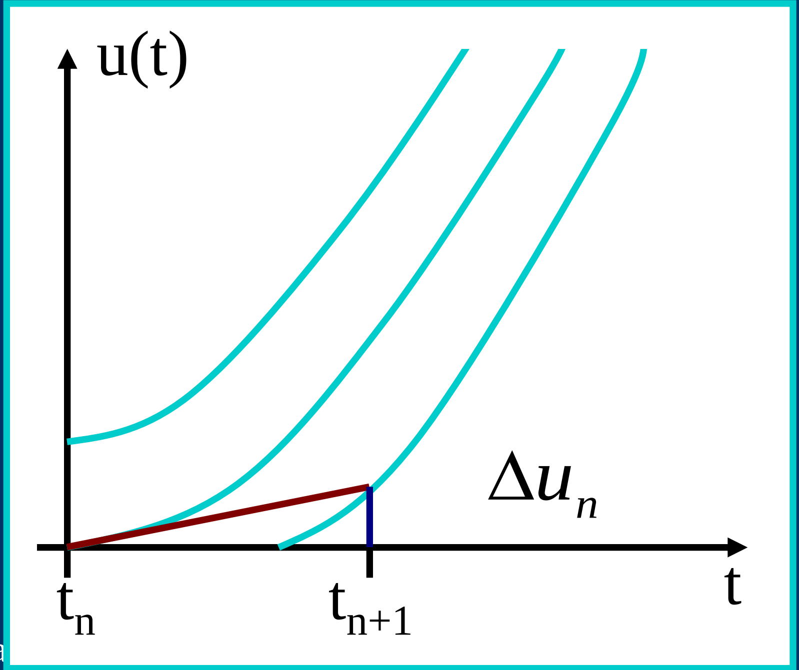
$$\mathrm{v}_{n+1} = \frac{\mathrm{v}_n - g\left(1 + \dfrac{\mathrm{v_n}}{2\mathrm{v_t}}\right)\Delta t}{1 + \dfrac{\mathrm{g}}{2\mathrm{v_t}}\Delta t}$$

# Уточнения метода Эйлера. Графический подход

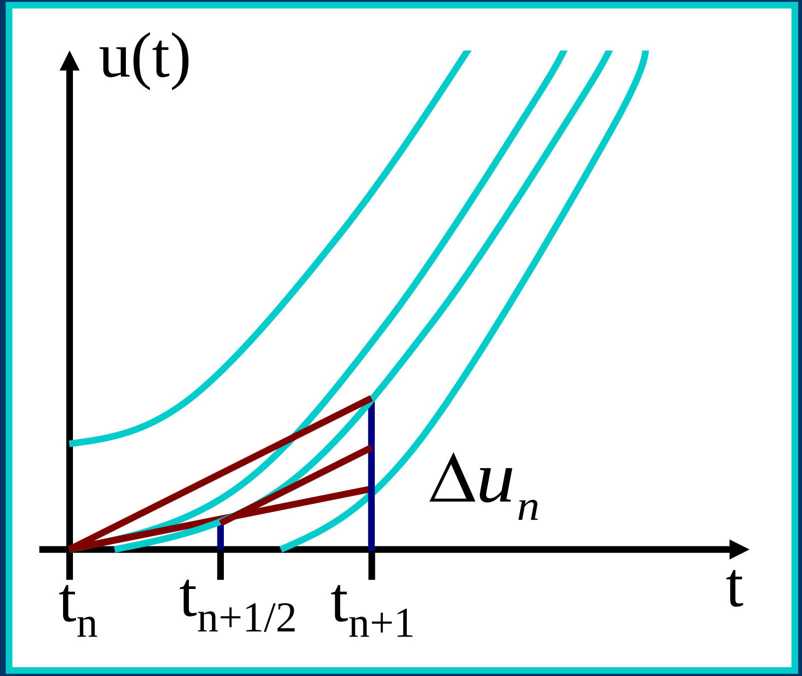
$$\begin{cases} \dfrac{du}{dt} = f(u,t) \\ u(t_0) = u_0 \end{cases}$$

$$u_{n+1} = u_n + f_n \cdot \Delta t$$

$$\Delta u_n = u_{n+1} - u_n = f_n \cdot \Delta t$$



# Уточненный метод ломанных (2 шага)

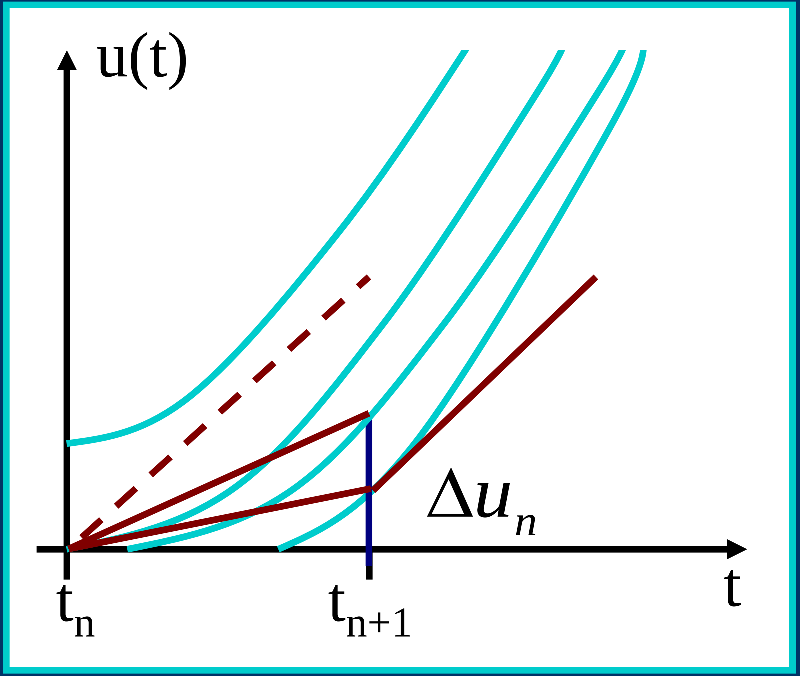



$$1)\quad u_{n+1/2} = u_n + f_n(u_n, t_n)\frac{\Delta t}{2}$$

$$2)\quad u_{n+1} = u_n + f_n(u_{n+1/2}, t_{n+1/2})\Delta t$$

# Улучшенный метод Эйлера-Коши

(предиктор – корректор)




$$1)\quad u'_{n+1} = u_n + f_n(u_n, t_n)\Delta t$$

$$2)\quad u_{n+1} = u_n + \frac{1}{2}\left[f(u_n, t_n) + f(u'_{n+1}, t_{n+1})\right]\Delta t$$



Погрешность на каждом шаге как $o(\Delta t^2)$

# Вывод формул численного интегрирования

$$\frac{du}{dt} = f(u,t)$$

$$u(t+\Delta t) = u(t) + \frac{du}{dt}\Delta t + \frac{d^2u}{dt^2}\frac{\Delta t^2}{2} + o(\Delta t^2)$$

$$u(t+\Delta t) = u(t) + f(u,t)\Delta t + \frac{df}{dt}\frac{\Delta t^2}{2} + o(\Delta t^2)$$

$$\frac{df}{dt} \approx \frac{f(u(t+\Delta t), t+\Delta t) - f(u(t),t)}{\Delta t} + O(\Delta t)$$

$$u_{n+1} = u_n + f_n\Delta t + \frac{\Delta t}{2}\left[f(u'_{n+1}, t_{n+1}) - f_n\right] + o(\Delta t^2)$$

# Вывод формул численного интегрирования

$$u_{n+1} = u_n + f_n \Delta t + \frac{\Delta t}{2}\left[f(u'_{n+1}, t_{n+1}) - f_n\right] + o(\Delta t^2)$$

$$u'_{n+1} = u_n + f_n \Delta t$$

$$u_{n+1} = u_n + \frac{\Delta t}{2}\left[f(u'_{n+1}, t_{n+1}) + f_n\right]$$

Улучшенная схема Эйлера-Коши!

# Метод Рунге-Кутта 4-го порядка

$$\frac{du}{dt} = f(u,t), \quad \mathrm{u}(t_0) = \mathrm{u}_0$$

$$u_{n+1} = u_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

$$k_1 = f(u_n, t_n)\Delta t$$

$$k_2 = f\left(u_n + \frac{k_1}{2}, t_n + \frac{\Delta t}{2}\right)\Delta t$$

$$k_3 = f\left(u_n + \frac{k_2}{2}, t_n + \frac{\Delta t}{2}\right)\Delta t$$

$$k_4 = f\left(u_n + k_3, t_n + \Delta t\right)\Delta t$$

# Литература по лекционному материалу

1. Н.Н. Калиткин. Численные методы. – BHV, 2011, 592 с.