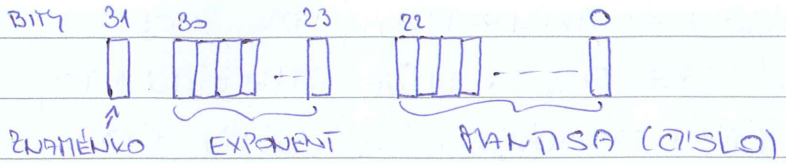
1

MODERNÍ METODY MODELOVÁNÍ VE FYZICE

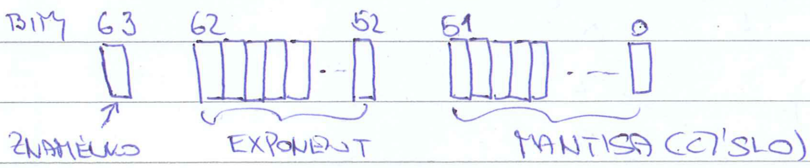
REPREZENTACE ČÍSEL V POČÍTAČI

SINGLE PRECISION – 4 BAJTY



- ČÍSLO JE V POČÍTAČI ROZDĚLENO NA ZNAMÉNKO, EXPONENT A MANTISU
- PŘESNOST NA 7 DECIMÁLNÍCH CIFER
- PRO VÝPOČTY NAPROSTO NEDOSTATEČNÉ, PROTOŽE KDYŽ PROVÁDÍM ITERATIVNĚ NĚJAKÝ VÝPOČET, TAK SE MI TA CHYBA ZAČNE POSOUVAT, ŽE NEMŮŽU VĚŘIT ANI TŘEBA 4-TÉ CIFŘE OD TÉ NEJLEPŠÍ MOŽNÉ.

DOUBLE PRECISION – 8 BAJTŮ



- PŘESNOST ZÁPISU 16 DECIMÁLNÍCH CIFER
- PŘIDALO SE EXPONENTU A HLAVNĚ NA MANTISE. NEMUSÍ STAČIT PRO DIFRAKCI PŘI VÝPOČTU FÁZE. POTŘEBUJI PŘESNĚ ZNÁT FÁZI (JINAK OBROVSKÉ ZMĚNY V INTERFERENČNÍM JEVU).

QUADRUPLE PRECISION

- SPOLEHLIVÉ ŘEŠENÍ: MULTIPLE PRECISSION ARITHMETIC

JDE O TO, ŽE KAŽDÉ ČÍSLO LIBOVOLNĚ VELKÉ ULOŽÍME TAK ABYCHOM HO MĚLI CELÉ. ULOŽÍME HO V NĚJAKÉM ROZKLADU (NĚJAKÉ BÁZI 10, 16 TKOVÉ ...)

PŘÍKLAD - ČÍSLO 1234, ČÍSLO 5678

$(0 \cdot \overset{10000}{\text{DESETITISÍC}} + 12 \cdot 100 + 34)$ $(0 \cdot 10\,000 + 56 \cdot 100 + 78)$

KDYŽ JE TO PŘEVEDENO DO CELOČÍSELNÉ ARITMETIKY, TAK POČET PLATNÝCH MÍST NENÍ OMEZEN, JEN JE OMEZENA TO, ŽE MUSÍM MÍT DOBŘE NAPROGRAMOVÁNY PROCEDURY CO S TÍM LABORUJÍ.

$$1234 \cdot 5678 = (12 \cdot 56) \cdot 100 \cdot 100 + (78 \cdot 12 + 34 \cdot 56) \cdot 100 + 34 \cdot 78$$

- NEVÝHODA - HOOODNĚ SOUČINŮ

BABBAGE (STROJ) - VYHODNOCOVAL POLYNOMY
- FUNGUJE TAKTO:

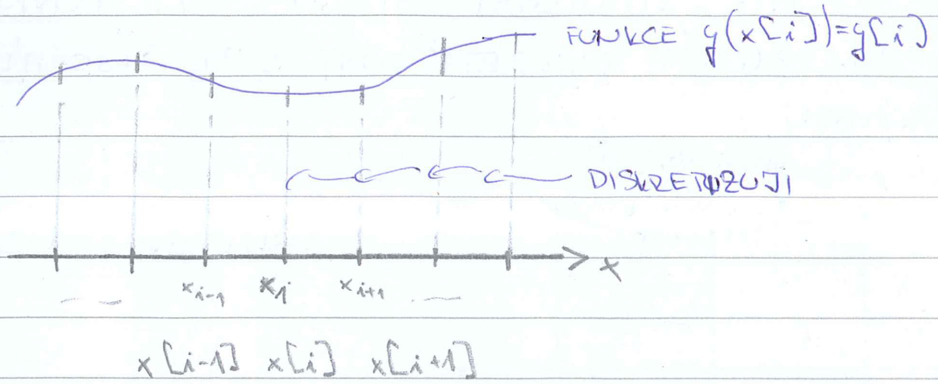
$y = x^2$

x	y	Δy (DVĚ PO SOBĚ JDOUCÍ y)	$\Delta\Delta y$ (ROZDÍL ROZDÍLŮ y)
0	0	1	2
1	1	3	2
2	4	5	2
3	9	7	
4	16		

PRO POLYNOM n-TÉHO ŘÁDU NÁM STAČÍ n-TĚCHTO POSTUPNÝCH ROZDÍLŮ. BABBAGŮV STROJ ALE JEDE OPAČNĚ OD $\Delta\Delta y$ DO y - TO SE SNAŽÍ ZJISTIT

DRUHÝ ZDROJ CHYB

NUMERICKÝ VÝPOČET DERIVACE



NACPU DO TAYLOROVA ROZVOJE V OKOLÍ NĚJAKÉHO BODU

$$y(x_0+\varepsilon) = y(x_0) + y'(x_0)\cdot\varepsilon + 1/2\cdot y''(x_0)\cdot\varepsilon^2 + \dots$$

ZVOLÍM $x[m+1]-x[m]=\varepsilon$ A DOSTANU:

$$y[m+1] = y[m] + y'[m]\cdot\varepsilon + 1/2\cdot y''[m]\cdot\varepsilon^2 + \dots$$

ODŘÍZNU ČLENY S DRUHOU A VYŠŠÍ DERIVACÍ

$$y'[m] = \frac{y[m+1]-y[m]}{\varepsilon} + O(\varepsilon^2)$$

JEDNOBODOVÁ DOPŘEDNÁ DERIVACE

(U ANALITICKÝCH VÝPOČTŮ)
OBVYKLE PLATÍ ČÍM JE ε MENŠÍ TÍM JE TA LIMITA LEPŠÍ, U NUMERICKÝCH VÝPOČTŮ TO TAK, ALE NENÍ, ČÍM MENŠÍ BUDE ε TÍM HORŠÍ BUDE VÝSLEDEK DERIVACE. JE TO TÍM, ŽE MĚ V POČÍTAČI LIMITUJE SINGLE / DOUBLE PRECISION. POKUD MÁME POUZE k PLATNÝCH CIFER RELATIVNÍ PŘESNOST JE PAK $q = 10^{-k}$ (10^{-16}, 10^{-7}), CHYBA ROZDÍLU VE ČITATELI BUDE VŽDY $q\cdot y[m]$, TO NÁM ZMĚNÍ VZOREC:

$$y'[m] = \frac{y[m+1]-y[m]}{\varepsilon} + \frac{q\cdot y[m]}{\varepsilon} + O(\varepsilon^2)$$

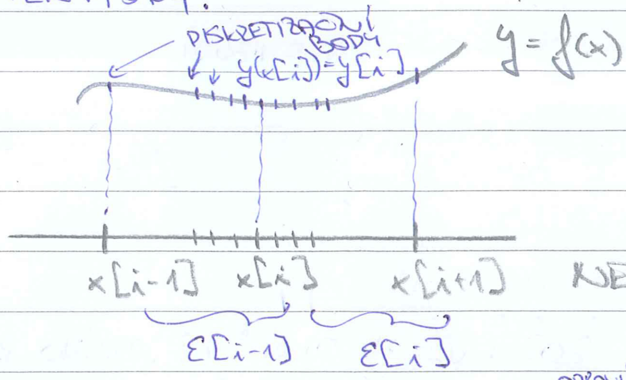
PRO JEDNODUCHOST $y[m]\approx 1$ A $O(\varepsilon^2)\approx\varepsilon^2$
CELKOVOU CHYBU NÁM PAK DÁVÁ VZTAH

$$\frac{q}{\varepsilon} + \varepsilon^2$$

VELKÉ HODNOTY ε A JEJICH NÁSLEDNÉM SNIŽOVÁNÍM ZVYŠUJI PŘESNOST.

DESKRETIZACE DERIVACÍ

- KDYŽ CHCEME SIMULOVAT DIFERENCIÁLNÍ ROVNICE TAK POTŘEBUJEME DISKRETIZOVAT DIFERENCIÁLNÍ OPERÁTORY.



DISKRETIZACE LIBOVOLNÉ FCE

NEMUSÍ BÝT EKVIDISTANTNÍ

- TAYLORŮV ROZVOJ

ODPOVÍDÁ (KTERÉKOLIV) $x \Leftrightarrow x[i]$

PŘILEHLÝ ROZDÍL DVOU DISKRÉT. HODNOT $\varepsilon \longrightarrow \varepsilon[i] = \text{KONST.} = \varepsilon$ POTOM NEMUSÍM PSÁT ε_i

$$y(x+\varepsilon) = y(x) + y'(x)\cdot\varepsilon + \frac{1}{2}y''(x)\cdot\varepsilon^2 + O(\varepsilon^3)$$

CHYBA VYJÁDŘENÍ SE POHYBUJE KOLEM ε^3

$$y[i+1] = y[i] + y'[i]\cdot\varepsilon_i + \Big| \tfrac{1}{2}\cdot y''[i]\cdot\varepsilon_i^2 + O(\varepsilon_i^3)$$

TADY ODŘÍZNU A VYJÁDŘÍM DERIVACI

$$y'[i] = \frac{y[i+1] - y[i]}{\varepsilon}$$

JEDNOBODOVÁ DOPŘEDNÁ DERIVACE (1 BODOVÁ PROTOŽE POTŘEBUJI JEN JEDEN JEDINÝ PRVNÍ BOD, KTERÝ K TOMU POUŽIJU A DOPŘEDNÁ KVŮLI $\pm$

~~TO STEJNÉ~~

- MOHLI JSME ZAČÍT OPAČNĚ A HLEDAT $y(x-\varepsilon)$

$$y[i-1] = y[i] - y'[i]\cdot\varepsilon$$

$$y'[i] = \frac{y[i-1] - y[i]}{\varepsilon}$$

JEDNOBODOVÁ ZPĚTNÁ DERIVACE, ~~VÝJDOU~~

- HODNOTY DOPŘEDNÉ A ZPĚTNÉ DERIVACE SE OBECNĚ LIŠÍ (V ~~STEJNÉ~~ RÁMCI CHYBY $O(\varepsilon^2)$)

- MOHLI BYCHOM VZÍT OBA VZORCE A Z DERIVACI SI Z NICH VYJÁDŘIT, POMOCÍ JEJICH ROZDÍLU.

$$\left.\begin{aligned} y[i+1] &= y[i] + y'[i]\cdot\varepsilon \\ y[i-1] &= y[i] - y'[i]\cdot\varepsilon \end{aligned}\right\} -$$

$$y'[i] = \frac{y[i+1] - y[i-1]}{2\cdot\varepsilon}$$

DVOU BODOVÁ CENTRÁLNÍ DERIVACE

O ŘÁD PŘESNĚJŠÍ NEŽ DOPŘEDNÉ, SYMETRIZUJE BODY NAPRAVO A NALEVO

– NEBO SE PODÍVÁME CO SE BUDE DÍT V BODU $y[i+2]$

PROTOŽE JE TO O 2ε ... $i+2$

$$y[i+2] = y[i] + y'[i]\cdot 2\cdot\varepsilon + \tfrac{1}{2}\, y''[i]\cdot 4\cdot\varepsilon^2$$
$$y[i+1] = y[i] + y'[i]\cdot\varepsilon + \tfrac{1}{2}\cdot y''[i]\cdot\varepsilon^2 \qquad |\cdot 4$$

$$y[i+1] - y[i+2] = \overset{3}{\cancel{4}}y[i] - \cancel{y[i]} + \overset{2}{\cancel{4}}y'[i]\varepsilon - \cancel{2y'[i]\varepsilon} + \cancel{2y''[i]\varepsilon^2} - \cancel{2y''[i]\varepsilon^2}$$

$$y[i+1] - y[i+2] = 3y[i] + 2y'[i]\varepsilon$$
$$y'[i] = \frac{y[i+1] - y[i+2] - 3y[i]}{2\varepsilon}$$

DVOUBODOVÁ
DOPŘEDNÁ DERIVACE
(ZLEPŠENÍ PŘESNOSTI)

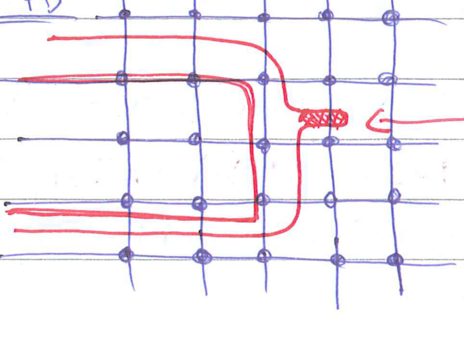
VYJÁDŘENÍ DRUHÉ DERIVACE

$$+\begin{cases} y[i+1] = y[i] + y'[i]\varepsilon + \tfrac{1}{2} y''[i]\varepsilon^2 + \mathcal{O}(\varepsilon_i^3) \\ y[i-1] = y[i] - y'[i]\varepsilon + \tfrac{1}{2} y''[i]\varepsilon^2 + \mathcal{O}(\varepsilon_i^3) \end{cases}$$

$$y[i+1] + y[i-1] = 2y[i] + y''[i]\varepsilon^2$$
$$y''[i] = \frac{y[i+1] - 2y[i] + y[i-1]}{\varepsilon^2}$$

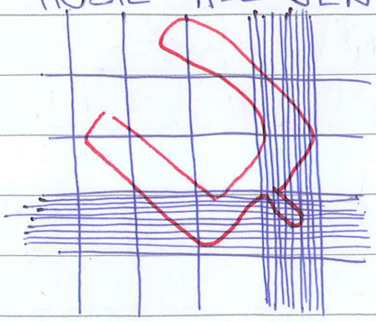
DVOUBODOVÁ CENTRÁLNÍ DRUHÁ DERIVACE, ČÍM VYŠŠÍ DERIVACE TÍM VÍCE BODOVÉ TO MUSÍ BÝT. U METODY KONEČNÝCH DIFERENCÍ SE MUSÍ DISKRETIZOVAT DIFERENCIÁLNÍ OPERÁTORY A MUSÍ SE TO PROVÉST NA ZPRAVIDLA PRAVIDELNÉ SÍTI.

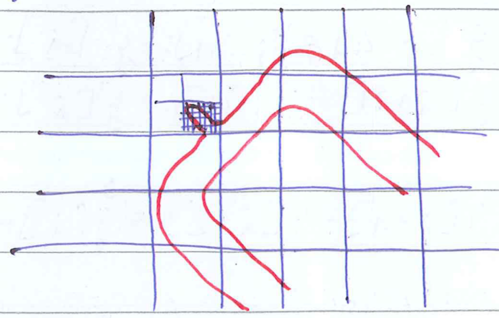
VE 2D FD



NOSNÍK A CHCI ZJISTIT OHYB V TYČINCE PRO FD PROBLÉM MUSÍM UDĚLAT VELICE HUSTOU SÍŤ VŠUDE, NEJEN V TYČINCE. SPOUSTA ZBYTEČNÝCH INFORMACÍ.

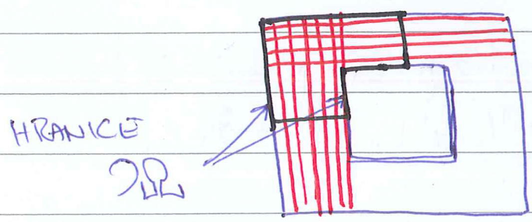
BYLY VYVINUTY VARIANTY ABY TO NEMUSELO BÝT CELÉ HUSTÉ ALE JENOM ČÁST.





HLAVNÍ VÝHODA FD, PRO EKVIDISTANTNÍ SÍŤ SNADNO NAPROGRAMOVATELNÁ, JE TO PŘEHLEDNÉ.
PRO NEEKVIDISTANTNÍ SÍŤ, ŠÍLENÉ KÓDY.
PROTO LEPŠÍ PŘEJÍT K FEM.

KLASICKÁ ÚLOHA



BUĎ KOUKÁM NA ROZLOŽENÍ POTENCIÁLŮ NEBO NA ROZLOŽENÍ TEPLOTY, DVĚ LAPLACEOVY ROVNICE.

PROTO OBJEKT MÁ SYMETRII MOHU ROZDĚLIT
JE NUTNÉ SPECIFIKOVAT OKRAJOVÉ PODMÍNKY, MŮŽEME POUŽÍT DIRICHLETOVU PODMÍNKU. TA SPECIFIKUJE HODNOTY PROMĚNNÉ V NĚKTERÝCH BODECH (OBVYKLE $\partial\Omega$)
HRANICE $\partial\Omega$, OBLAST SAMOTNÁ Ω.

$$u\big|_{\partial\Omega} = u(\vec{x})$$

PRO OKRAJOVÉ BODY NESESTAVUJI ROVNICE, PROTOŽE V NICH TY HODNOTY ZNÁM JSOU ZADANÉ.
(PRO DIRICHLETOVU PODMÍNKU

JINÁ SITUACE NASTANE PRO NORMÁLOVOU DERIVACI, TOMU SE ŘÍKÁ NEUMANNOVA PODMÍNKA, TA SPECIFIKUJE HODNOTY NORMÁLOVÉ DERIVACE PROMĚNNÉ V NĚKTERÝCH BODECH (OBVYKLE $\partial\Omega$)

4

TOHLE SE ZADÁVÁ

$$\vec{\nabla} u \cdot \vec{n}\Big|_{\partial\Omega} = |\vec{M}_n|(\vec{x})$$

TOK ZADANÉ VELIČINY KOLMO K HRANICI
TADY SE ROVNICE SESTAVUJÍ (V UZLECH NA HRANICI).
TATO ÚLOHA BY BYLA ZADÁNA PRO DIRICHLETOVU PODMÍNKU. POKUD SI TO ALE OŘÍZNU, TAK MI TAM VZNIKNE FIKTIVNÍ OKRAJ (VZNIKNE ZE SYMETRIE). PROTOŽE TO ZRCADLÍM, TAKŽE SKRZ HRANICI NETEČE ZKOUMANÁ VELIČINA, JINAK BY TO NEBYLO SYMETRICKÉ.

$$\vec{\nabla} \cdot u \cdot \vec{n} = 0 \qquad \text{(NEUMANNOVA PODMÍNKA)}$$

DALŠÍM TYPEM PODMÍNKY JE KOMBINOVANÁ (ROBINOVA) PODMÍNKA. HODÍ SE PRO VLNOVOU ROVNICI, UDĚLÁME LINEÁRNÍ KOMBINACI:

$$a \cdot u + b\, u_n \big|_{\partial\Omega} = f(\vec{x})$$

NEPŘEDEPÍŠI HODNOTU ANI NORMÁLOVOU DERIVACI, ALE NĚJAKOU JEJICH KOMBINACI.

LAPLACIÁN (VE VÍCE DIMENZÍCH)

DIFERENCIÁL PRO NĚKOLIK SLOŽEK HLEDANÉ FUNKCE

$$y^j(x^i + \varepsilon^i) = y^j(x^i) + dy^j\big|_{x^i} + \frac{1}{2!} d^2 y^j\big|_{x^i} + \frac{1}{3!} d^3 y^j\big|_{x^i} + \dots$$

POZOR NENÍ DISKRETIZACE (TY INDEXY PATŘÍ DIMENZI)

V KARTÉZSKÝCH SOUŘADNICÍCH BINOMICKÁ VĚTA

$$d^m y^j = \left(\sum_i \frac{\partial y^j}{\partial x^i} \cdot \varepsilon^i\right)^m$$

LAPLACIÁN $L y^j(x) = \sum_i p_i(x^i) \cdot \frac{\partial^2 y^j}{\partial x^{i2}} + \sum_i q_i(x^i) \cdot \frac{\partial y^j}{\partial x^i} + r(x^i) \cdot y^j$

OBECNÝ PARCIÁLNÍ ~~LINEÁRNÍ~~ DIFERENCIÁLNÍ OPERÁTOR DRUHÉHO ŘÁDU, JE LINEÁRNÍ

PŘIČEMŽ V TEORII SE TAKÉ ZAVÁDÍ OPERÁTOR SPRUŽENÝ

$$L^+ y^j(x^i) = \sum_i \frac{\partial^2}{\partial x^{i2}} P_i y^j - \sum_i \frac{\partial}{\partial x^i} q_i y^j + r(x^i) y^j$$

$L y^j = L^+ y^j$ SAMOZDRUŽENÉ OPERÁTORY

KLASICKÝ LAPLACIÁN V KARTÉZSKÝCH SOUŘADNICÍCH

$$\Delta y^j = \sum \frac{\partial^2 y^j}{\partial x^{i2}}$$

COŽ JE PŘÍKLADEM SAMOZDRUŽENÉHO OPERÁTORU.

LAPLACIÁN NECHÁM PŮSOBIT NA SKALÁRNÍ FUNKCI A DOSTANU

$$\Delta u = \frac{1}{\sqrt{g}} \left(\sqrt{g}\, g^{\alpha\beta} f_\alpha \right)_\beta = \frac{1}{\sqrt{g}} \sum \left(\sqrt{g} \cdot g^{\alpha\beta} \cdot f_\alpha \right)_\beta$$

$g^{\alpha\beta}$ JE METRIKA $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ $g = \det |g^{\alpha\beta}|$

$$\Delta u = \frac{1}{\sqrt{g}} \Big(\underbrace{(\sqrt{g}\, g^{\alpha\beta})_\beta}_{\substack{\text{PRVNÍ} \\ \text{DERIVACE} \\ P}} f_\alpha + \underbrace{(\sqrt{g}\, g^{\alpha\beta})}_{\substack{\text{DRUHÁ} \\ \text{DERIVACE} \\ q}} f_{\alpha\beta} \Big) \qquad \boxed{P' = q}$$

TOTO JE VLASTNĚ TVAR SDRUŽENÉHO OPERÁTORU.
PROČ JE TO TEDY TAK VÝHODNÉ JE POUŽÍVAT?
KDYŽ SE TŘEBA V KVANTOVÉ MECHANICE POKUSÍM UDĚLAT REPREZENTACI, SPOČÍTAT SCHRODINGEROVU ROVNICI S TAKOVÝMTO OPERÁTOREM, ZJISTÍME, ŽE TYTO SAMOSDRUŽENÉ OPERÁTORY SE REDUKUJÍ NA NORMÁLNÍ MATICE. TY MAJÍ TAKOVOU ZVLÁŠTNÍ VLASTNOST, ŽE JEJICH VLASTNÍ VEKTORY POKRÝVAJÍ CELÝ HILBERTŮV PROSTOR.

5

PŘ) ROVNICE NA VEDENÍ TEPLA

$$\rho \cdot c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(\lambda \nabla T) + q$$

BUDE NÁS ZAJÍMAT JAK SE V NĚJAKÉM VZORKU MĚNÍ ROZLOŽENÍ TEPLOTY. q ... VÝKON DODANÝ DO VZORKU $[W \cdot m^{-3}]$

c_p ... MĚRNÁ TEPELNÁ KAPACITA $[J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}]$; ρ ... HUSTOTA $[kg \cdot m^{-3}]$

λ ... MĚRNÁ TEPELNÁ VODIVOST $[W \cdot K^{-1} \cdot m^{-1}]$

JEDNOTKY

LEVÁ STRANA

$$kg \cdot m^{-3} \cdot J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1} \cdot \underbrace{K \cdot s^{-1}}_{\frac{\partial T}{\partial t}} = \underbrace{J \cdot s^{-1}}_{W} \cdot m^{-3} = W \cdot m^{-3}$$

∇

PRAVÁ STRANA

$$m^{-1} \cdot W \cdot K^{-1} \cdot m^{-1} \cdot \underbrace{K \cdot m^{-1}}_{\nabla T} = W \cdot m^{-3}$$

HUSTOTA VÝKONU

STACIONÁRNÍ ŘEŠENÍ: $\frac{\partial T}{\partial t} = 0$

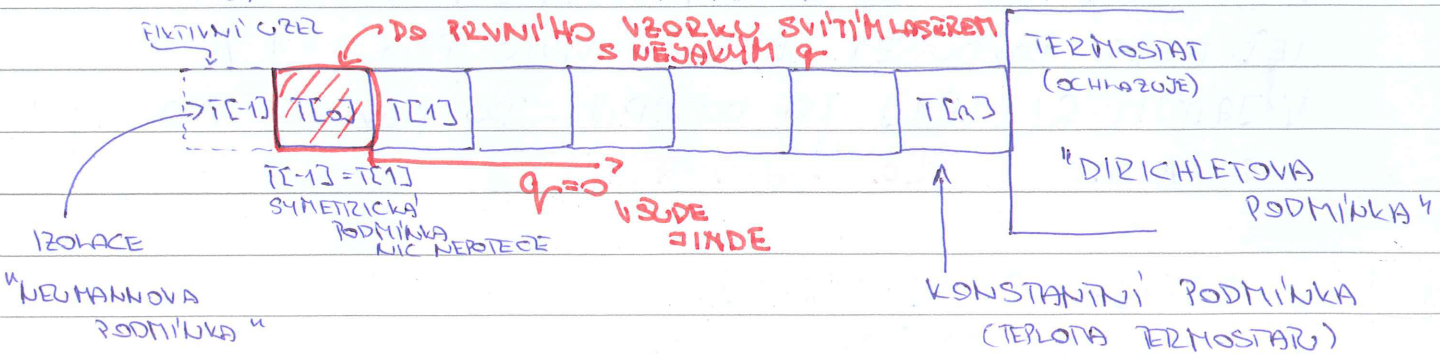
$$0 = \nabla(\lambda \cdot \nabla T) + q$$

- VYBERU MATERIÁL HOMOGENNÍ A λ VYJMU PŘED ~~LAPLACIÁN~~ GRADIENT

$$0 = \lambda \nabla(\nabla T) + q \qquad \nabla \cdot \nabla = \Delta$$

$$0 = \lambda \cdot \Delta T + q$$

- JEŠTĚ SE OMEZÍME NA 1D A BUDU MÍT TAKOVÝ PÁSEČEK



$\nabla T \cdot n|_0 = 0$

PODOBNÉ ZRCADLÍCÍ PODMÍNCE, TEDY ŽE ŽÁDNÝ VÝKON NEPOTEČE SKRZ TU STĚNU VLEVO NĚKAM DO PROSTORU (OKOLÍ).

MUSÍME NYNÍ SESTAVIT ROVNICI V KAŽDÉM UZLU, V KAŽDÉ ČTVERECKU, KDE CHCI ZÍSKAT TEPLOTU. V T[n] TEPLOTU ZNÁM (NEBUDU SESTAVOVAT) SESTAVÍME NEJDŘÍVE ROVNICE PRO T[1] AŽ T[n-1], BUDOU TEDY BEZ ČLENU q.

PRO $i=1 \Rightarrow T[1]$

ZREDUKUJE SE

$$\lambda \cdot T'' = 0 \Rightarrow T'' = 0$$

DRUHÁ DERIVACE PRO T

$$\frac{T[i-1] - 2T[1] + T[i+1]}{\varepsilon^2} = 0$$

NEZAJÍMÁ ME ε, PROTOŽE JE TO ROVNO NULE

PRO $i=2 \Rightarrow T[2]$

$$\frac{T[1] - 2T[2] + T[3]}{\varepsilon^2} = 0$$

PRO $i=3 \Rightarrow T[3]$

$$\frac{T[2] - 2T[3] + T[4]}{\varepsilon^2} = 0$$

$\vdots$

PRO $i=N-1 \Rightarrow T[N-1]$

$$\frac{T[N-2] - 2T[N-1] + T[N]}{\varepsilon^2} = 0$$

NYNÍ T[0] MOHU DOPRAVIT AŽ T[N] A O TO SE TEĎ BUDU POKOUŠET. VEZMU ROVNIC PRO $i=1$ A VYJÁDŘÍM SI T[1] TO DOSADÍM DO ROVNICE PRO $i=2$ ATD. $T[0] \Rightarrow T[N]$

$i=1$ $\quad -2T[1] = -T[i+1] - T[i-1]$

$$T[1] = \frac{T[2] + T[0]}{2}$$

$i=2$ $\quad \frac{T[2] + T[0]}{2} + T[3] - 2T[2] = 0 \quad / \cdot 2$

6

$$T[0] + \cancel{T[2]} - \overset{3}{\cancel{4}}T[2] + 2T[3] = 0$$

$$T[2] = \frac{T[0] + 2T[3]}{3}$$

$\underline{i=3}$

$$\frac{T[0] + 2T[3]}{3} - 2T[3] + T[4] = 0 \qquad / \cdot 3$$

$$T[0] + \cancel{2T[3]} - \cancel{6}T[3] + 3T[4] = 0$$

$$T[3] = \frac{T[0] + 3T[4]}{4}$$

Z TOHO VIDÍM:

$$T[i] = \frac{T[0] + i\,T[i+1]}{i+1}$$

$\underline{i = N-1}$

$$T[N-1] = \frac{T[0] + (N-1)\cdot T[N]}{N}$$

TEĎ S TÍM VYJEDEME ZASE NAHORU OPAČNÝM SMĚREM ABYCHOM TAM MĚLI JEN T[0] A T[N].

$\underline{i = N-2}$

$$T[N-2] = \frac{T[0] + (N-2)\cdot T[N-1]}{N-1}$$

$$T[N-2] = \frac{T[0] + (N-2)\cdot \frac{T[0] + (N-1)\cdot T[N]}{N}}{N-1}$$

$$N\cdot(N-1)\cdot T[N-2] = \underbrace{N\cdot T[0] + (N-2)\cdot T[0]}_{\text{SLOUČÍME}} + (N-2)\cdot(N-1)\cdot T[N]$$

$$N\cdot\cancel{(N-1)}\cdot T[N-2] = 2\cdot\cancel{(N-1)}\cdot T[0] + (N-2)\cdot\cancel{(N-1)}\cdot T[N]$$

$$N\cdot T[N-2] = 2\cdot T[0] + (N-2)\cdot T[N]$$

SPOJÍM ZJIŠTĚNÍ Z ROVNIC $i=N-2$ & $i=N-1$

$$N\cdot T[i] = (N-i)\cdot T[0] + i\cdot T[N]$$

$$T[i] = \frac{(N-i)T[0] + i\cdot T[N]}{N}$$

V LIBOVOLNÉM BODĚ TOHO PÁSKU TO MÁME ZADÁNO POMOCÍ OKRAJOVÝCH HODNOT.

UVNITŘ PÁSKU MEZI JEHO KRAJNÍMI HODNOTAMI TA TEPLOTA/POTENCIÁL JE ROZLOŽENA LINEÁRNĚ.

$\underline{i=1}$

$$T[1]=\frac{(N-1)T[0]+T[N]}{N}$$

PROTOŽE TAM SVÍTÍM LASEREM

$\underline{i=0}$

$$\frac{T[-1]-2T[0]+T[1]}{\varepsilon^2}+\frac{q}{\lambda}=0$$

$T[-1]=T[1]$

$$\frac{2T[1]-2T[0]}{\varepsilon^2}+\frac{q}{\lambda}=0$$

$$\frac{\frac{2(N-1)T[0]+2T[N]}{N}-T[0]}{\varepsilon^2}+\frac{q}{\lambda}=0$$

$$2\cdot\frac{-T[0]+T[N]}{\varepsilon^2\cdot N}+\frac{q}{\lambda}=0$$

$$-T[0]+T[N]+\frac{q\cdot\varepsilon^2\cdot N}{2\cdot\lambda}=0$$

$$N=\varepsilon^{-1}\cdot l^{1}=\frac{l}{\varepsilon}$$

$$T[0]=T[N]+\frac{q\,\varepsilon^2\cdot N}{2\lambda}=T[N]+\frac{q\cdot\varepsilon\cdot l}{2\lambda}=T[N]+\frac{q^{*}\cdot l}{2\lambda}=T[0]$$

VÝSLEDEK BY NEMĚL ZÁLEŽET NA POČTU KROKU PROTO $N=\frac{l}{\varepsilon}$; KDE l JE DÉLKA TYČE. TEĎ ODSTRANÍME $\underline{\varepsilon}$ DÍKY TOMU ŽE $\underline{q}$ $[W\cdot m^{-3}]$ PŘEJDE POHLCENÍM $\underline{\varepsilon}$ NA $[W\cdot m^{-2}]$ ... q^{*} JE CELKOVÝ VÝKON POHLCENÝ V PRVNÍM DÍLKU.

6

METODA KONEČNÝCH DIFERENCÍ
– PROBLÉM VLASTNÍCH HODNOT

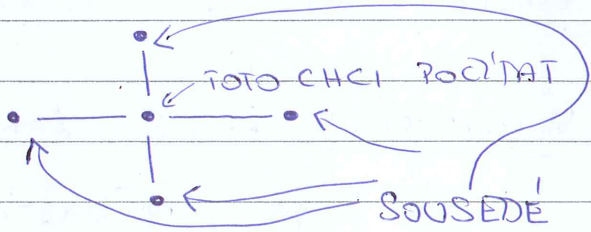
SCHRODINGEROVA ROVNICE V 1D

- FUNGUJE TO I VE VŠECH DIMENZÍCH

- LAPLACIÁN V 1D 

$$y'' = \frac{y[i+1] - 2y[i] + y[i-1]}{\varepsilon^2}$$

- LAPLACIÁN VE 2D

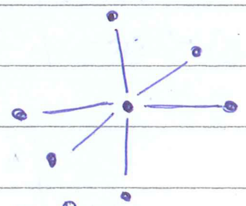


$$\Delta f(x;y) = f_{xx} + f_{yy} =$$

$$= \frac{y[i;j+1] - 2y[i;j] + y[i;j-1]}{\varepsilon^{2x}} + \frac{y[i+1;j] - 2y[i;j] + y[i-1;j]}{\varepsilon^{2y}}$$

PROBLÉM MŮŽE BÝT V KROKU ε, TEN MŮŽE BÝT JINÝ V OSE x; y. ZPRAVIDLA SE TO NESTÁVÁ ALE OBČAS ANO.

- LAPLACIÁN VE 3D



6 CENTRÁLNÍCH PRVKŮ – PRŮMĚR SOUSEDŮ

PŘ) SCHRODINGEROVA ROVNICE – STACIONÁRNÍ STAV

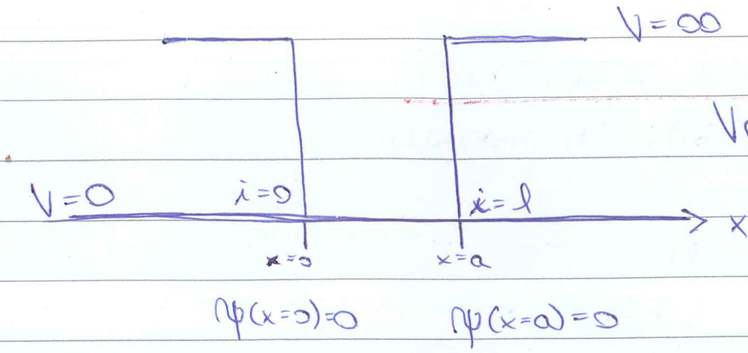
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \underbrace{V(\vec{x})}_{\text{VYPADNE}}\right]\psi(\vec{x}) = E\,\psi(\vec{x})$$

VYPADNE – VEZMEME DO HLUBOKOU POTENCIÁLOVOU JÁMU ✓

$\Downarrow$

0

- $V(\vec{x}) = 0$ NEMUSÍME SE PAK TRÁPIT S ŘEŠENÍM VNE TÉTO JÁMY.



$V[i]=V(x[i])$

$\psi(x=0)=0$ $\psi(x=a)=0$

1D: MÁME DRUHOU DERIVACI, DÍKY LAPLACIÁNU, V KRAJNÍCH UZLECH ROVNICE NESESTAVUJI, PROTOŽE TAM MÁME DIRICHLETOVU OKRAJOVOU PODMÍNKU ... $\psi=0$

KRAJNÍ UZLY: $i=0$ & $i=N$

VNITŘNÍ UZLY $i=1$ .... $i=N-1$ TADY TO SESTAVOVAT BUDU

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\left(\frac{\psi[i-1]-2\psi[i]+\psi[i+1]}{\varepsilon^2}\right)+\cancel{V[i]}\,\psi[i]=E\psi[i]$$

UVNITŘ JÁMY $V[i]=0$

$\psi[i=0]=0$ & $\psi[i=N]=0$

ONO TO $\psi[i]$ JE TADY A MÁ BÝT MIMO, ALE PRO PŘEHLEDNOST ODKUD SE TO VZALO JSEM TO TAM DOPSAL

$$-\frac{\hbar^2}{2m\varepsilon^2}\begin{pmatrix} -2(\psi[i]) & +1(\psi[i+1]) & & 0\\ 1(\psi[i-1]) & -2(\psi[i]) & & \\ & & \ddots & 1(\psi[i+1]) \\ 0 & & 1(\psi[i-1]) & -2(\psi[i])\end{pmatrix}\psi[i] = E\begin{pmatrix}1&&&0\\&1&&\\&&1&\\0&&&1\end{pmatrix}\psi[i]$$

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & & 0\\ -1 & 2 & & \\ & & \ddots & 1 \\ 0 & & 1 & 2\end{pmatrix}\psi[i] = \underbrace{\frac{2m\varepsilon^2\cdot E}{\hbar^2}}_{\lambda}\begin{pmatrix}1&&&0\\&1&&\\&&1&\\0&&&1\end{pmatrix}\psi[i]$$

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & & 0\\ -1 & 2 & & \\ & & \ddots & 1 \\ 0 & & 1 & 2\end{pmatrix}\psi[i] - \begin{pmatrix}\frac{2m\varepsilon^2\cdot E}{\hbar^2}=\lambda&&0\\&\lambda&\\0&&\lambda\end{pmatrix}\psi[i]=0$$

HLAVNÍ DIAGONÁLA OBLEPENÁ NEJBLIŽŠÍMI DIAGONÁLAMI NIŽŠÍHO STUPNĚ

7

$$\begin{vmatrix} 2-\lambda & -1 & & 0 \\ -1 & 2-\lambda & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & & -1 & 2-\lambda \end{vmatrix} \psi[i] = 0$$

- PŘEDPIS PRO NALEZENÍ VLASTNÍCH HODNOT,
- BUĎ BUDOU VŠECHNA $\psi[i]$ NULOVÁ NEBO HLEDÁME VLASTNÍ HODNOTY A VLASTNÍ VEKTORY

TEDY TA VLASTNÍ HODNOTA SNÍŽÍ RANK MATICE O JEDNIČKU NEBO O VÍCE ŘÁDKŮ.

1) POZOROVÁNÍ – MATICE, KTERÁ MÁ $m \times m$ PRVKŮ, MÁ TAKY m VLASTNÍCH HODNOT, NENÍ JICH ∞ MNOHO.

ANALITICKÉ ŘEŠENÍ JE VE TVARU

$$E_i = \frac{\pi^2 \cdot \hbar^2}{2m\,a^2}\, i^2$$

A JEJICH ∞ MNOHO ASI TĚCH EN HLADIN (i)

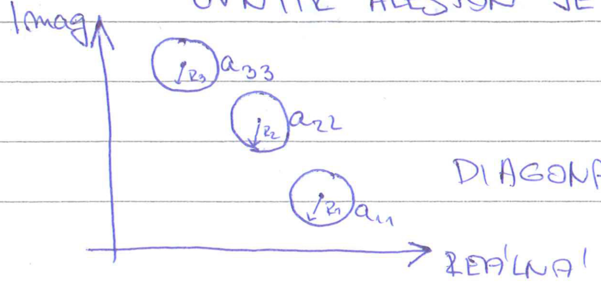
TO ŽÁDNÁ NUMERICKÁ SIMULACE NEMŮŽE NAPODOBIT. NAŠE MATICE TEDY BUDE MÍT VŽDY KONEČNOU DIMENZI. ANALITICKÉMU ŘEŠENÍ SE BUDEME BLÍŽIT KDYŽ m BUDE HODNĚ VELKÉ. PRO $20 = m$ UZLŮ TO DÁVÁ POMĚRNĚ ROZUMNÉ VÝSLEDKY, JAK ALE POZNAT KOLIK JE DOBRÉ MÍT TĚCH UZLŮ. K TOMU SLOUŽÍ GERSHGORINOVY KRUHY.

2) GERSHGORINOVY KRUHY

- PRO ČTVERCOVOU MATICI $A = (a_{ij})$ STANOVÍME POLOMĚRY $R_i = \sum_{i \neq j} |a_{ij}|$

POLOMĚR NA i-TÉM ŘÁDKU

- KAŽDÁ VLASTNÍ HODNOTA MATICE A POTOM LEŽÍ UVNITŘ ALESPOŇ JEDNOHO Z KRUHŮ $D(a_{ii}; R_i)$



DIAGONÁLNÍ ČLENY, KE KAŽDÉMU SPOČÍTÁME R_i

PRAKTICKÉ STANOVENÍ MAXIMÁLNÍHO POČTU UZLŮ, JE TAKOVÉ, ŽE SI ŘEKNEME ABY KAŽDÁ VLASTNÍ HODNOTA BYLA URČENA S CHYBOU MAXIMÁLNĚ TOLIK A TOLIK (STANOVÍM SI) : R_i

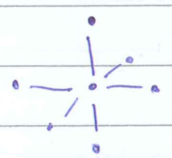
R_i - JSOU VLASTNĚ CHYBY, KTERÉ SI STANOVÍME.

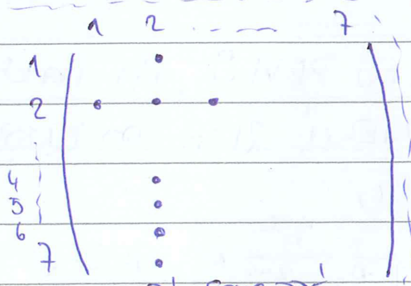
PROTOŽE HODNOTY VEDLE DIAGONÁLY TĚŽKO ODSTRANÍME, NIKDY NEBUDOU ROVNY NULE, PŘEVÁDÍM TO NA DIAGONÁLNÍ TVAR ITERATIVNĚ PROTO PODMÍNKA UNTIL =< CHYBA.

POROVNÁNÍ S NULOU V NUMERICKÉ ANALÝZE NEMÁ SMYSL.

3) LAPLACIÁN V 1D - VŽDY VYJDE JAKO TRIDIAGONÁLNÍ MATICE, UMOŽŇUJE OČÍSLOVAT UZLY PŘIROZENĚ.

VE 3D





POZN. NEJBLIŽŠÍ SOUSEDÉ

$$A = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ & & & & c_{N-1} \\ 0 & \cdots & 0 & a_N & b_N \end{pmatrix}$$

DETERMINANT MATICE A SE POČÍTÁ POMOCÍ ZOBECNĚNÝCH KONTINUANTŮ:

$$k_0 = 1 \quad k_1 = a_1 \qquad n = 2 \dots N \quad k_n = a_n k_{n-1} - b_{n-1} c_{n-1} k_{n-2}$$

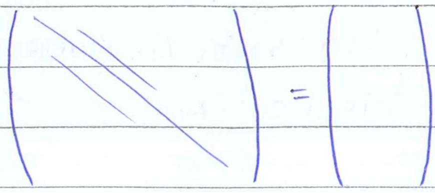
NENÍ ITERATIVNÍ ALE REKURZIVNÍ

V OBECNÉM PŘÍPADĚ BYCHOM A MUSELI PŘEVÉST ITERATIVNĚ NA ◥ (HORNÍ TROJÚHELNÍKOVÁ MATICE) A POTOM JE DETERMINANT ROVEN SOUČINU DIAGON. ČLENŮ.

$A \longrightarrow$ ◥ $\qquad \det$ ◥ $= \prod \mathrm{diag}\, A$

8

ŘEŠENÍ TRIDIAGONÁLNÍ MATICE:



MATICE PRAVÁ STRANA

$i = 2; 3 \ldots N-1$

1) $b_1 x[1] + c_1 x[2] = d_1$

2) $a_i x[i-1] + b_i x[i] + c_i x[i+1] = d_i \quad ; i = 2; 3; \ldots N-1$

N) $a_N x[N-1] + b_N x[N] = d_N$

TYTO ROVNICE MOHU PŘEVÉST NA TVAR

$$x[i] + c_i' \cdot x[i+1] = d_i' \qquad i = 1; \ldots N-1$$

$$x[N] = d_N$$

$$c_1' = \frac{c_1}{b_1} \qquad c_i' = \frac{c_i}{b_i - c_{i-1} \cdot a_i} \qquad i = 2; \ldots N-1$$

PRVNÍ ZNÁM -> ZJISTÍM DRUHÝ
POMOCÍ DRUHÉHO ZJISTÍM TŘETÍ ATD...

$$d_1' = \frac{d_1}{b_1} \qquad d_i' = \frac{d_i - d_{i-1} \cdot a_i}{b_i - c_{i-1}' \cdot a_i} \qquad i = 2; \ldots N$$

TAKTO VZNIKLOU SOUSTAVU MOHU ZPĚTNÝM DOSAZOVÁNÍM "SNADNO" REKURZIVNĚ VYŘEŠIT
TOTO MOHU POUŽÍT AŽ KDYŽ ZNÁM NĚJAKOU VLASTNÍ HODNOTU, TU TAM DOSADÍM A POČÍTÁM...

VLASTNÍ HODNOTY - PRO TRIDIAGONÁLNÍ MATICI,

PLATÍ KDYŽ $a_i = a$; $b_i = b$; $c_i = c$

$$\lambda_i = b \mp 2\sqrt{c \cdot a} \cdot \cos\left(\frac{i\pi}{N+1}\right)$$

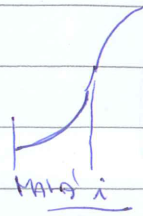
$b = 2$; $a = c = 1$;

$$\lambda_i = 2 \mp 2 \cdot \cos\left(\frac{i\pi}{N+1}\right) \qquad \text{PRO } i \text{ MALÉ } \lambda_i \approx 2 - 2$$

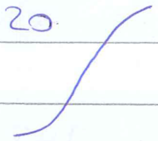
ROZVOJ COSINU

$$\left(1 - \frac{1}{2} \frac{i^2 \cdot \pi^2}{(N+1)^2}\right) = -\frac{i\pi^2}{(N+1)^2}$$

ENERGIOVÉ HODNOTY PRO MALÉ HODNOTY i BUDOU KVADRÁT, POTOM TAYLORŮV ROZVOJ COSINU PŘESTANE FUNGOVAT A PŘEVLÁDNE COSINUS



BYLO VIDĚT NA NUMECKÉ SIMULACI $N=20$



VŠECHNY VZTAHY PRO TRIDIAGONÁLNÍ MATICE JDOU VYTVOŘIT PRO MATICE, KTERÉ JSOU BLOKOVĚ TRIDIAGONÁLNÍ.

$$\begin{pmatrix} \boxed{B_{11}} & \boxed{C_{11}} & \\ \boxed{A_{22}} & \boxed{B_{22}} & \boxed{C_{22}} \\ & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

BCA JSOU MATICE $k \cdot k$

(OBECNÝCH)
VE VÍCE DIMENZÍCH: 1) $A \xrightarrow{\text{PŘEVÉST}}$ ◥

- NA DIAGONÁLE PAK BUDEME MÍT VLASTNÍ HODNOTY
- PŘÍMO TO LZE VYŘEŠIT GAUSSOVOU ELIMINACÍ (Ř SOUSTAVU)
- det ◥ = SOUČIN DIAGONÁLNÍCH ČLENŮ

QR DEKOMPOZICE

REÁLNOU MATICI A ROZLOŽÍM NA SOUČIN MATIC Q A R:

$$A = Q \cdot R$$

KDE Q JE ORTOGONÁLNÍ MATICE, PRO KTEROU PLATÍ $Q^T \cdot Q = E$ A R JE ◥ MATICE. PRO MATICI A V $\mathbb{C}$ JE Q UNITÁRNÍ

JAK TO FUNGUJE?
1) $H_0 = A$ — H_0 … POMOCNÁ MATICE
2) $H_0 = Q_0 \cdot R_0$ — $k=0$ …
3) $H_{k+1} = R_k \cdot Q_k$ — VYTVOŘÍM
4) SMYČKA S 2) H_{k+1}

ITERACÍ DOSPĚJEME K ◥ MATICI A

BOHUŽEL $O(n^3)$ → DLOOOOOOUHÉ

(9)

(REFLEXÍ)

QR DEKOMPOZICE POMOCÍ HOUSEHOLDEROVY TRANSFORMACE

OBTÍŽNOSTI: $\underbrace{\frac{10}{3} m^3}_{\text{REFLEXE}} + \underbrace{O(m^2)}_{\text{QR ROZKLAD}}$

KROKY:

1) VEZMEME 1 SLOUPEC MATICE H h_{j1}, JE NORMA $|h_{j1}|$
2) VYPOČTÁME POMOCNÝ VEKTOR $u_j = h_{j1} - |h_{j1}| \cdot e_1$
   e_1 JEDNOTKOVÝ VEKTOR $e_1 = (1; 0; 0; \dots 0)$
3) SPOČTÁME POMOCNOU MATICI

$$Q[1]_{ij} = E_{ij} - \frac{2}{|u_j|^2} u_i u_j$$

NORMA VEKTORU u_j

4) POTOM SESTAVÍME

$$H[1] = Q[1] \cdot H \quad \text{PRVNÍ ITERACE } \underline{H}$$

$$(H[k] = Q[k] \cdot H[k-1])$$

H[1] MÁ V PRVNÍM SLOUPCI POD DIAGONÁLOU NULY

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} \xrightarrow{Q[1]} \begin{pmatrix} a' & b' & c' \\ 0 & \boxed{e'} & f' \\ 0 & h' & i' \end{pmatrix} \xrightarrow{Q[2]} \begin{pmatrix} a' & b' & c' \\ 0 & e'' & f'' \\ 0 & 0 & i'' \end{pmatrix}$$

TADY POZOR, Q MATICE SE BUDE NEUSTÁLE ZMENŠOVAT, ZATÍMCO H BUDE POŘÁD STEJNÁ, JE TEDY NUTNÉ MATICI Q ZHORA DOPLNIT O MATICI JEDNOTKOVOU

$$\begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & Q[i] \end{pmatrix}$$

5) $Q = Q[1] \cdot Q_2[2] \dots Q[k]$ OPĚT DOPLŇUJ! JEDNOTKOVOU!!!

$R = Q^T \cdot H$

$H = Q \cdot R$

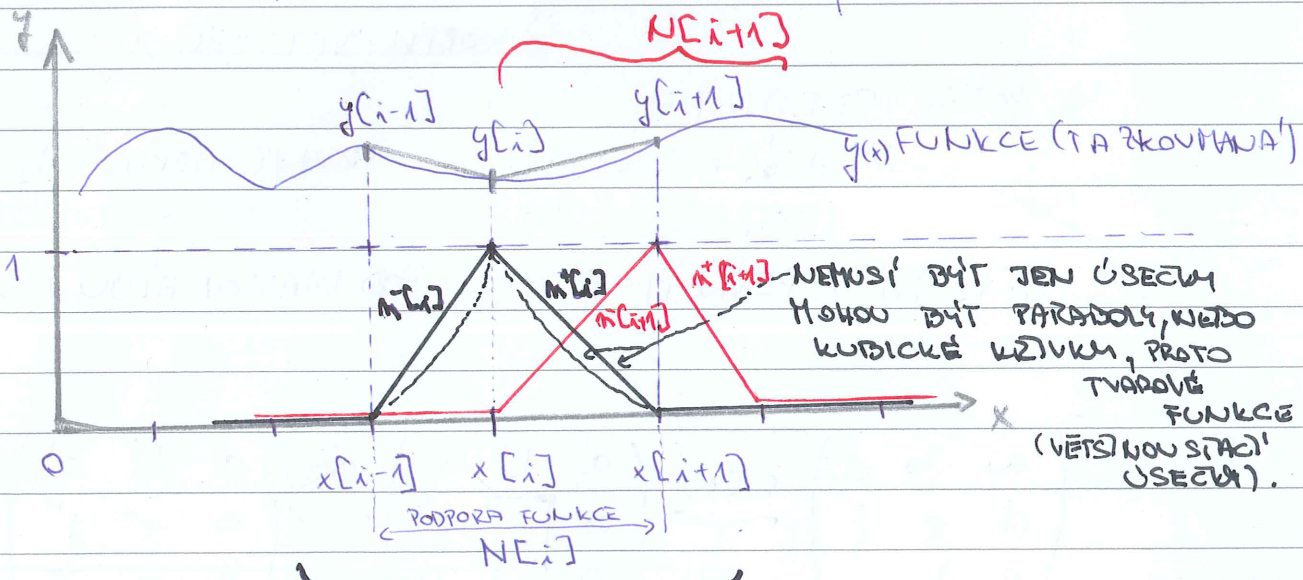
FEM V 1D

METODA KONEČNÝCH DIFERENCÍ — (MKD), PRŮBĚH FUNKCE JE PŘESNÝ (BEZ APROXIMACE), VYJÁDŘENÍ DERIVACE PŘIBLIŽNÉ (APROXIMUJEME)

METODA KONEČNÝCH PRVKŮ — (MKP), PŘIBLIŽNÝ (APROXIMUJEME) PRŮBĚH FUNKCE, VYJÁDŘENÍ DERIVACE JE PŘESNÉ

VÝHODY MKP - DOBŘE POPISUJE SLOŽITÉ OBLASTI (SLOŽITÉ GEOMETRIE)

NEVÝHODY MKP - TĚŽKO SE ZÍSKÁVAJÍ ANALITICKÁ ŘEŠENÍ PRO SROVNÁNÍ (HŮŘE SE DĚLÁ β-TESTING)



NEBUDEME APROXIMOVAT NAŠI FUNKCI DISKRETIZOVANÝMI HODNOTAMI, ALE V KAŽDÉM BODĚ OSY x SI VYPOMŮŽEME FCE, KTERÁ BUDE MÍT V x[i] HODNOTU JEDNA, DO SOUSEDNÍCH BODŮ KLESNE LINEÁRNĚ DO NULY A TU BUDE MÍT AŽ DO KONCE. m⁺[i] & m⁻[i] JSOU ~~PODPORY~~ TVAROVÉ FUNKCE FUNKCE N[i], TATO FUNKCE JE PO ČÁSTECH LINEÁRNÍ. PRO TVAROVÉ FUNKCE SE NEDOPORUČUJÍ POUŽÍVAT KUBICKÉ FUNCE, PROTOŽE MAJÍ TVAR ∽ ZPŮSOBÍ OSCILACE V ŘEŠENÍCH.

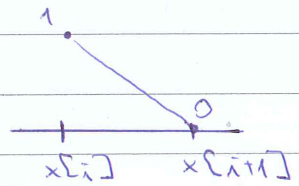
10.

FUNKCE $y(x)=\sum y[i]N[i]$ MOHU NAHRADIT

FEM SVOJE ROVNICE SESTAVUJE TAK ABY LINEARIZOVANÁ FUNKCE NĚJAK OPTIMÁLNĚ VYHOVOVALA ŘEŠENÍ ÚLOHY. LINEÁRNÍ FUNKCE $N^+[i]$ A $N^-[i]$ SPOJUJÍ UZEL $\underline{i}$ S NEJBLIŽŠÍM SOUSEDEM VLEVO/A VPRAVO.

$$N^-[i]: \quad y=\frac{x}{x[i]-x[i-1]}-\frac{x[i-1]}{x[i]-x[i-1]} \qquad x\in\langle x[i-1];x[i])$$

$$N^+[i]: \quad y=\frac{x}{x[i]-x[i+1]}-\frac{x[i+1]}{x[i]-x[i+1]} \qquad x\in\langle x[i];x[i+1])$$



PRO OBECNÝ PŘÍPAD TO NENÍ TAKTO VIDĚT A ŘEŠÍ SE TO PŘES OBECNOU ROVNICI PŘÍMKY:

$y=ax+b$

$1=ax[i]+b$

$0=ax[i+1]+b$

VYUŽIJEME TU CRAMEROVO PRAVIDLO A SOUSTAVU ROVNIC.

$$\underbrace{\begin{pmatrix} x[i] & 1 \\ x[i+1] & 1 \end{pmatrix}}_{A}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$\det A = x[i]-x[i+1]$

ŘEŠENÍ SE PODĚLÍ TÍM DETERMINANTEM

$$a=\frac{1}{x[i]-x[i+1]}$$

$$b=\frac{-x[i+1]}{x[i]-x[i+1]}=\frac{\det A'_2}{\det A}$$

$$\det A'_1=\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}=\underline{1} \qquad \det A'_2=\begin{vmatrix} x[i] & 1 \\ x[i+1] & 0 \end{vmatrix}=-x[i+1]$$

$$y=\frac{x}{x[i]-x[i+1]}-\frac{x[i+1]}{x[i]-x[i+1]}$$

$$N^+[i]: \quad y=\frac{x}{x[i]-x[i+1]}-\frac{x[i+1]}{x[i]-x[i+1]}$$

$1=a\cdot x[i]+b$

$$N^-[i]: \quad y=\frac{x}{x[i]-x[i-1]}-\frac{x[i-1]}{x[i]-x[i-1]}$$

$0=a\cdot x[i-1]+b \qquad \det A=x[i]-x[i-1]$

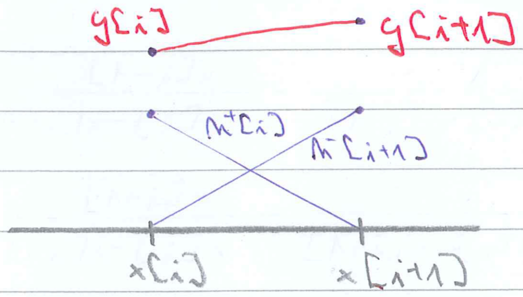
ATD JAKO V PŘEDCHOZÍM PŘÍPADU

$$m^{\pm}[i]:\ y = \frac{x}{x[i]-x[i\pm1]} - \frac{x[i\pm1]}{x[i]-x[i\pm1]}$$

$$N[i] = m^{+}[i] \cup m^{-}[i]$$

SJEDNOCENA

PODÍVÁME SE JAK VYPADÁ FUNKCE y NA NĚJAKÉM ELEMENTU.



MĚNÍ SE TO LINEÁRNĚ

$$y(x) = \sum_i y[i]\cdot N[i]$$

$x \in \langle x[i], x[i+1] \rangle :\ y(x) = y[i]\cdot m^{+}[i] + y[i]\, m^{-}[i+1]$

NIC JINÉHO NA TOMTO INTERVALU TAM NENÍ, ZBYTEK JE NULA.

POTŘEBUJI NYNÍ ZJISTIT $m^{-}[i+1]$ POUŽIJI PŘEDPIS ZADANÝ VÝŠE:

$$m^{-}[i+1] = \frac{x}{x[i+1]-x[i+1-1]} - \frac{x[i+1-1]}{x[i+1]-x[i+1-1]} = \underline{\underline{\frac{x}{x[i+1]-x[i]} - \frac{x[i]}{x[i+1]-x[i]}}}$$

A DOSADÍM DO VÝRAZU PRO $y(x)$:

$$y(x) = y[i]\cdot\left[\frac{x}{x[i]-x[i+1]} - \frac{x[i+1]}{x[i]-x[i+1]}\right] + y[i+1]\left[\frac{x}{x[i+1]-x[i]} - \frac{x[i]}{x[i+1]-x[i]}\right] = \frac{y[i]\cdot x - y[i]\cdot x[i+1] - y[i+1]\cdot x + y[i+1]\cdot x[i]}{x[i]-x[i+1]}$$

$$\boxed{y(x) = \frac{y[i]-y[i+1]}{x[i]-x[i+1]}\, x + \frac{y[i+1]x[i] - y[i]\cdot x[i+1]}{x[i]-x[i+1]}}$$

(11).

KDYŽ $x = x[i]$:

$$\frac{y[i]\cancel{x[i]} - y[i]\cdot\cancel{x[i+1]}}{\cancel{x[i] - x[i+1]}} = y[i]$$

NEBO KDYŽ $x = x[i+1]$

$$\frac{-y[i+1]\cdot x[i+1] + y[i+1]\cdot x[i]}{x[i] - x[i+1]} = y[i+1]$$

TOTO BYLO OVĚŘENÍ ŽE JSME POČÍTAL SPRÁVNĚ. FEM PŘÍMO VYUŽÍVÁ INFORMACI O LINEARITĚ FUNKCE, PRO KVADRATICKOU A KUBICKOU BY VYŠLY JINÉ ROVNICE A JINÁ ŘEŠENÍ NEŽ PRO TUTO LINEÁRNÍ.

FEM VYCHÁZÍ Z TOHO, ŽE MÁME NĚJAKOU DIFERENCIÁLNÍ ROVNICI $L(u) = 0$ NA OBLASTI Ω, POTŘEBUJEME

L – LINEÁRNÍ DIFERENCIÁLNÍ OPERÁTOR

JEŠTĚ OKRAJOVÉ PODMÍNKY $\underline{u}$ – NA HRANICI Ω JE ZADANÉ (DIRICHLETOVOU NEBO NEUMANNOVA NEBO JEJICH KOMBINACÍ). TOTO TEDY BY CAUCHYOVA ÚLOHA. $\underline{u}$ - SPOJITÁ VČETNĚ POTŘEBNÉHO POČTU DERIVACÍ, COŽ JE PROBLÉM, TATO ROVNICE NEJDE ŘEŠIT. UDĚLÁ SE OBCHVAT:

SICE NEUMÍME VYŘEŠIT

$$L(u) = 0 \xrightarrow[\text{PLATÍ!}]{\text{ALE!}} \int_{\Omega} L(u)\, d\Omega = 0$$

SILNÁ FORMULACE

SLABÁ FORMULACE

STAČÍ ABY $\int_{\Omega}$ BYL RIEMANŮV, KDYŽ V JEDNOTLIVÝCH (IZOLOVANÝCH) BODECH OSY $\underline{x}$ BUDOU NESPOJITOSTI, RIEMAN TO PŘEŽIJE. $L(u)=0$ BY TO NEZVLÁDL.

$u = \sum u[i] N[i]$

UŽ SE NEROVNÁ NULE PROTOŽE u JE APROXIMOVANÉ

$$\int_\Omega L(\sum u[i]N[i])\,d\Omega = \text{REZIDUUM}$$

KONSTANTY Z HLEDISKA L

N[i](x) JE FCÍ x

UŽ SE NEROVNÁ NULE, CHCEME, ALE ABY REZIDUUM BYLO CO NEJMENŠÍ.

REZIDUUM ⟶ MINIMUM

FEM PŘESKOČÍ UZLOVÉ HODNOTY (PROTOŽE JSOU ČÍSLA) A MUSÍME VĚDĚT CO SE DĚJE MEZI NIMI. N[i] ZÁVISÍ NA x A NA HODNOTÁCH UZLŮ.

L JE PRO NÁS LINEÁRNÍ FUNKCE

$$\int_\Omega \sum_i u[i]\,L(N[i])\,d\Omega = \sum_i u[i]\int_\Omega L(N[i])\,d\Omega = \text{REZIDUA}$$

ZPŮSOBY MINIMALIZACE REZIDUÍ

- NEJMENŠÍ ČTVERCE

$$\sum_i u_i \int_\Omega L(N[i])\,d\Omega = 0$$

POMOCNÁ VELIČINA

$$I = \int_\Omega \left[\sum_i u_i \cdot L(N[i])\right]^2 d\Omega \qquad \frac{\partial I}{\partial u_i} = 0$$

- VÁŽENÁ REZIDUA – ZNOVU VYTVOŘÍME POMOCNOU FUNKCI A TO TAKOVÁ, ŽE KDYŽ MÁME m NEZNÁMÝCH TAK SI MUSÍME VYTVOŘIT m VÁHOVACÍCH FUNKCÍ A TY DOPÍŠEME DO INTEGRÁLU

VÁHOVACÍ FCE

$$j: \int_\Omega w_j \sum_i u[i]\,L(N[i])\,d\Omega = 0$$

S VHODNÝMI VÁHOVACÍMI FUNKCEMI MŮŽEME VŠECH N INTEGRÁLŮ ANULOVAT A DÁ SE UKÁZAT, ŽE TO OPRAVDU BUDE OPTIMUM TÉTO FUNKCE.

(12)

DVĚ VOLBY PRO METODU VÁŽENÝCH REZIDUÍ

- METODA KOLOKAČNÍ:

ŘEKNĚME ŽE $\omega_j = \delta(|x[i] - x[j]|)$

DELTA FUNKCE

- METODA <u>GALERKIN</u>:

$\omega_j = N[j]$ BUDEME POUŽÍVAT, NEJSOU TAM ŽÁDNÉ KVADRÁTY

JÉTÁ FUNKCE

$$j: \quad \sum u_i \int N[j]\, L(N[i])\, d\Omega = 0$$

<u>PŘÍKLAD</u>: POISSONOVA ROVNICE $\Delta u = q$; $L \equiv (\Delta - q)$;

$$L(u) = \Delta u - q = 0$$

$$j: \quad \underbrace{\sum_i u[i]}_{\text{NEZNÁMÉ HLEDANÉ UZLOVÉ HODNOTY}} \int_\Omega N[j]\, \overbrace{(\Delta N[i] + q)}^{L(N[i])}\, d\Omega = 0$$

ROZPADNE SE MI TO NA DVA ČLENY

$$\sum_i u[i] \int_\Omega N[j]\, \Delta N[i]\, d\Omega + \sum_i u[i] \int_\Omega N[j] \cdot q\, d\Omega = 0$$

<u>TRIK</u>:

$$N[j]\, \Delta N[i] = N[j]\, \nabla(\nabla N[i]) = \nabla \cdot \underbrace{(N[j] \cdot \nabla N[i])}_{\text{STOKES (ZMIZÍ)}} - \underbrace{\nabla N[j] \cdot \nabla N[i]}_{\text{TADY UŽ JE PRVNÍ DERIVACE A BUDE MI STAČIT LINEAR APROXIMACE.}}$$

$$j: \quad \overbrace{\sum u[i] \int_{\partial\Omega} N[j]\, \nabla N[i]\, dS}^{\text{SEM VLOŽÍM OKRAJOVÉ PODMÍNKY}} - \sum u[i] \int_\Omega \nabla N[j]\, \nabla N[i]\, d\Omega +$$

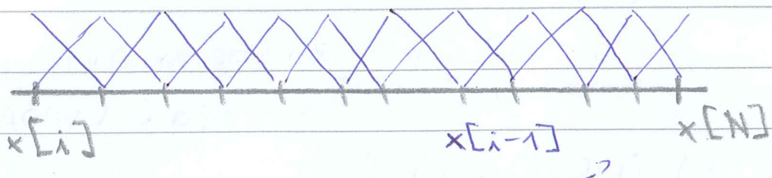
INTEGRÁL PO HRANICI $\partial\Omega$ ELEMENT HRANICE

$$+ \sum_i u[i] \int_\Omega N[j]\, q\, d\Omega = 0$$

ZŮSTALA Z TOHO LINEÁRNÍ SOUSTAVA PRO $u[i]$, VŠECHNY INTEGRÁLY KTERÉ BUDOU SESTAVOVAT MATICI A JEJÍ PRAVOU STRANU ZÁVISÍ JEN NA <u>N</u>

A $\underline{N}$ ZÁVISÍ JEN NA GEOMETRII SÍTĚ.

DIRICHLETOVA OKRAJOVÁ PODMÍNKA
- MUSÍM PŘEMÝŠLET VE VNITŘNÍCH UZLECH
SESTAVUJI ROVNICE, NEBUDU JI SE STAVOVAT V DIRICH. PODMÍNKU, TAM KDE MÁM FUNKČNÍ HODNOTU ZADANOU.



$j \neq N$ V POSLEDNÍM KVŮLI TOMU

j - VNITŘNÍ UZLY, PŘES i SE SUMUJE
(NENÍ HRANIČNÍ, NEBO MÍSTO KDE JE DEF. NEUMANNOVA PODMÍNKA)
JEDINÉ CO SE MŮŽE DO INTEGRÁLU PROMÍTNOUT JE $j=N-1$

$j=N-1$

1) $u[N]\int N[N-1]\nabla N[N]\,dS$ NA HRANICI — NEDÁ ŽÁDNÝ PŘÍSPĚVEK (N-1) PRVEK NA HRANICI DÁ NULU

2) $\int N[N-1]\nabla N[N-1]\,dS \Rightarrow \emptyset$

2) NEDÁ ŽÁDNÝ PŘÍSPĚVEK, PROTOŽE [N-1] PRVEK NA HRANICI DÁ NULU

1) u[N] ZNÁME A PŘEVEDEME NA PRAVOU STRANU, DO MATICE NA LEVÉ STRANĚ TO NEZASÁHNE A JE ROVNA NULE.

JAKMILE MÁME NA VŠECH HRANICÍCH DIRICHLETOVU PODMÍNKU JE MOŽNÉ TEN INTEGRÁL PO HRANICI ŠKRTNOUT, NEDÁ NÁM ŽÁDNÝ PŘÍSPĚVEK.

(13)

(TRIVIÁLNÍ) NEUMANNOVA OKRAJOVÁ PODMÍNKA

- TRIVIÁLNÍ PROTOŽE NĚKDE NA HRANICI JE NORMÁLOVÁ ~~SLOŽKA~~ DERIVACE NULOVÁ! $u_n|_{\partial\Omega} = 0$
- MOHOU NASTAT TYTO SITUACE

$$j = N$$

- KDYŽ $j=N$ PAK MOHOU NASTAT DVĚ SITUACE A TO

1.) $i = N$ $\int N[N] \nabla N[N] \, d\Omega$

!!
0

2.) $i = N-1$ $\int N[N] \nabla N[N-1] \, d\Omega = 0$

ANI DIRICHLETOVA ANI TRIVIÁLNÍ NEUMANNOVA PODMÍNKA SE NEMUSÍ PŘI SESTAVOVÁNÍ SOUSTAVY FEM ZOHLEDŇOVAT.

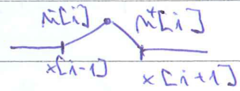
$k_{ij} = \int_{\Omega} \nabla N[j] \nabla N[i] \, d\Omega$ (DRUHÝ INTEGRÁL ZE STRANY 12)

- VĚTŠINA TĚCHTO INTEGRÁLŮ JSOU SKORO MATICOVÉ PRVKY LEVÉ STRANY

TADY SE MŮŽE STÁT, ŽE $i=j$

$k_{ii} = \int_{\Omega} \nabla N[i] \nabla N[i] \, d\Omega$ = ROZPADNE SE NA 2 MENŠÍ =

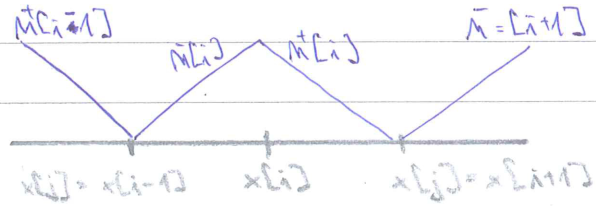
ZBYTEČNĚ INTEGRUJI PŘES CELOU OBLAST! KDYŽ MÁM JEN MALÝ KOUSEK



$$= \int_{x[i-1]}^{x[i]} (\nabla N^-[i])^2 dx + \int_{x[i]}^{x[i+1]} (\nabla N^+[i])^2 dx$$

$$\nabla N^+[i] = \frac{1}{x[i] - x[i+1]} \; ; \; \nabla N^-[i] = \frac{1}{x[i] - x[i-1]}$$

ROVNĚŽ MŮŽE NASTAT ŽE $i=j\pm1$



$$k_{j+1j} = \int_{x[j]}^{x[j+1]} \nabla N^+[j] \nabla N^-[j+1] \, d\Omega$$

DIAGONÁLNÍ ČLEN

VEDLEJNĚJ LEŽÍCÍ (VPRAVO)

SPOJÍM

$$k_{j-1j} = \int_{x[j-1]}^{x[j]} \nabla N^-[j] \cdot \nabla N^+[j-1] \, d\Omega$$

VEDLEJNĚJ LEŽÍCÍ (VLEVO)

DIAGONÁLNÍ ČLEN

OPĚT DOSTÁVÁME TRIDIAGONÁLNÍ MATICI

$$k_{j\pm1j} = \pm \int_{x[j]}^{x[j\pm1]} \nabla N^\pm[j] \cdot \nabla N^\mp[j\pm1] \, d\Omega$$

PROTOŽE JSEM PRO JEDEN INTEGRÁL OTOČIL MEZE

VÝPOČTY ZE CVIČENÍ

Př. $L(u) = \Delta u = 0$

$$\int_\Omega L(u) \, d\Omega = 0 = \int_\Omega L\left(\sum_i u[i] N[i]\right) d\Omega = 0$$

$$\sum_i u[i] \int_\Omega L(N[i]) \, d\Omega \qquad j: \sum_i u[i] \int_\Omega N[j] L(N[i]) \, d\Omega =$$

$$= \sum_i u[i] \int_\Omega N[j] \Delta N[i] \, d\Omega = 0$$

$$(uv)' = u'v + uv'$$

$$j: \; N[j] \Delta N[i] = \underset{u}{N[j]} \nabla \underbrace{(\nabla N[i])}_{v'} = \nabla(N[j] \nabla N[i]) - \nabla N[j] \nabla N[i]$$

$$j: \sum_i u[i] \int_{\partial\Omega} N[j] \nabla N[i] \, dS + \sum_i u[i] \int_\Omega \nabla N[j] \nabla N[i] \, d\Omega = 0$$

$$N^\pm[i] = \frac{x - x[i\pm1]}{x[i] - x[i\pm1]} \qquad \nabla N^\pm[i] = \frac{1}{x[i] - x[i\pm1]}$$

$$k_{ii} = \int_\Omega (\nabla N[i])^2 \, d\Omega = \int_{x[i]}^{x[i+1]} (\nabla N^+[i])^2 + \int_{x[i-1]}^{x[i]} (\nabla N^-[i])^2 \, dx$$

$$k_{ii} = \frac{x[i+1] - x[i]}{(x[i] - x[i+1])^2} + \frac{x[i] - x[i-1]}{(x[i] - x[i-1])^2} \qquad k_{ii} = \frac{2}{\varepsilon}$$

14.

$$x[i+1] - x[i] = \varepsilon[i] \qquad \text{MKD: } \varepsilon[i] = \varepsilon$$

$$j = j \pm 1$$

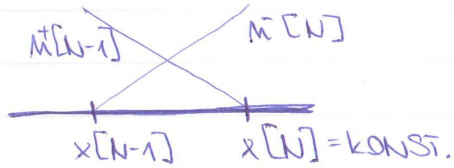
$$k_{j+1,j} = \int_{x[j]}^{x[j+1]} dx \, \nabla n^{+}[j] \, \nabla n^{-}[j+1]$$

$$k_{j-1,j} = \int_{x[j-1]}^{x[j]} dx \, \nabla n^{-}[j] \, \nabla n^{+}[j-1]$$

$$k_{j+1,j} = \frac{x[j+1] - x[j]}{(x[j] - x[j+1])(x[j+1] - x[j])} = \frac{1}{x[j] - x[j+1]} = \underline{\frac{-1}{\varepsilon}}$$

$$k_{j-1,j} = \frac{x[j] - x[j-1]}{(x[j] - x[j-1]) \cdot (x[j-1] - x[j])} = \frac{1}{x[j-1] - x[j]} = \underline{\frac{-1}{\varepsilon}}$$

$$k_{j \pm 1, j} = -\frac{1}{\varepsilon}$$



$$j = N-1 \qquad i = N-2 \;\wedge\; i = N-1 \;\wedge\; i = N$$

$$k_{N,N-1} = \int_{\Omega} \nabla N[N-1] \cdot \nabla N[N] \, d\Omega =$$

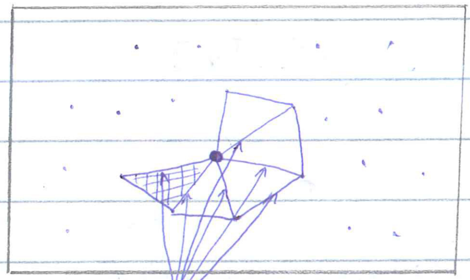
$$= \int_{x[N-1]}^{x[N]} \nabla n^{+}[N-1] \cdot \nabla n^{-}[N] \, dx = \int_{x[N-1]}^{x[N]} \frac{1}{x[N-1] - x[N]} \cdot \frac{1}{x[N] - x[N-1]} \, dx =$$

$$= \frac{x[N] - x[N-1]}{(x[N-1] - x[N])(x[N] - x[N-1])} = \underline{\underline{-\frac{1}{\cancel{2}\varepsilon}}}$$

a

FEM VE 2D

DISKRETIZACE V $\mathbb{R}^2$



• UZEL j, TOTO VŠECHNO JSOU TVAROVÉ FUNKCE $N[j]$ MUSÍ MÍT NENULOVOU PODPORU:

$N[j] = \bigcup m^{ijk}[j]$; T-MÁ INDEXY ijk - JE UZEL (ELEMENT) ..T

SJEDNOCENÍ

TVAROVÉ FUNKCE

FEM 1D: ÚSEČKY $N[i]: y = ax + b$ PLYNE 2 BODY

FEM 2D: TROJÚHELNÍK $N[i]: y = ax + by + c$ 3 BODY

FEM 3D: JEHLAN $N[i]: y = ax + by + cz + d$ 4 BODY

$\underbrace{\text{ÚSEČKY; } \Delta \text{; } \Delta}_{\text{SIMPLEXY}}$

ELEMENTY Δ & Δ MUSÍ BÝT NEDEGENEROVANÉ MUSÍ MÍT TEDY NENULOVÝ OBJEM $V \neq 0$.

CHOVÁNÍ m BUDE FORMÁLNĚ STEJNÉ NA TECHO TROJÚHELNÍČCÍCH NÁM STAČÍ TO SPOČÍTAT NA JEDNOM Δ A PAK NA VŠECH OSTATNÍCH SE TEN VÝPOČET ZOPAKUJE IDENTICKY.

1) $m^T[j]$; $T = \{i, j, k\}$, CHCEME SPOČÍTAT TVAROVÉ FUNKCE, POTŘEBUJEME TEDY TY APROXIMAČNÍ FUNKCE NA INDIVIDUÁLNÍCH ELEMENTECH. OPĚT VYUŽIJEME CRAMEROVO PRAVIDLO.

$y = ax + by + c$

PROTOŽE $1 = a\,x[j] + b\,y[j] + c$

$0 = a\,x[i] + b\,y[i] + c$

$0 = a\,x[k] + b\,y[k] + c$

$$\Rightarrow \underbrace{\begin{array}{ccc} a & b & c \\ \hline \end{array}\begin{pmatrix} x[j] & y[j] & 1 \\ x[i] & y[i] & 1 \\ x[k] & y[k] & 1 \end{pmatrix}}_{A} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$\det A = x[j]y[i] + x[i]y[k] + x[k]y[j] - y[i]x[k] - x[i]y[j] - x[j]y[k]$

$$\det{}_a = \det \begin{pmatrix} 1 & y[j] & 1 \\ 0 & y[i] & 1 \\ 0 & y[k] & 1 \end{pmatrix} = \underline{y[i] - y[k]}$$

$$\det_b = \det\begin{pmatrix} x[j] & 1 & 1 \\ x[i] & 0 & 1 \\ x[k] & 0 & 1 \end{pmatrix} = \underline{x[k] - x[i]}$$

$$\det_c = \det\begin{pmatrix} x[j] & y[j] & 1 \\ x[i] & y[i] & 0 \\ x[k] & y[k] & 0 \end{pmatrix} = x[i]y[k] - y[i]x[k]$$

$$m^I[j] = \frac{\overbrace{(y[i]-y[k])}^{a}\cdot x + \overbrace{(x[k]-x[i])}^{b}y + \overbrace{x[i]y[k]-y[i]x[k]}^{c}}{\det A}$$

<u>PŘÍKLAD:</u> $Lu = 0$ OKRAJOVÁ PODMÍNKA

$\Delta u = 0$

OPĚT SLABÁ FORMULACE JAKO <u>1 D</u>:

$\int \Delta u \, d\Omega = 0 \longrightarrow \int \Delta \sum_j u[j] N[j] \, d\Omega \neq 0 \approx$ MINIMUM

JAK TOHLE ZAŘÍDÍM? ZAŘÍDÍM POMOCÍ

ZAŘÍDÍM ABY VYŠLO NULA:

$j: \sum_j u_j \int N[i] \Delta N[j] \, d\Omega = 0$

j je PODMÍNEK PRO VNITŘNÍ UZLY

A OPĚT POUŽIJEME STOKESOVU VĚTU, KTERÁ PLATÍ BEZ OHLEDU NA DIMENZI:

$N_i \Delta N_j = N_i \nabla(\nabla N_j) = \underbrace{\nabla(N_i \nabla N_j)}_{\text{TOHLE VYPADNE}} - \nabla N_i \nabla N_j$

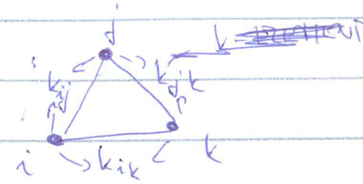
$$\sum_j u[j] \int_{\partial\Omega} N[i] \nabla N[j] \, dS - \sum_i u[i] \int \nabla N[i] \nabla N[j] \, d\Omega = 0$$

HLAVNÍ VÝHODA - NEMUSÍM INTEGROVAT PŘES CELÝ OBJEM, DÍKY TOMU, ŽE JE PODPORA TAKTO LIMITOVANÁ TAK INTEGRUJEME PŘES <u>1</u> ELEMENT

POČÍTÁME INTEGRÁLY PŘES ELEMENT <u>I</u>

$\int_I \nabla m^I[i] \cdot \nabla m^I[j] \, d\Omega$ OBA UZLY i & j MUSÍ PATŘIT STEJNÉMU ELEMENTU <u>I</u>. JINAK NÁM TO DÁ NULU. POTOM TA VÝPOČETNÍ SMYČKA JE TAKOVÁ, ŽE PROCHÁZÍM JEDNOTLIVÉ ELEMENTY

A VYTVÁŘÍM TAM DVOJICE UZLŮ A VÍM: KE k_{ij} SE PŘISPÍVÁ 2x, POPRVÉ KDYŽ PROCHÁZÍM ELEMENT i A PODRUHÉ KDYŽ PROCHÁZÍM —— " —— j, PAK UŽ NIKDY VÍC.



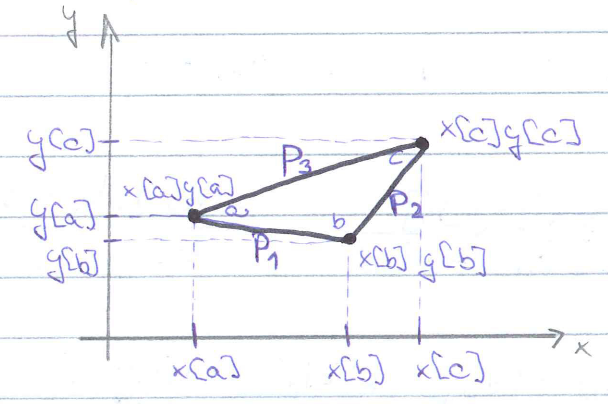
NAROZDÍL OD <u>1D</u> VE <u>2D</u> UŽ $m^T[j]$ BUDE VEKTOR

$$\nabla m^T[j] = \frac{1}{\Delta}\left(y[i]-y[k] \;;\; x[k]-x[i]\right)$$

$$\nabla m^T[i]\cdot\nabla m^T[j] = \frac{1}{\Delta^2}\underbrace{\left((y[i]-y[k])^2 + (x[k]-x[i])^2\right)}$$

V TOMTO JE SKRYTÁ GEOMETRIE SÍTĚ, JE TO KONSTANTA A ZA NÍ STOJÍ INTEGRÁL Z <u>JEDNIČKY</u>.

$I = \int_T 1\, d\Omega$ A TEN TEĎ <u>SPOČÍTÁME</u>



TOHLE CHCE ZINTEGROVAT JSEM VE 2D, ROZDĚLÍME TEDY NA 2 INTEGRÁLY. BUDEME NEJDŘÍVE INTEGROVAT MEZI DVĚMA PŘÍMKAMI, POTOM MEZI 2 HODNOTAMI OSY x

$$I = \int_{x[a]}^{x[b]}\int_{P_1}^{P_2} dy\,dx + \int_{x[b]}^{x[c]}\int_{P_3}^{P_2} dy\,d\cancel{x}$$ = PROTO ABYCH TO SPOČÍTAL, MUSÍM ZJISTIT ČEMU SE ROVNAJÍ ÚSEČKY $P_1; P_2; P_3$.

OPĚT POUŽIJEME CRAMEROVO PRAVIDLO

$$P_1: \quad \begin{aligned} y[a] &= \bar a\, x[a] + \bar b \\ y[b] &= \bar a\, x[b] + \bar b \end{aligned}$$

$$\begin{array}{cc} \text{"a"} & \text{"b"} \\ \multicolumn{2}{c}{\underbrace{\begin{pmatrix} x[a] & 1 \\ x[b] & 1 \end{pmatrix}}_{A}} \end{array} \begin{pmatrix} \bar a \\ \bar b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y[a] \\ y[b] \end{pmatrix}$$

$$\det A = \begin{vmatrix} x[a] & 1 \\ x[b] & 1 \end{vmatrix} = \underline{x[a]-x[b]} \qquad \det_a = \begin{vmatrix} y[a] & 1 \\ y[b] & 1 \end{vmatrix} = \underline{y[a]-y[b]}$$

$$\det_b = \begin{pmatrix} x[a] & y[a] \\ x[b] & y[b] \end{pmatrix} = x[a]y[b] - x[b]y[a]$$

$$\bar{a} = \frac{\det_a}{\det A} = \frac{y[a]-y[b]}{x[a]-x[b]} \qquad \bar{b} = \frac{x[a]y[b]-x[b]y[a]}{x[a]-x[b]}$$

$$y = \frac{y[a]-y[b]}{x[a]-x[b]} \cdot x + \frac{x[a]y[b]-x[b]y[a]}{x[a]-x[b]}$$

FUNGUJE TO CYKLICKÁ ZÁMĚNA, BUDU ZAMĚŇOVAT VRCHOLY,

$$P_2: \quad y = \frac{y[a]-y[c]}{x[a]-x[c]} \cdot x + \frac{x[a]y[c]-x[c]y[a]}{x[a]-x[c]}$$

$$P_3: \quad y = \frac{y[b]-y[c]}{x[b]-x[c]} \cdot x + \frac{x[b]y[c]-x[c]y[b]}{x[b]-x[c]}$$

DOSADÍME DO INTEGRACE (NEMÁM PROMĚNÉ) => TAKŽE TO

BUDE JEN ROZDÍL TĚCH ÚSEČEK: dx

$$I = \int_{x[a]}^{x[b]} \left(\frac{y[a]-y[c]}{x[a]-x[c]} \cdot x + \frac{x[a]y[c]-x[c]y[a]}{x[a]-x[c]} - \frac{y[a]-y[b]}{x[a]-x[b]} x - \frac{x[a]y[b]-x[b]y[a]}{x[a]-x[b]} \right)$$

$$+ \int_{x[b]}^{x[c]} \left(\frac{y[a]-y[c]}{x[a]-x[c]} \cdot x + \frac{x[a]y[c]-x[c]y[a]}{x[a]-x[c]} - \frac{y[b]-y[c]}{x[b]-x[c]} x - \frac{x[b]y[c]-x[c]y[b]}{x[b]-x[c]} \right) dx =$$

$$= \frac{1}{2} \frac{y[a]-y[c]}{x[a]-x[c]} \left(x^2[b]-x^2[a]\right) + \frac{x[a]y[c]-x[c]y[a]}{x[a]-x[c]} \left(x[b]-x[a]\right) -$$

$$- \frac{1}{2} \frac{y[a]-y[b]}{\cancel{(x[a]-x[b])}} \cdot \overset{(x[b]+x[a])}{\cancel{(x^2[b]-x^2[a])}} + \frac{x[a]y[b]-x[b]y[a]}{\cancel{(x[a]-x[b])}} \cdot \overset{-1}{\cancel{(x[b]-x[a])}} +$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{y[a]-y[c]}{x[a]-x[c]} \left(x^2[c]-x^2[b]\right) + \frac{x[a]y[c]-x[c]y[a]}{x[a]-x[c]} \cdot \left(x[c]-x[b]\right) -$$

c

$$-\frac{1}{2}\frac{y[b]-y[c]}{\cancel{(x[b]-x[c])}}\cdot\underbrace{\cancel{(x^2[c]-x^2[b])}}^{(x[c]+x[b])}-\frac{x[b]y[c]-x[c]y[b]}{\cancel{(x[b]-x[c])}}\cdot(\cancel{x[c]-x[b]})=$$

$$=\frac{1}{2}(y[a]-y[b])\cdot(x[b]+x[a])+x[a]y[b]-x[b]y[a]+\frac{1}{2}(y[b]-y[c])(x[c]+x[b])+$$

$$+x[b]y[c]-x[c]y[b]+\frac{1}{2}\frac{y[a]-y[c]}{\cancel{(x[a]-x[c])}}\underbrace{\cancel{(x^2[c]-x^2[a])}}_{(x^2[b]-x^2[a]+x^2[c]-x^2[b])}^{(x[c]+x[a])}\mp\frac{x[a]y[c]-x[c]y[a]}{\cancel{(x[a]-x[c])}\cdot\cancel{(x[c]-x[a])}^{-1}}=$$

PROBLÉM MŮŽE U TOHOTO VÝPOČTU NASTAT VE CHVÍLI KDYŽ TŘEBA $x[a]=x[c]$, TO POTOM HAVARUJE $\Rightarrow$ SINGULARITA, JE NUTNÉ OŠETŘIT. NYNÍ ČLENY S "1/2" DÁME DOHROMADY:

$$=1/2\cdot(y[a]x[b]-\cancel{y[b]x[b]}+\cancel{y[a]x[a]}-y[b]x[a]+y[b]x[c]-$$
$$-\cancel{y[c]x[c]}+\cancel{y[b]x[b]}-y[c]x[b]-y[a]x[c]+\cancel{y[c]x[c]}-$$
$$-\cancel{y[a]x[a]}+y[c]\cdot x[a])+\text{ČLENY BEZ }\underline{1/2}=$$

$$=1/2\cdot(y[a]x[b]-y[b]x[a]+y[b]x[c]-y[c]x[b]-y[a]x[c]+y[c]\cdot x[a])+$$
$$+x[a]y[b]-x[b]y[a]+x[b]y[c]-x[c]y[b]-x[a]y[c]+x[c]y[a]=$$

$$=-1/2\cdot x[b]y[a]+1/2\cdot x[a]y[b]-1/2\cdot x[c]y[b]+1/2\cdot x[b]y[c]+1/2\cdot x[c]y[a]-1/2\,x[a]y[c]=$$

= VYŠLA NÁM JEDNOCYKLICKÁ ZÁMĚNA (PERMUTACE), JMENOVATEL JSME ODSTRANILI (NEVZNIKNOU SINGULARITY). TÍM MÁME VYŘEŠENÝ PŘÍSPĚVEK INTEGRÁLU Z GRADIENTU, ČILI JÁDRO LAPLACEOVA OPERÁTORU. GALERKINA

$\Delta u + V u = 0$ / MŮŽE g PAK ZA $N[j]$

$$\int \nabla N[i]\cdot\nabla N[j]\,d\Omega \;\to\; \int 1\,d\Omega$$

$\hookrightarrow \sum N[i]\,N[j]\,u[i]$

ZA GALERKINA

$$\int N[i]\,N[j]\,d\Omega=\int a^2x^2+b^2y^2+x^2+y+c^2$$

MOMENTOVÉ INTEGRÁLY - NA NĚJAKÉM ELEMENTU

$$I^T[i](a;b)=\iint_T x^a\cdot y^b\,dS$$

MOMENT ELEMENTU

KDYŽ BYCHOM ZNALI VYJÁDŘENÍ MOMENTOVÝCH INTEGRÁLŮ, TAK ROZSEKÁME OPERÁTOR NA JEDNOTLIVÉ KOUSKY, VŽDY ZŮSTANOU NĚJAKÉ KONSTANTY $a; b; c$ TY SE VYTÁHNOU PŘED INTEGRÁL, PAK UŽ JEN ŘEŠÍME KOMBINACE, NA CO SE MI TO ROZPADNE (JESTLI x^2; x...)

$I(0;0) = S_T = \int 1\, dS$ (INTEGRÁL JEDNIČKY PŘES PLOCHU)

$I(1;0) = 1/3\,(x[i] + x[j] + x[k]) \cdot S_T$ $\quad S_T$ ... PLOCHA TROJÚHELNÍKU

$I(0;1) = 1/3\,(y[i] + y[j] + y[k]) \cdot S_T$

$I(2;0) = 1/6\,(x^2[i] + x^2[j] + x^2[k] + x[i] \cdot x[j] + x[k] \cdot x[j] + x[k] \cdot x[i])\, S_T$

$I(0;2) = 1/6\,(y^2[i] + y^2[j] + y^2[k] + y[i]\, y[j] + y[k] \cdot y[j] + y[k] \cdot y[i]) \cdot S_T$

$$I(1;1) = 1/12\,[2 \cdot (x[i]y[i] + x[j]y[j] + x[k]y[k]) + x[i] \cdot (y[j] + y[k]) + x[j]\,(y[k] + y[i]) + x[k] \cdot (y[i] + y[j])] \cdot S_T$$

$$\int N[i]\, d\Omega = \frac{delt_a}{delA} \underbrace{\int x\, dS}_{} + \frac{delt_b}{delA} \underbrace{\int y\, dS}_{} + \frac{delt_c}{delA} \underbrace{\int dS}_{}$$

MOMENTOVÉ INTEGRÁLY, NA KONCI MAJÍ S_T

$S_T = 1/2 \cdot |delA|$ NEJDE TEDY VŠE POKRÁTIT, NEVÍM JAK JE TO TAM SE ZNAMÉNKY

MÁME STANDARDNÍ PROBLÉM, S LINEÁRNÍM DIFERENCIÁLNÍM OPERÁTOREM, BUDE SE MUSET NĚJAKÝM ZPŮSOBEM ZADÁVAT u NA HRANICI $\partial\Omega$ ZKOUMANÉ OBLASTI.

$L(u) = 0 \,\big|_{u\,\partial\Omega}$

$\Downarrow$ PLATÍ IMPLIKACE TÍMTO SMĚREM

$\int_\Omega L(u)\, d\Omega = 0$

1D VÁŽENÁ REZIDUA, ČILI TOTO POVAŽUJI VHODNÝM POČTEM VHODNÝCH FUNKCÍ. ABY PLATILA IMPLIKACE I OPAČNĚ MUSÍ PLATIT

$\int_\Omega v\, L(u)\, d\Omega = 0$ PRO VŠECHNY FUNKCE $\underline{v}$

d

FUNKCE v MUSÍ BÝT ROZUMNĚ INTEGROVATELNÉ.
NEPRAKTICKÉ, PODMÍNEK JE NEKONEČNĚ MNOHO.
MOHU SE OMEZIT NA NĚJAKOU TŘÍDU FUNKCÍ,
VE KTERÉ ŘEKNEME ABY TA IMPLIKACE NAHORU:

SLABÁ FORMULACE $\xrightarrow{\text{IMPLIKUJE}}$ SILNOU FORMULACI
"NA MNOŽINĚ FEM PŘÍPUSTNÝCH ŘEŠENÍ"

MNOŽINA FEM FUNKCÍ JE $v = \sum_i v[i] N[i]$ SPECIÁLNĚ ZVOLENÉ
DOSADÍM A DOSTANU:

$$\sum_i v[i] \underbrace{\int_\Omega N[i]\, L(u)\, d\Omega = 0}_{\text{GALERKIN}} \quad \text{PRO VŠECHNA } v[i]$$

ŘÍKÁ TO, ŽE HLEDÁME TAKOVÉ SLABÉ ŘEŠENÍ,
KTERÉ CO NEJLÉPE VYSTIHNE TO SILNÉ NA MNOŽINĚ
FEM PŘÍPUSTNÝCH FUNKCÍ. TOHLE TO ALE JEŠTĚ
NENÍ ÚPLNĚ SLABÁ FORMULACE.

$$\int_\Omega v\, L(u)\, d\Omega \xrightarrow[\text{NA INTEGRÁL}]{\text{JDE PŘEVÉST}} \int u \cdot L^{+}(v)\, d\Omega$$

SDRUŽENÝ OPERÁTOR

POMOCNÁ FCE ROZUMNĚ SPOJITÁ (AŽ DO NĚJAKÉ DERIVACE)

TA "SLABOST" SPOČÍVÁ V TOM, ŽE u VYCESTOVALO VEN
Z L A v SE NAOPAK DOSTALO DOVNITŘ. POMOCÍ PER-PARTES,
u SE POTÁHNE VEN A v NAOPAK DOVNITŘ.

$$v \Delta u = \nabla(v \nabla u) - \nabla v \nabla u$$

$$\int_{\partial\Omega} v \nabla u - \int \nabla v \nabla u$$

PER-PARTES /PODMÍNKA\ u SPOJITÉ
JEN DO PRVNÍ DERIVACE

$$\nabla v \nabla u = \nabla(\nabla v \cdot u) - \Delta v \cdot u$$

ZLATÁ CESTA, NECHAT u i v SPOJITÉ DO PRVNÍ DERIVACE

OKRAJOVÉ PODMÍNKY

n - VNĚJŠÍ JEDNOTKOVÁ NORMÁLA

$$\int_{\partial\Omega} r \nabla w \, d\vec{S} = \int r \nabla w \cdot \vec{n} \, dS$$

VEKTOROVÝ ELEMENT CO TAM ZŮSTANE PO APLIKACI STOKESOVY VĚTY

NA HRANICI: $\partial\Omega$ $u_n = 0$ (PODMÍNKA)

$\nabla u \cdot \vec{n} = 0$

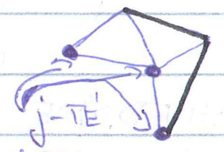
DIRICHLETOVA PODMÍNKA, SESTAVUJEME PRO VŠECHNA j:

(TY VE KTERÝCH NEZNÁME HODNOTY)

(VNITŘNÍ UZLY) j: $\sum_i u[i] \int_{\partial\Omega} \underbrace{\cancel{N[j]}}_{0} \cdot \nabla N[i] \cdot \vec{n} \cdot dS$

i - JSOU VŠECHNY UZLY

NA HRANICI NEJSOU VNITŘNÍ UZLY



j-TÉ UZLY

DIRICHLETOVA PODMÍNKA (HRANICE)

PRO DIRICHLETOVY OKRAJOVÉ PODMÍNKY NENÍ ŽÁDNÝ OKRAJOVÝ ČLEN.

VLNOVÁ ROVNICE

- NAŠÍM CÍLEM BUDE ZREDUKOVAT VLNOVOU ROVNICI NA SUMU MOMENTOVÝCH INTEGRÁLŮ DO MATICE SOUSTAVY A JEJÍ PRAVÉ STRANY.

$$\underbrace{\Delta U - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 U}{\partial t^2}}_{\square U} = 0 \quad \text{(HOMOGENNÍ PROTO NULA)}$$

$\square U$ (DE-LAMBERTIÁN)

VE FEM PROBLÉM, MÁM TAM DERIVACE PODLE PROSTORU A ČASU A TOHO SE CHCI ZBAVIT.

$U = w(x) \cdot e^{i\omega t}$ (ZBAVÍM SE TAK ČASU)

$$\Delta w \cancel{e^{i\omega t}} - \frac{\omega^2}{c^2} w \cdot \cancel{e^{i\omega t}} = 0$$

$$\Delta u - \cdot \frac{\omega^2}{c^2} u = 0 \qquad \text{HELMHOLTZOVA ROVNICE}$$

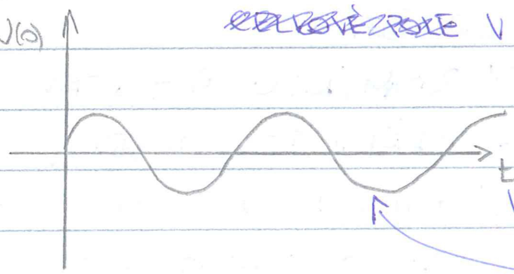
$$\Delta u + \underbrace{k^2}_{\text{VLNOČET}} \cdot u = 0 = \Delta u + \Big(\frac{2\pi}{\underbrace{\lambda}_{\text{VLNOVÁ DÉLKA}}}\Big)^2 \cdot u = 0$$

$$^{*}U(x;t) = \sum_{\omega} \underbrace{A_\omega}_{\text{VÁHY}} \cdot e^{i\omega t} \cdot u_\omega \qquad \text{4D SYNTÉZA}$$

BUDEME PŘEDPOKLÁDAT, ŽE TO POLE SE V KAŽDÉM BODĚ VLNÍ S TÍM FAKTOREM $e^{i\omega t}$, ROVNICE NÁM NASIMULUJE AMPLITUDY, KTERÉ TO V JEDNOTLIVÝCH MÍSTECH MÁ.

<u>4D SYNTÉZA</u> – MUSÍM SI NASIMULOVAT MNOHO ROVNIC* PRO RŮZNÉ ω, ŘEŠENÍ BUDOU ÚPLNĚ JINÁ. PAK TA ŘEŠENÍ MOHU S RŮZNÝMI VÁHAMI SEČÍST A DOSTANU NĚJAKÉ CELKOVÉ POLE. VÁHY A_ω, KDE JE VZÍT?

<u>VEZMU JE:</u>



~~CELKOVÉ POLE~~ V OBJEMU CHCI VYBUDIT POMOCÍ ČASOVĚ PROMĚNNÝM PULZEM. POMOCÍ FOURIEROVY TRANSFORMACE VYROBÍME FREKVENČNÍ KOMPONENTY TOHOTO PULZU.

BUDEME CHTÍT BUDOVAT PRO:

$$j: \int_{\Omega_i} [N[j]\,\Delta u + N[j]\,\frac{\omega^2}{c^2}\,u]\, d\Omega_i = 0$$

$$u = \sum_i u[i]\,N[i]$$

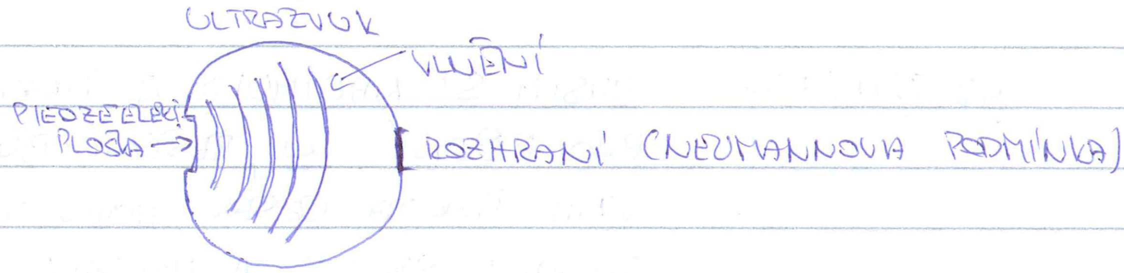
$$\sum_i u[i] \int_{\Omega_i} [\underbrace{N[j]\cdot \Delta N[i]}_{\text{UDĚLÁME PER-PARTES, ABYCHOM SE TOHO ZBAVILI}} + N[j]\,N[i]\,\frac{\omega^2}{c^2}]\, d\Omega_i = 0$$

$$\sum_i u[i] \int_{\partial\Omega} N[j]\,\nabla N[i]\, d\vec{l} + \sum_i u[i] \int_{\Omega} \left[-\nabla N[i]\,\nabla N[j] + \frac{\omega^2}{c^2} N[i]\,N[j]\right] d\Omega$$

PO HRANICI

OPĚT SE BUDEME SNAŽIT ZLIKVIDOVAT PRAVÝ ČLEN POMOCÍ DIRICHLETOVY PODMÍNKY.

DIRICHLET: ∅ — $\underline{u}$ PŘEDSTAVUJE ROZLOŽENÍ AMPLITUD V PROSTORU TOHO KMITAVÉHO MÓDU. KDYŽ NĚKDE NA HRANICI PŘEDEPÍŠU HODNOTU TOHO $\underline{u}$ TAK VLASTNĚ PŘEDEPISUJI HODNOTU AMPLITUDY. PŘEDEPSALI JSME TAK BODOVÝ ZDROJ VLNĚNÍ.

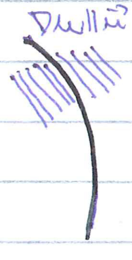


(TRIVIÁLNÍ) HOMOGENNÍ NEUMANNOVA: ∅

- ROZHRANÍM NIC NEPROCHÁZÍ (ODRAZÍ SE), TO ALE NEDOPADNE DOBŘE.
- MUSÍ NASTAVIT DALŠÍ PODMÍNKU A TO TAK, ŽE TOU HRANICÍ TO VLNĚNÍ PROJDE VEN. (TAKŽE TO "UZAVŘEME" NA KONEČNÝ POČET UZLŮ.
- TAKOVOU PODMÍNKU LZE SESTAVIT, ALE POUZE APROXIMATIVNĚ:

K ROZHRANÍ SE BLÍŽÍ ROVINNÁ VLNA:

$$u(x) = u_0 \cdot e^{i\vec{k}\vec{x}}$$



V BLÍZKOSTI HRANICE MÁ VLNA GRADIENT ROVNOBĚŽNÝ S NORMÁLOU

$$\nabla u = u_0 \cdot i\vec{k} \cdot e^{i\vec{k}\vec{x}} = ik\,u(x)$$

$$\vec{a} \parallel \vec{b} \qquad \vec{a}\cdot\vec{b} = |a|\cdot|b|\cdot\underbrace{\cos 0^\circ}_{1} = |a|\cdot|b|$$

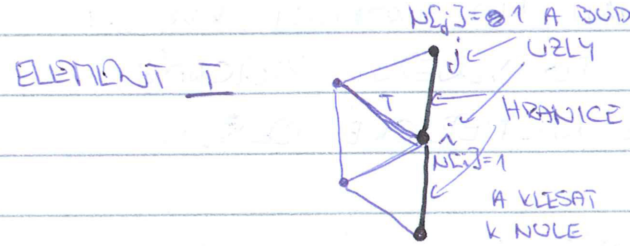
$$u_n = \nabla u \cdot \vec{n} = i\vec{k}\cdot\underbrace{\vec{n}}_{\text{JEDNOTKOVÁ NORMÁLA}}\cdot u(x) = \frac{2\pi\cdot i}{\lambda}\,u$$ ROBINOVA PODMÍNKA

$$u_n - \underbrace{\frac{2\pi i}{\lambda}}_{\alpha} u = 0$$

$$u_n - \alpha u = 0$$ TOTO MOHU DOSADIT DO OKRAJOVÉHO INTEGRÁLU:

$$\partial\Omega: \int N[j] \cdot \nabla N[i]\, \vec{n}\, d\vec{l} = \frac{2\pi i}{\lambda} \int_{\partial\Omega} N[j] \cdot N[i]\, dl = *$$

UŽ ASI NEBUDEME MÍT NA HRANICI ÚPLNĚ NULOVÉ PŘÍSPĚVKY PRO N[j]



BUDOU DVA VRCHOLY k_{ii} A k_{ji} OBA BUDOU MÍT PŘÍSPĚVKY

$$N^T[j] = \frac{x - x[i]}{x[j] - x[i]} \qquad N^T[i] = \frac{x - x[j]}{x[i] - x[j]}$$

PARAMETRIZACE OBLOUKU dl:
$$x = x_j + (x_i - x_j)\cdot\tau$$
$$y = y_j + (y_i - y_j)\cdot\tau$$

$$dl = \underbrace{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}}_{\text{DÉLKA HRANY } L_{ij}}\, d\tau$$

$$* = -\frac{2\pi i}{\lambda} \int_0^1 \frac{(x - x[i])(x - x[j])}{(x[j] - x[i])^2} L_{ij}\, d\tau = *$$

KDYŽ $\tau = 0$ JSEM $x[j]$,
KDYŽ $\tau = 1$ JSEM V $x[i]$.

$$x - x[i] = (x[i] - x[j])\tau$$

$$* = -\frac{2\pi i}{\lambda} \int_0^1 \frac{(\tau - 1)\cdot\tau}{1} L_{ij}\, d\tau = -\frac{2\pi i}{\lambda} L_{ij} \left[\frac{\tau^3}{3} - \frac{\tau^2}{2}\right]_0^1 =$$

$$= -\frac{2\pi i}{\lambda} L_{ij} \Big[\underbrace{\frac{1}{3} - \frac{1}{2}}_{-1/6}\Big] = \frac{2\pi i L_{ij}}{6\lambda}$$

NA KAŽDÉM ELEMENTU, KTERÝ BUDU ZAPRACOVÁVAT DO TÉ MATICE A MÁM NA NĚM DEFINOVANOU ROBINOVU PODMÍNKU, TAK JEDINÉ CO MUSÍM UDĚLAT JE ŽE DO ČLENU k_{ji}

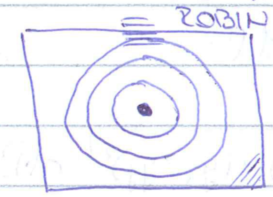
PŘIHODÍM $\frac{2\pi i}{\lambda} L_{ij} \cdot \frac{1}{6} = + k_{ji}$; NAOPAK k_{ii} MUSÍM SPOČÍTAT.

$$k_{ii} = -\frac{2\pi i}{\lambda}\int_0^1 \frac{(x - x[j])^2}{(x[j]-x[i])^2} L_{ij}\, d\xi = -\frac{2\pi i}{\lambda}\int_0^1 \xi^2 L_{ij}\, d\xi = -\frac{2\pi i}{\lambda}\cdot\frac{L_{ij}}{3}$$

JEDEN TROJÚHELNÍČKOVÝ HRANIČNÍ ROBINŮV ELEMENT UDĚLÁ DVA PŘÍSPĚVKY TYPU k_{ij} & k_{ji} (BUDOU SYMETRICKÉ) A DVA PŘÍSPĚVKY DIAGONÁLNÍ k_{ii} & k_{jj} OBA BUDOU STEJNÉ.

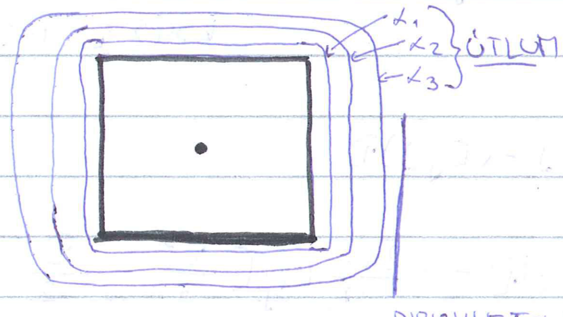
ROBINOVA PODMÍNKA JE APROXIMATIVNÍ, NA HRANICI, KDE JI PŘEDEPÍŠEME NÁM ZAJISTÍ ŽE TO VLNĚNÍ PROCHÁZÍ TAKTO

TZV. OHNE NUMERICKÉ ŘEŠENÍ ABY TO PLATILO. COŽ MŮŽE BÝT PROBLÉM, KDYŽ MÁME BODOVÝ ZDROJ V KRABICI, ZE KTERÉHO SE NÁM ŠÍŘÍ KULOVÉ VLNOPLOCHY KTERÉ VYPADAJÍ TAKTO:



TADY UŽ JE PROBLÉM (SPŇUJI ŠPATNĚ) ZDEFORMUJE ŘEŠENÍ.

VARIANTA B - KDYŽ NEMŮŽEME UDĚLAT TU HRANICE VE SPRÁVNÉM TVARU JAK BY BYLO POTŘEBA:



K HRANICI, KDE UŽ TO NECHCI SIMULOVAT PŘIDÁM PÁR VRSTEV VE KTERÝCH BUDU NAVYŠOVAT ÚTLUM. TOTO JE METODA TLUMÍCÍ ZÓNY

ZPĚT K HELMHOLTZOVĚ ROVNICI
(VLNOVÉ ROVNICI)

- BEZ OKRAJOVÉHO ČLENU ZBYLO:

$$\sum_i u[i]\int_\Omega \left[-\nabla N[i]\nabla N[j] + \frac{\omega^2}{c^2} N[i]N[j]\right] dS$$

JAKÉ ČLENY TEDY BUDOU V MATICI SOUSTAVY, VYJÁDŘIT JE POMOCÍ MOMENTOVÝCH INTEGRÁLŮ, KTERÉ ZNÁME JEJICH HODNOTY JSOU DÁNY JENOM GEOMETRIÍ SÍTĚ.

$$N[i] = a[i]x + b[i]y + c[i]$$
$$N[j] = a[j]x + b[j]y + c[j]$$

$$N[i] = \frac{1}{\underbrace{\Delta T}_{\text{PLOCHA } \Delta}} \left[(y[j] - y[k])x + (x[k] - x[j])y + x[j]y[k] - x[k]y[j] \right]$$

$$\sum_i w[i] \int_{\Omega} \Big[\overbrace{-(a[i]a[j] + b[i]b[j])}^{\text{PŘÍSPĚVEK BEZ SOUŘADNICE}} + \frac{\omega^2}{c^2} \Big\{ (a[i]a[j]x^2 + b[i]b[j]y^2 +$$
$$+ (a[i]b[j] + a[j]b[i])xy + (a[i]c[j] + a[j]c[i])x +$$
$$+ (b[i]c[j] + b[j]c[i])y + \underbrace{c[i]c[j]}_{\text{ROVNĚŽ PŘÍSPĚVEK BEZ SOUŘADNICE}} \Big\} \Big] dS$$

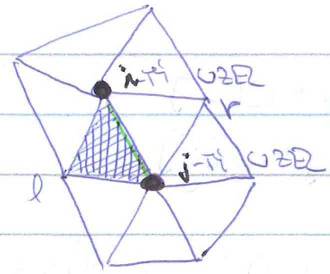
$$\sum_i w[i] \Big[-(a[i]a[j] + b[i]b[j]) + \frac{\omega^2}{c^2}(c[i]c[j]) \Big] \cdot \overbrace{\int dS}^{I(0;0) \text{ MOMENTOVÝ INTEGRÁL (PLOCHA } \Delta)} +$$
$$+ \frac{\omega^2}{c^2} \cdot a[i]a[j] \overbrace{\int x^2 dS}^{I(2;0)} + \frac{\omega^2}{c^2} b[i]b[j] \overbrace{\int y^2 dS}^{I(0;2)} + (a[i]b[j] + a[j]b[i]) \cdot$$
$$\cdot \overbrace{\int xy\, dS}^{I(1;1)} + \frac{\omega^2}{c^2}(a[i]c[j] + a[j]c[i]) \overbrace{I(1;0)}^{\int x dS} + \frac{\omega^2}{c^2}(b[i]c[j] + b[j]c[i]) \cdot$$
$$\cdot \underbrace{\int y\, dS}_{I(0;1)} \Big]$$

TO CELÉ V HRANATÉ ZÁVORCE JE k_{ji} NA PRAVOU STRANU SE NĚCO DOSTANE V PŘÍPADĚ, ŽE NĚKDE BUDE ZADEFINOVANÁ DIRICHLETOVA PODMÍNKA PAK $u[i]$ BUDE ZNÁMÉ.

SESTAVOVACÍ SMYČKA PRO FEM VE 2D

- NE PŘES VŠECHNY UZLY, ALE PŘES VŠECHNY ELEMENTY $\underline{T}$

l, r UZLY



PROCHÁZÍME TYTO ELEMENTY

1) VLEZEME DO ELEMENTU, PAK PRO KAŽDÝ <u>VNITŘNÍ</u> UZEL [i] ELEMENTU $\underline{T}$. k_{ii} SE VYTVOŘÍ Z PŘÍSPĚVKŮ KOLEM UZLU $\underline{i}$

$$k_{ii} += I_T \qquad i=j$$

2a) JE-LI j-VNITŘNÍ UZEL, PAK MUSÍME PŘIDAT:

$$k_{ij} += I_{v=l}$$ COŽ JE PŘÍSPĚVEK ZA UZEL l A HRANU L

JE-LI j-UZEL VNĚJŠÍ, PAK DIRICHLETOVSKÝ UZEL SKONČÍ V HRANICI:

$$b_j -= w[j] \cdot I_{v=l}$$

2b) JE-LI UZEL l VNITŘNÍ TAK POTOM

$$k_{ik} += I_{v=j}$$

JE-LI l-VNĚJŠÍ: $b_i -= w[k] \cdot I_{v=j}$

NYNÍ <u>SMYČKA</u> DALŠÍ VNITŘNÍ UZEL ELEMENTU $\underline{T}$

DALŠÍ <u>SMYČKA</u> PRO DALŠÍ ELEMENT $\underline{T}$.

k_{ji} A k_{jk} BUDOU VYPADAT FORMÁLNĚ STEJNĚ*, k_{ii} JE OZNAČEN JAKO I_T.

*ALE j VŽDY ZŮSTANE MĚNÍ SE INDEXY i ZA k APOD.

k_{ii} k_{jk} I_v

$(i; i)$ $j; k$ $(i; v)$

INDEXY

i k

h)

FEM V OBECNÉ DIMENZI
(VE 3D)

- PROBLÉM FEMU V OBECNÉ DIMENZI JE TEN JAK MÍT VŠECHNY TY VZTAHY NACHYSTANÉ TAK ABY SE TO DOBŘE NAPROGRAMOVAT (S MINIMÁLNÍM RIZIKEM CHYB A MAXIMÁLNÍM MOŽNÝM ZOBECNĚNÍM).

- PRO PROGRAMOVÁNÍ NEJSOU MOC VHODNÉ MOMENTOVÉ INTEGRÁLY, KTERÉ VE 2D VYPADAJÍ TAKTO:

$I(0;0) = S_T$

$I(1;0) = 1/3\,(x_a + x_b + x_c)\cdot S_T$

$I(2;0) = 1/6 \cdot (x_a^2 + x_b^2 + x_c^2 + x_a x_b + x_b x_c + x_a x_c)$

$I(1;1) = 1/12\,(2\cdot(x_a y_a + x_b y_b + x_c y_c) + x_a(y_b - y_c) + x_b(y_a + y_c) + x_c(y_a + y_b))$

PŘECHOD Z (1;1) DO (2;0):

$y \xrightarrow{\text{ZÁMĚNA}} x$: $1/12 \cdot (2\cdot(x_a^2 + x_b^2 + x_c^2) + x_a x_b + x_a x_c + x_b x_a + x_b x_c + x_c x_a + x_c x_b) =$

$= 1/\cancel{12}_{6} \cdot (\cancel{2}\cdot(x_a^2 + x_b^2 + x_c^2) + \cancel{2}x_a x_b + \cancel{2}x_a x_c + \cancel{2}x_b x_c)$

PŘECHOD Z (1;1) DO (1;0)

$y \to 1$: $1/6\,(x_a + x_b + x_c + x_a + x_b + x_c) = 1/\cancel{6}_{3}\,(\cancel{2}x_a + \cancel{2}x_b + \cancel{2}x_c) =$

$= 1/3\,(x_a + x_b + x_c)$

JE VÝHODNÉ SI MALIČKO ZMĚNIT ZÁPIS NA:

$I(2;0) \equiv I(x;x)$

$I(1;1) \equiv I(x;y)$

$I(1;0) \equiv I(x;\underset{(1)}{0})$

PŮJDE NAPSAT VZTAH PRO MOMENTOVÉ INTEGRÁLY (JEDEN VZTAH) ZE KTERÉHO PŮJDOU VŠECHNY ODVODIT:

$$I(\alpha;\beta) = 1/12\,\left(\sum_i x_i[\alpha]\cdot\sum_i x_i[\beta] + \sum_i x_i[\alpha]\cdot x_i[\beta]\right)$$

$\alpha;\beta$ MŮŽE MÍT HODNOTY $x;y;0$ PODLE TOHO VZNIKAJÍ VŠECHNY TY MOMENTY.

$x_i[\alpha]$ ABY TO FUNGOVALO TAK SE ZAVEDE VE FORMĚ TABULKY.

VŠECHNY VRCHOLY ELEMENTU

3D / 2D	$x_a[0]=1$	$x_a[x]=x_a$	$x_a[y]=y_a$	$x_a[z]=z_a$
3D / 2D	$x_b[0]=1$	$x_b[x]=x_b$	$x_b[y]=y_b$	$x_b[z]=z_b$
3D / 2D	$x_c[0]=1$	$x_c[x]=x_c$	$x_c[y]=y_c$	$x_c[z]=z_c$
3D	$x_d[0]=1$	$x_d[x]=x_d$	$x_d[y]=y_d$	$x_d[z]=z_d$

VÝHODA TOHOTO ŘAZENÍ JE ZJEVNÁ, POKUD BUDEME CHTÍT PŘEJÍT DO 3D (VE 3D JE ZÁKLADNÍ ELEMENT △ JEHLAN) POTŘEBUJEME 4 BODY a; b; c; d.

$I_{(x;x)}(2;0) = \frac{1}{12}$ ((SUMA V x-OVÉM SLOUPCI) · (SUMA V x-OVÉM SLOUPCI) + (SUMA SOUČINU x-OVÝCH SLOUPEČKŮ)) =

$$= \frac{1}{12}\left(\begin{pmatrix}x_a\\+\\x_b\\+\\x_c\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}x_a\\+\\x_b\\+\\x_c\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}x_a^2\\+\\x_b^2\\+\\x_c^2\end{pmatrix}\right)=\left(2\cdot(x_a^2+x_b^2+x_c^2)+2(x_ax_b+x_bx_c+x_cx_a)\right)\cdot\frac{1}{12}=$$

$$=\underline{\frac{1}{6}\left(x_a^2+x_b^2+x_c^2+x_ax_b+x_bx_c+x_cx_a\right)}$$

$$I_{(x;0)}(1;0)=\frac{1}{12}\left((x_a+x_b+x_c)\cdot\underbrace{(1+1+1)}_{3}+\overset{(1\cdot x_a+1\cdot x_b+1\cdot x_c)}{(x_a+x_b+x_c)}\right)=\frac{1}{12}(4x_a+4x_b+4x_c)=$$

$$=\underline{\frac{1}{3}(x_a+x_b+x_c)}$$

ZATÍM MÁME TEDY OBECNÝ VZTAH PRO MOMENTOVÉ INTEGRÁLY VE 2D.

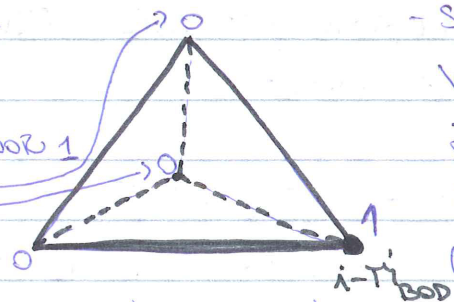
FEM VE 3D - ZÁKLADNÍM ELEMENTEM JE JEHLAN

SOUŘADNICE x, y, z

$i \equiv x_a$

TO N BUDE MÍT HODNOTU 1

A JINDE NULA



- STÁLE PLATÍ, ŽE PRO VŠECHNY TY VZTAHY SLABÉ FORMULACE STAČÍ JEDINÁ PODMÍNKA ABY TO NUMERICKY FUNGOVALO A TO ŽE ŽÁDNÝ ELEMENT NEBUDE DEGENEROVANÝ TEDY ŽE ŽÁDNÝ NEBUDE MÍT NULOVÝ OBJEM (NESMÍ BÝT NULOVÁ ANI JEDNA PLOCHA Z TĚCH STĚN). TVAROVÁ FUNKCE NAD ELEMENTEM V i-TÉM BODĚ i)

SE BUDE MUSET VYJADŘOVAT JAKO:

TVAROVÁ FUNKCE $N^T[i]$

$$N^T[i] = \bar{a}x + \bar{b}y + \bar{c}z + \bar{d}$$

PŘIBYLA 1 SOUŘADNICE NAVÍC, OPĚT POUŽIJEME CRAMEROVO PRAVIDLO ZAČNU DOSAZOVAT TY TŘI SOUŘADNICE x, y, z A V i-TÉM UZLU = (NECHŤ JE TO TEN x_a).

$$\underbrace{\begin{pmatrix} x_a & y_a & z_a & 1 \\ x_b & y_b & z_b & 1 \\ x_c & y_c & z_c & 1 \\ x_d & y_d & z_d & 1 \end{pmatrix}}_{\det A} \begin{pmatrix} \bar{a} \\ \bar{b} \\ \bar{c} \\ \bar{d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\bar{a} = \frac{\det_{\bar{a}}}{\det A} ; \bar{b} = \frac{\det_{\bar{b}}}{\det A} ; \bar{c} = \frac{\det_{\bar{c}}}{\det A} ; \bar{d} = \frac{\det_{\bar{d}}}{\det A}$$

$\det A$ NELZE PŘÍMOČAŘE ZÍSKAT 2D DETERMINANTU. JE POTŘEBA TO NĚJAK UPRAVIT, BUDEME UPRAVOVAT MATICI $\underline{A}$.

$$\begin{pmatrix} x_a & y_a & z_a & 1 \\ x_b & y_b & z_b & 1 \\ x_c & y_c & z_c & 1 \\ x_d & y_d & z_d & 1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} x_a - x_b & y_a - y_b & z_a - z_c & 0 \\ x_b - x_c & y_b - y_c & z_b - z_c & 0 \\ x_c - x_d & y_c - y_d & z_c - z_d & 0 \\ x_d & y_d & z_d & 1 \end{pmatrix} \sim$$

$$\begin{array}{cc} & \text{2D} \\ \text{1D} & \\ \sim 1 \cdot & \begin{pmatrix} \boxed{x_a - x_b} & y_a - y_b & z_a - z_b \\ x_b - x_c & y_b - y_c & z_b - z_c \\ x_c - x_d & y_c - y_d & z_c - z_d \end{pmatrix} \end{array}$$

$$\det \text{ PRO 2D} = (x_a - x_b) \cdot (y_b - y_c) - (y_a - y_b) \cdot (x_b - x_c) = x_a y_b - x_a y_c + x_b y_c -$$

$$- y_a x_b + y_a x_c - y_b x_c$$

VE 2D $S_T = \frac{|\Delta|}{2} = \frac{|\det A|}{2}$ VE 3D $V_{JEHLAN} = \frac{|\det A|}{6}$

V OBECNÉ DIMENZI $V_T = \frac{1}{d!} |\det A|$

DIMENZE

SKORO JEDINÉ CO BUDEME VYHODNOCOVAT NA TOM MASHI BUDOU OBJEMY ELEMENTŮ.

MOMENTOVÉ INTEGRÁLY VE 3D

JEHLAN = j

$$M_{jehlan}(0;0;0) = V_j$$

$$M_j(1;0;0) = 1/4\,(x_a + x_b + x_c + x_d) \cdot V_j$$

$$M_j(2;0;0) = 1/10\,(x_a^2 + x_b^2 + x_c^2 + x_d^2 + x_a x_b + x_b x_c + x_c x_d + x_a x_c + x_a x_d + x_b x_a) \cdot V_j$$

$$M_j(1;1;0) = 1/20\,[2(x_a y_a + x_b y_b + x_c y_c + x_d y_d) + x_a y_b + x_a y_c + x_a y_d + x_b y_a + x_b y_c + x_b y_d + x_c y_a + x_c y_b + x_c y_d + x_d y_b + x_d y_c + x_d y_a] \cdot V_j$$

VE 3D:

$$M(\alpha;\beta) = 1/20 \left[\sum_i x_i[\alpha] \cdot \sum_i x_i[\beta] + \sum_i x_i[\alpha] \cdot x_i[\beta] \right] \cdot V_j$$

$$M_j(1;1;0) = M_j(x;y) = \begin{pmatrix} x_a \\ + \\ x_b \\ + \\ x_c \\ + \\ x_d \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} y_a \\ + \\ y_b \\ + \\ y_c \\ + \\ y_d \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x_a y_a \\ + \\ x_b y_b \\ + \\ x_c y_c \\ + \\ x_d \cdot y_d \end{pmatrix}$$

$$M_j(1;0;0) = M_j(0;x) = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ + \\ 1 \\ + \\ 1 \\ + \\ 1 \end{pmatrix}}_{= 4} \cdot \begin{pmatrix} x_a \\ + \\ x_b \\ + \\ x_c \\ + \\ x_d \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x_a \\ + \\ x_b \\ + \\ x_c \\ + \\ x_d \end{pmatrix} = 1/4\,(x_a + x_b + x_c + x_d)$$

ZÁVISLOST MEZI 2D & 3D ... $\frac{1}{(d+1)(d+2)}$

1/12 1/20 d ... DIMENZE

$$\boxed{M(\alpha;\beta) = \frac{1}{(d+1)(d+2)} \left[\sum_{i=1}^{d+1} x_i[\alpha] \cdot \sum_{i=1}^{d+1} x_i[\beta] + \sum_{i=1}^{d+1} x_i[\alpha] \cdot x_i[\beta] \right] \cdot V_j}$$

ij

(V PLOŠE)

VE FEM NAKONEC ČLOVĚK VŽDYCKY SKONČÍ S INTEGRÁLY TYPU:

T-ELEMENT

$$\sum u[j] \int_T N[i]\, N[j]\, dx\, dy \quad \ldots \quad k \cdot u$$

NEBO TAM MŮŽE BÝT JEN JEDEN

c - KONSTANTA

$$c \cdot \int_T N[i]\, dx\, dy \quad \ldots + \ldots$$

N[i] - GALERKINOVA VÁŽÍCÍ FCE

N[j] - OD $\sum u[j]$

$$N^T[i] = ax + by + c$$

$$\int N[i]\, dx\, dy = \bar{a} \cdot \underbrace{\int x\, dx\, dy}_{\substack{I(1;0)\\ I(x;0)}} + \bar{b} \underbrace{\int y\, dx\, dy}_{\substack{I(0;1)\\ I(y;0)}} + \bar{c} \cdot \underbrace{\int dx\, dy}_{I(0;0)} = *$$

$i = a$ (UZEL)

$$N^T[i] = \underbrace{\frac{(y_b - y_c)}{delA}}_{\bar{a}} \cdot x + \underbrace{\frac{x_c - x_b}{delA}}_{\bar{b}} \cdot y + \underbrace{\frac{x_b y_c - x_c y_b}{delA}}_{\bar{c}}$$

$$delA = x_a y_b + x_b y_c + x_c y_a - x_a y_c - x_b y_a - x_c y_b$$

$I(0;0) = S_T$ PLOCHA TROJÚHELNÍKA

$$I(1;0) = \frac{x_a + x_b + x_c}{3} \cdot S_T$$

$$I(0;1) = \frac{y_a + y_b + y_c}{3} \cdot S_T$$

$$* = \bar{a} \int x\, dx\, dy + \bar{b} \int y\, dx\, dy + \bar{c} \int dx\, dy = \left[\frac{y_b - y_c}{delA} \cdot \frac{x_a + x_b + x_c}{3} + \frac{x_c - x_b}{delA} \cdot \frac{y_a + y_b + y_c}{3} + \right.$$

$$\left. + \frac{x_b y_c - x_c y_b}{delA} \right] \cdot S_T = \frac{S_T}{3 \cdot delA} \left[y_b x_a + \cancel{y_b x_b} + y_b x_c - y_c x_a - x_b y_c - \right.$$

$$\left. - \cancel{y_c x_c} + x_c y_a + x_c y_b + \cancel{x_c y_c} - x_b y_a - \cancel{x_b y_b} - x_b y_c + 3 x_b y_c - 3 x_c y_b \right] =$$

$$= \left[y_b x_a - y_c x_a + x_c y_a - x_b y_a + x_b y_c - x_c y_b \right] \cdot \frac{S_T}{3 \cdot delA} =$$

ZBYLO NÁM V ZÁVORCE 6 ČLENŮ,

STEJNÉ JAKO V delA, CELÁ ZÁVORKA VYŠLA STEJNĚ

JAKO TEN DETERMINANT A. POKRÁTÍ SE TEDY.

$$\longrightarrow = \int_T N[i]\,dx\,dy = \frac{S_T}{3} = \frac{|\det A|}{6}$$

DÁ SE ODVODIT ŽE INTEGRÁL PŘES ELEMENTY JE:

$$\int_T N^i[a]\,N^j[b]\,N^k[c]\,dx\,dy = \frac{i!\cdot j!\cdot k!}{(i+j+k+2)!}\cdot|\det A|$$

PRO 2D

KDYŽ BUDE $i=1$; $j=0$; $k=0$ PAK VYJDE $\frac{|\det A|}{6}$, COŽ SEDÍ.
VĚTŠINOU JE TO I TAK, ŽE GENERÁTOR SÍTĚ K TĚM ELEMENTŮM I JEJICH OBJEMY UKLÁDÁ VYPOČÍTANÉ, TAKŽE KDYŽ NAČÍTÁME UZLY A ELEMENTY ROVNOU NAČTETE I JEJICH OBJEMY.

V OBECNÉ DIMENZI, VE m DIMENZI
BUDEME MÍT TOLIK TVAROVÝCH FCÍ, KOLIK JE VRCHOLŮ (V 1D .. 2; V 2D .. 3 ..)
3D .. 4

$$\int_T N^i[a]\,N^j[b]\ldots N^m[m]\,dV = \frac{i!\cdot j!\cdot\ldots m!}{(i+j+\ldots m+\text{DIMENZE})!}\cdot|\det A|$$

TOHLE SUPER, TAK KDE JSOU PROBLÉMY?
JEŠTĚ JE TAM LAPLACIÁN TÉ NEZNÁMÉ PROMĚNNÉ; MUSÍME UDĚLAT 1 PER-PARTES A SKONČILO TO TAKTO:

$$\int \nabla N[i]\cdot\nabla N[j]\,d\Omega = (\bar{a}[i]\cdot\bar{a}[j] + \bar{b}[j]\cdot\bar{b}[i])\cdot\underbrace{\int d\Omega}_{\text{OBJEM ELEMENTU}}$$

$\downarrow$ $\quad$ $\downarrow$

$\bar{a}[i]$ $\quad$ $\bar{a}[j]$

$\bar{b}[i]$ $\quad$ $\bar{b}[j]$

BOHUŽEL BUDEME POTŘEBOVAT TA ČÍSLA a; b; c.
TY TVAROVÉ FUNKCE MUSÍME VYPOČÍTAT JINAK SE NEDOSTANEME K LAPLACIÁNU.

POZDĚJI SE UKÁŽE, ŽE VĚTŠINOU NÁM PŘED $\underline{u}$ NESTOJÍ KONSTANTA "$\underline{k\cdot u}$" ALE STOJÍ TAM NĚJAKÁ FUNKCE "$f(r)\cdot u$", POTOM TO VEDE K TOMU, TAK TO $f(r)$

BUDE V INTEGRÁLU A NEPŮJDE TO Z TOHO TAK SNADNO DOSTAT:

$\sum u[i] \int f(r) \underbrace{N[i]}_{a_r+b} \underbrace{N[j]}_{c_r+d} \, dl$ (1D)

OTEVÍRAJÍ SE TU DVĚ CESTY, NEJDE ŘÍCT KTERÁ JE LEPŠÍ
JDE ŘÍCT ~~KTERÁ~~ KTERÁ JE POHODLNĚJŠÍ (UKÁŽE SE, ŽE POHODLNĚJŠÍ JE I ČISTČÍ.

1) MOŽNOST

- ROZLOŽIT N NA MOMENTOVÉ INTEGRÁLY A TU FUNKCI $f(r)$ POČÍTAT EXAKTNĚ. $f(r)$ MŮŽE BÝT ALE HNUSNÁ FUNKCE.

2) MOŽNOST (POHODLNĚJŠÍ)

- NA ZAČÁTKU JSME U GALERKINA ŘEKLI, ŽE HLEDÁME ŘEŠENÍ NA TŘÍDĚ FEM PŘÍPUSTNÝCH FUNKCÍ A PROČ BRÁT $f(r)$ ANALITICKY? NO SAMOZŘ. NEBUDEME!!

PŘÍPUSTNÁ FUNKCE JE: $m = \sum u[i] N[i]$

TO STEJNÉ MOHU UDĚLAT I PRO TO $f(r)$:

$$f = \sum_i f[i] N[i]$$

FEM APROXIMACE FUNKCE f, DOPADNE TO PAK TAKTO:

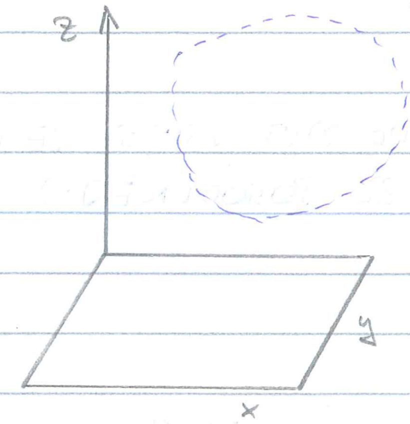
$$\sum_k f[k] \sum u[i] \int N[i] N[j] N[k] \, dl$$

k BUDE JEDNO Z TĚCH DVOU i, j

OBĚ MOŽNOSTI VEDOU K RŮZNÝM VÝSLEDKŮM. !

ADD 2) VEZMEME SI SOUŘADNICE $x[i]$, TO VÍME TO JSOU TY UZLY, V KAŽDÉM UZLU SI SPOČTU KOLIK JE FUNKČNÍ HODNOTA (DOSADÍM $x[i]$ DO f) A TO SE OBJEVÍ VE $f[k]$.

FEM VE 3D A OKRAJOVÉ INTEGRÁLY ~~PODMÍNKY~~



OBJEMOVÉ INTEGRÁLY ŘEŠÍME POMOCÍ MOMENTOVÝCH INTEGRÁLŮ, CO S TÍM KRAJOVÝ? BUDOU ÚLOHY, KDE TY KRAJOVÉ PŘISPĚJÍ, (DIRICHLET ANI HOMOGENÍ NEUMANN NEPŘISPĚJÍ, ALE JINÉ MOHOU).

ZNOVU UDĚLÁME PRO $\Delta u = 0$:

$j: \sum_i u[i] \int N[j] \Delta N[i] dV = 0$ OPĚT PER-PARTES

$$\sum_i u[i] \left[\int \nabla N[j] \cdot \nabla N[i] dV + \int \nabla (N[j] \nabla N[i]) dV \right] = 0$$

PODLE STOKESOVA TEORÉMU SE SNIŽUJE DIMENZE O 1

$\int N[j] \cdot \nabla N[i] \vec{n} \, dS$ $\vec{n}$ - NORMÁLA

TADY CHCEME NEUMAN. PODMÍNKU TYPU $u_n = h$ (HODNOTA $\neq 0$)

MŮŽEME DÁT ROBINOVU PODMÍNKU, TA ŘÍKÁ $u_n = \alpha u$

$\underline{u_n = h}$: $\int N[i] h(\vec{r}) dS$

OBĚ MOHOU BÝT FUNKCE SOUŘADNIC

$\underline{u_n = \alpha u}$: $\int N[i] \cdot \alpha(\vec{r}) \cdot N[j] dS$

AŽ NA NĚJAKÉ FUNKCE SOUŘADNIC SE OKRAJOVÉ INTEGRÁLY SVEDOU NA TO, ŽE NEDAJÍ VŮBEC ŽÁDNÝ PŘÍSPĚVEK A NEBO ŽE MÁ PŘÍSPĚVEK V PODOBĚ TVAROVÝCH FUNKCÍ A NIC VÍC. (OPĚT MOMENTOVÉ INTEGRÁLY)

VE 3D $I_T(i,j,k) = \int_T x^i \cdot y^j \cdot z^k dV$

MOMENTOVÉ INTEGRÁLY PRO OKRAJOVOU PLOCHU:

$$Q_{\partial T}(i,j,k) = \int_{\partial T} x^i \cdot y^j \cdot z^k dS$$

BUDOU VYPADAT PODOBNĚ AŽ NA TO ŽE BUDEME INTEGROVAT PO HRANIČNÍ STĚNĚ.

MÁME TU TEDY PLOŠNÝ INTEGRÁL, TA STĚNA SE TEDY MUSÍ PARAMETRIZOVAT, ZVOLÍME ZA $\underline{z = \alpha x + \beta y + \gamma}$

JEDEN ELEMENT MŮŽE MÍT NĚKOLIK HRANIČNÍCH STĚN.

SOUSTAVA VYPADÁ TAKTO: (CHCEME ABY ROVINA POPISOVALA TŘI VRCHOLY OKRAJOVÉHO TROJÚHELNÍKA).

$$z_a = \alpha x_a + \beta y_a + \gamma$$
$$z_b = \alpha x_b + \beta y_b + \gamma$$
$$z_c = \alpha x_c + \beta y_c + \gamma$$

$$\overbrace{\underbrace{\begin{pmatrix} x_a & y_a & 1 \\ x_b & y_b & 1 \\ x_c & y_c & 1 \end{pmatrix}}_{\det A}}^{A} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_a \\ z_b \\ z_c \end{pmatrix} \qquad (\Delta = \det)$$

$\alpha = \frac{\Delta_\alpha}{\Delta}$; $\beta = \frac{\Delta_\beta}{\Delta}$; $\gamma = \frac{\Delta_\gamma}{\Delta}$

ZNAČÍME Δ NEBO "det" IKDYŽ FORMÁLNĚ JE TO JINÝ DETERMINANT.

Z MATICE $\underline{A}$ JSEM ZÍSKAL DETERMINANTEM OBSAH TROJÚHELNÍKA, KTERÝ JE PŘEDEPSÁN 3 BODY V ROVINĚ $(x;y)$. DÍKY PRŮMĚRU MŮŽE BÝT TEN TROJÚHELNÍK DEGENEROVANÝ DO ÚSEČKY, S TÍM BUDEME TEĎ BOJOVAT.

PŘEDSTAVÍME SI ŽE $z(x;y)$ PAK DOSTANEME:

$$Q_{\partial T}(i;j;k) = \int_{\partial T} x^i \cdot y^j \cdot z^k \cdot \sqrt{1 + \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)^2}\, dx\, dy =$$

$$\frac{\partial z}{\partial x} = \alpha = \frac{\Delta_\alpha}{\Delta} \; ; \; \frac{\partial z}{\partial y} = \beta = \frac{\Delta_\beta}{\Delta}$$

HLE, PROBLÉM S DIVERGENCÍ

$$= \int_{\partial T} x^i \cdot y^j \cdot z^k \underbrace{\sqrt{1 + \frac{\Delta_\alpha^2}{\Delta^2} + \frac{\Delta_\beta^2}{\Delta^2}}}_{} \, dx\, dy = \frac{\sqrt{\Delta^2 + \Delta_\alpha^2 + \Delta_\beta^2}}{\sqrt{\Delta^2}} \cdot \int_T x^i \cdot y^j \cdot z^k \, dx\, dy =$$

PŘEDNEDU NA SPOL. JMENOVATEL A VYKOPU VEN PROTOŽE JSOU V NICH SOUŘADNICE VRCHOLŮ A TY NEINTEGRUJI.

$$= \frac{1}{|\Delta|} \sqrt{\Delta^2 + \Delta_\alpha^2 + \Delta_\beta^2} \int_{\partial T} x^i \cdot y^j \cdot z^k \, dx\, dy$$

TAKTO TEDY VYPADÁ PŘÍSPĚVEK MOMENTOVÉHO OKRAJOVÉHO INTEGRÁLU. $\cancel{|\Delta|}$

$$I(i,j,k) = M_T(i,j,k)\, V_T$$

CO TŘEBA $Q_{\partial T}(i;j;0) = \frac{1}{\cancel{|\Delta|}} \sqrt{\Delta^2 + \Delta_\alpha^2 + \Delta_\beta^2} \cdot \underbrace{M^{2D}_{\partial T}(i;j)}_{\int_{\partial T} x^i y^j \, dx\, dy} \cdot S_T^{\,''\, 2} = \longrightarrow$

$$= \sqrt{\Delta^2+\Delta_\alpha^2+\Delta_B^2} \cdot M^{2D}_{\partial T}(i;j) \cdot \frac{1}{2} = Q_{\partial T}(i;j;0)$$

KAŽDÝ MOMENTOVÝ INTEGRÁL, I TEN OKRAJOVÝ BY MĚL VYJÍT ÚMĚRNÝ PLOŠE TOHO ELEMENTU, KTERÝ POČÍTÁM

DALŠÍ TYP MOM. INTEGRÁLU:

$$Q_{\partial T}(i;j;1) = \frac{1}{|\Delta|}\sqrt{\Delta^2+\Delta_\alpha^2+\Delta_\beta^2}\int_{\partial T} x^i \cdot y^j \cdot \underbrace{(\alpha x+\beta y+\gamma)}_{z}\,dx\,dy =$$

(POSUNUTÉ MOMENTY)

$$= \text{———} \,''\, \text{———} \int_{\partial T}(\alpha x^{i+1}y^j + \beta x^i y^{j+1} + \gamma x^i y^j)\,dx\,dy =$$

$$= \frac{1}{|\Delta|} \text{———} \,''\, \text{———} \left[\alpha \cdot M^{2D}_{\partial T}(i+1;j) + \beta \cdot M^{2D}_{\partial T}(i;j+1) + \gamma \cdot M^{2D}_{\partial T}(i;j)\right] \cdot \underbrace{S_{\partial T}}_{\frac{|\Delta|}{2}} =$$

$$= 1/2 \cdot \sqrt{\Delta^2+\Delta_\alpha^2+\Delta_B^2} \cdot \left[\underbrace{\alpha}_{\frac{\Delta_\alpha}{\Delta}} \cdot M^{2D}_{\partial T}(i+1;j) + \underbrace{\beta}_{\frac{\Delta_B}{\Delta}} \cdot M^{2D}_{\partial T}(i;j+1) + \underbrace{\gamma}_{\frac{\Delta_\gamma}{\Delta}} M^{2D}_{\partial T}(i;j)\right] =$$

$$= 1/2 \cdot \sqrt{\Delta^2+\Delta_\alpha^2+\Delta_B^2} \cdot M^{2D}_{\partial T}[i\,;z]$$

x / | \ y
0

$$Q_{\partial T}(0;0;2) = 1/2\sqrt{\Delta^2+\Delta_\alpha^2+\Delta_B^2} \cdot M^{2D}_{\partial T}[z;z]$$

OBECNĚ $Q_{\partial T}(\alpha;\beta) = 1/2\sqrt{\Delta^2+\Delta_\alpha^2+\Delta_B^2}\; M_{\partial T}(\alpha;\beta)$

↳ MOMENTOVÝ PŘÍSPĚVEK OD HRANIČNÍCH PLOCH

VODÍKU PODOBNÉ ATOMY

- JE NUTNÉ ZAPSAT SCHRÖDINGEROVU ROVNICI V COULOMBOVĚ POLI JÁDRA O NÁBOJI Z.

1D: $$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\underbrace{\left(R''_{n,l} + \frac{2}{r}R'_{n,l}\right)}_{\text{LAPLACIÁN}} - \underbrace{\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z\cdot e^2}{r}}_{\text{COULOMBOVSKÝ POTENCIÁL}} \cdot R_{n,l} = \left(\underbrace{E_{n,l}}_{\text{PRAVÁ STRANA SCH. ROVNICE}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}\right)\cdot R_{n,l}$$

PŮVODNÍ VLNOVÁ FUNKCE JE ROZSEPAROVANÁ NA 3 KUSY:

$$\psi(r;\vartheta;\varphi) = (R(r);\,\Theta(\vartheta);\,\Phi(\varphi))$$

ČÍSLA $n;l$ JSOU CELÁ (TA KVANTOVOST).

MUJ

DOSADÍME DO TOHO ŘEŠENÍ KONEČNÝCH DIFERENCÍ:

- BUDEME MÍT DISKRETIZACI TOHO r (TÉ RADIÁLNÍ SOUŘADNICE)

$$r[i] = \underbrace{\xi}_{\text{krok}} \cdot i$$

- DERIVACE TĚCH VELKÝCH R:

$$R''[i] = \frac{R[i-1] - 2R[i] + R[i+1]}{\xi^2}$$

$$R'[i] = \frac{R[i+1] - R[i-1]}{2\xi}$$

VZNIKNOU MI ROVNICE PRO VŠECHNA MOŽNÁ i A BUDOU V NICH POUZE NEZNÁMÉ R.

$$i: \quad \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2\mu}}_{\substack{\text{REDUKOVANÁ}\\ \text{HMOTNOST}\\ \text{ELEKTRON - JÁDRO}}} \left(\frac{R[i-1] - 2R[i] + R[i+1]}{\xi^2} + \frac{2}{\xi \cdot i} \frac{R[i+1] - R[i-1]}{2\xi} \right) - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot$$

$$\cdot \frac{z \cdot e^2}{\xi \cdot i} R[i] = \left(E_{n,l} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{(\xi i)^2} \right) \cdot R[i]$$

NA i-TÉM ŘÁDKU JE NĚJAKÁ LINEÁRNÍ KOMBINACE R (R V RŮZNÝCH BODECH), JDE TO VYJÁDŘIT MATICOVĚ:

i - ŘÁDEK

$k_{i,i} \quad i; R[i]$

$k_{i,i+1} \quad i; R[i+1]$

$k_{i,i-1} \quad i; R[i-1]$

JINÉ ČLENY NEŽ TYTO TAM NEBUDOU, POTOM LZE TU CELOU ROVNICI PŘEPSAT:

$$i = k \cdot R = \sum_j \underbrace{k_{ij}}_{\text{TRIDIAGONÁLNÍ}} R[j] = 0$$

OPĚT TO BUDE PROBLÉM VLASTNÍCH HODNOT, BUDEME TO ŘEŠIT TAKTO: $\sum_j \tilde{k}_{ij} R[j] = \lambda R[i]$

$$\lambda = E_{m,l}$$

$$\tilde{k}_{i,i} : \frac{\hbar^2}{\mu\xi^2} - \frac{Z \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{\xi i} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{\xi^2 \cdot i^2} \qquad \Big/ \cdot \left(2 \cdot \frac{\mu\xi^2}{\hbar^2}\right)$$

$$\tilde{k}_{i,i+1} \quad -\frac{\hbar^2}{2\mu\xi^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu\xi^2 \cdot i} = 0 \qquad \Big/ \cdot \left(2 \cdot \frac{\mu\xi^2}{\hbar^2}\right)$$

$$\tilde{k}_{i,i-1} \quad -\frac{\hbar^2}{2\mu\xi^2} + \frac{\hbar^2}{\xi^2 \cdot i \cdot 2\mu} = 0 \qquad \Big/ \cdot \left(2 \cdot \frac{\mu\xi^2}{\hbar^2}\right)$$

$$\tilde{k}_{ii} = 2 - \frac{2\mu\xi^{\cancel{2}}}{\hbar^2} \cdot \frac{Z \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{\cancel{\xi} i} = -\frac{\cancel{2\mu}\cancel{\xi^2}}{\cancel{\hbar^2}} \cdot \frac{\cancel{\hbar^2}}{\cancel{2\mu}} \cdot \frac{l(l+1)}{\cancel{\xi^2} \cdot i^2}$$

$\frac{1}{a_0}$ ... BOHRŮV POLOMĚR

$$\tilde{k}_{ii} = 2 - \frac{2 \cdot Z \cdot \mu \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2} \cdot \frac{\xi}{i} + \frac{l(l+1)}{i^2} = 2 - \frac{2Z}{i} \cdot \frac{\xi}{a_0} + \frac{l(l+1)}{i^2}$$

$$k_{i,i\pm 1} = -1 \mp \frac{1}{i} \qquad \lambda = \frac{2\mu\xi^2}{\hbar^2} \cdot E_{m,l}$$

ξ ... KROK DISKRETIZACE, ZBYTEK SI ZVOLÍM

ZÁVISÍ TO NA VÝRAZU $\frac{\xi}{a_0}$, KTERÝ NÁM ŘÍKÁ, ŽE KVALITA APROXIMACE JE DÁNA JAK HUSTĚ NAVZORKUJEME BOHRŮV POLOMĚR. MÁME TADY ALE PROBLÉM, ŽE V PRVCÍCH MATICE SE VYSKYTUJÍ TYTO ČÍSLA, BACHA NA DATOVÉ TYPY U VYSOKÝCH i, MŮŽE FLOAT / DOUBLE VYHODNOTIT JAKO NULU, ŘEŠENÍ LONG LONG...

NA TOMTO MODELU LZE ZKOUMAT ZDA PŘIDÁVÁNÍ DALŠÍCH UZLŮ BUDE LEPŠÍ NEBO NE.

NYNÍ TO UDĚLÁME POMOCÍ FEMU

- DOPADNE TO NĚJAK TAKTO:

$$i: \sum R[j] \Big\{ -\tfrac{1}{2}\left[N'[j]\, r^2 N[i]\right]_0^\infty + \underbrace{\tfrac{1}{2}\int N'[j]\, r^2 N'[i]\, dr}_{\text{TY GRADIENTY}} - \underbrace{\frac{Z}{a_0}\int r N[i] N[j]\, dr}_{\text{Z COULOMBOVA POT.}} +$$

$$+ \underbrace{\tfrac{1}{2} l(l+1) \int N[i]\, N[j]\, dr}_{\text{VYCHÁZÍ Z DERIVACE}} \Big\} =$$

$$= \frac{\mu}{\hbar^2} E_{n,l} \sum_j R[j] \int r^2 \overbrace{N[i]\, N[j]}^{\text{GALERKIN}} dr$$

$r = 0 \quad R[0]$ $\qquad$ r-ka ... JSME VE SFÉRICKÝCH SOUŘADNICÍCH

$r = a \quad R[a]$ $\qquad$ A $dV = r^2 dr$

OKRAJOVÉ PODMÍNKY

$r=0$ ... $R[0]$ – HOMOGENNÍ NEUMANN

$r=a$ ... $R[a]$ – TADY JE TO HORŠÍ, CHCEME VÁZANÉ STAVY, ABY FCE BYLA NORMOVATELNÁ MUSÍ KLESAT EXPONENCIÁLNĚ. CHCEME ABY SIMULOVANÝ OBJEM NATOLIK VELIKÝ ABY NA HRANICÍCH HODNOTY ψ BYLY HODNĚ MALÉ AŽ ZANEDBATELNÉ.

DVA ZPŮSOBY (OBA ŠPATNĚ)

ŘEKNEME $R[a]=0$

VLNOVÁ FUNKCE V KLESNE NA NULU, Z ANALITICKÉHO ŘEŠENÍ KLESNE R NA NULU AŽ V ∞.

ŘEKNEME $R'[a]$

MĚKČÍ OMEZENÍ, OPĚT JE TO ALE AŽ V ∞, ŘEŠENÍM JE POSUNOUT a NĚKAM K 10 BOHROVÝM POLOMĚRŮM, ALE I DĚLÁ PROBLÉM (VELIKOST PAMĚTI)

ROVNOBĚŽNÉ

DŮLEŽITÉ JE, ŽE OBĚ ŘEŠENÍ JSOU BEZ PŘÍSPĚVKU!!!

DOSTANEME PAK ÚLOHU

$$\sum_j k_{ij} R[j] = \lambda \sum_j \underbrace{B_{ij}}_{\text{MATICE}} R[j]$$

ZOBECNĚNÝ PROBLÉM VLASTNÍCH HODNOT

[BYLI JSME ZVYKLÍ ŽE $B_{ij} = \delta_{ij}$, B_{ij} JE JEDNOTKOVÁ MATICE, TO TADY ALE NENÍ.]

ANALITICKÉ ŘEŠENÍ PROBLÉMU VLASTNÍCH HODNOT VYPADÁ TAKTO:

$$k \cdot x = \lambda \cdot B \cdot x \quad / B^{-1}$$

$$B^{-1} \cdot k \cdot x = \lambda \cdot x$$

NUMERICKY TO ALE TAKO NEPŮJDE JSME VE FEM A MATICE B BUDE HODNĚ ŘÍDKÁ, JEJÍ INVERZNÍ MATICE BUDE OPAK (PĚKNĚ HNUSNÁ).

MOHU ZASE DOSADIT TO STEJNÉ: $r[i] = \xi \cdot i$
POTOM VYJDOU (TŘI) DIAGONÁLNÍ ČLENY

$$k_{j,j} = (3j^2+1) - \frac{2\xi \cdot Z}{a_0} \cdot j + l(l+1)$$

$$k_{j,j\pm1} = -1/2\left[3j(j\pm1)+1\right] - 1/4\, \frac{\xi \cdot Z}{a_0}\left[j + j \pm 1\right] + \frac{1}{4} l(l+1)$$

MATICE B BUDE TAKY TRIDIAGONÁLNÍ:

$$B_{j,j} = 1/5\,(10j^2+1)$$

$$\lambda = \frac{\mu \cdot E_{n,l}}{\hbar^2}$$

$$B_{j,j+1} = 1/20\,(10j \cdot (j+1) + 3)$$

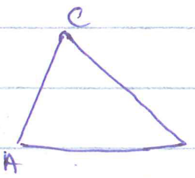
ČLENY k_{jj} A $k_{j,j\pm1}$ SE POROVNÁVAJÍ DOCELA TĚŽKO, ALE JE TAM ZÁVISLOST $\frac{\xi \cdot Z}{a_0}$, VLASTNÍ HODNOTY SE BUDOU ZLEPŠOVAT ČÍM VÍCE BUDEME ZORKOVAT BOHRŮV POLOMĚR. DÍKY λ MOHU POROVNAT S ANALITICKÝMI HODNOTAMI, A MŮŽEME PRO STEJNĚ VELKOU SÍŤ POROVNÁVAT JESTLI LEPŠÍ VÝSLEDKY DÁVÁ MKD NEBO FEM.

POKRAČOVÁNÍ VYŠŠÍ DÍVČÍ:

$\Delta_T = dllA_T$
← ŘÍKÁ SE ELEMENT T

FEM 2D: $\int_T (N[a])^i \cdot (N[b])^j \cdot (N[c])^k \, dx\,dy = \frac{i!\,j!\,k!}{(i+j+k+2)!} \cdot |\Delta_T|$

MÁME ELEMENT T S UZLY $(a;b;c)T$, V KONKRÉTNÍM VYBRANÉM T, PAK MŮŽEME NAPSAT TOTO.

NA PŘÍSLUŠNÉM TROJÚHELNÍČKU T:  SE NEMŮŽE STÁT, ŽE BY NENULOVÁ BYLA JINÁ FUNKCE NEŽ N[a], N[b], N[c], PROTOŽE VŠECHNY OSTATNÍ LEŽÍ VE VEDLEJŠÍCH ELEMENTECH. MÁM TAM JEN MOCNINY TĚCHTO TŘÍ N.

$\det A = \Delta_T = x_a y_b + x_b y_c + x_c y_a - x_b y_a - x_c y_b - x_a y_c$

VYSKYTUJÍ SE JEŠTĚ DALŠÍ DVA TYPY INTEGRÁLŮ, LAPLACIÁN NÁM VŽDY PŘINÁŠEL NĚCO JAKO:
SKALÁRNÍ SOUČIN GRADIENTŮ A ČLEN, KTERÝ BYL OKRAJOVÝ...

2) PŘÍSPĚVEK $\int \nabla N[i] \cdot \nabla N[j]\, dx\,dy = {}^{*}$ TOHLE NEZAPADÁ DO FORMULKY ZAPSANÉ VÝŠE, TAK SE K TOMU MUSÍME NĚJAK DOSTAT. JAK TO SPOČÍTAT, MUSÍME TAKY NAPSAT ŽE TO

$N[i] = \alpha[i]x + \beta[i]y + \gamma[i]$

$\nabla N[i] = (\alpha[i]; \beta[i])$ OINDEXOVALI JSME KONSTANTY ROVINY

$$\overset{*}{=} \int_T (\alpha[i]\cdot\alpha[j] + \beta[i]\beta[j]\,dx\,dy)\,dx\,dy = (\alpha[i]\alpha[j] + \beta[i]\beta[j]) \cdot \frac{|\Delta_T|}{2}$$

α a β OBSAHUJÍ ZNÁMÉ SOUŘADNICE VRCHOLŮ A NIC SE TAM NEINTEGRUJE, TAK TO VYTKNU PŘED INTEGRÁL.

KROMĚ „OBJEMU" Δ_T MUSÍM SPOČÍTAT I TY TVAROVÉ FUNKCE.

3) PŘÍSPĚVEK

$$\int f(x;y)\cdot(N[a])^i\cdot(N[b])^j\cdot(N[c])^k\,dx\,dy$$

$$f(x;y) = \sum_\ell f[\ell]\cdot N[\ell]$$

$$\sum_\ell f[\ell] \int N[\ell]\cdot(N[a])^i\cdot(N[b])^j\cdot(N[c])^k\,dx\,dy =$$

$\hookrightarrow f[a]N[a] + f[b]N[b] + f[c]N[c]$ ZBYTEK N JE NULOVÝ, MÁME TROJÚHELNÍK A ŽÁDNÝ DALŠÍ VRCHOL NEŽ TYTO 3 TAM NENÍ $_A\Delta_B^C$

$$= f[a]\int_T N[a]^{i+1}\cdot N[b]^j\cdot N[c]^k\,dx\,dy + f[b]\int_T N[a]^i N[b]^{j+1}\cdot N[c]^k\,dx\,dy +$$

$$+ f[c]\int_T N[a]^i\cdot N[b]^j\cdot N[c]^{k+1}\,dx\,dy \;{}^{*}$$

* TYHLE TY ČLENY V INTEGRÁLECH ZNÁM, MOHU Z NICH VYTKNOUT $|\Delta_T|$ A IMPLEMENTOVAT.

$$\boxed{= \left[f[a] \cdot (i+1)! \cdot j! \cdot k! + f[b] \cdot i! \cdot (j+1)! \cdot k! + f[c]\, i! \cdot j! \cdot (k+1)! \right] \frac{|\Delta_T|}{(i+j+k+3)!}}$$

TÍMHLE POPÍŠU SKORO VŠECHNY FYZ. ROVNICE!

<u>PŘÍKLAD</u> SCHRÖDINGEROVA ROVNICE PRO ATOM VODÍKU.

<u>STACIONÁRNÍ SCH. ROVNICE:</u> $H\psi = E\psi$

$$H = T + V = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{e^2}{r}$$

NECHCEME PRACOVAT V KARTÉZSKÝCH SOUŘADNICÍCH POTOM ALE ~~U~~ U ATOMU HELIA BUDEME.
MUSÍME SI TEDY VYJÁDŘIT LAPLACIÁN VE SFÉR. SOUŘ.

$$\Delta f = \frac{1}{\sqrt{|g|}}\left(\sqrt{|g|}\cdot g^{\alpha\beta}\cdot f_\alpha\right)_\beta = \frac{1}{r^2\cdot \sin\vartheta}\left(r^2 \sin\vartheta \cdot f_r\right)_r + \frac{1}{r^2\cdot\sin\vartheta}\cdot$$

$$g^{\alpha\beta} = \begin{array}{cc} \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1/r^2 & \\ & & 1/r^2\cdot\sin^2\vartheta \end{pmatrix} & \begin{array}{c} r \\ \vartheta \\ \varphi \end{array} \end{array} \qquad g_{\alpha\beta} = \sqrt{|g|} = r^2\cdot\sin\vartheta = \frac{1}{g^{\alpha\beta}}$$

$$g^{\alpha\beta} = \frac{1}{r^2\cdot\sin\vartheta} \quad \text{INVERZE}$$

$$\cdot\left(r^2\cdot\sin\vartheta\,\frac{1}{r^2}\, f_\vartheta\right)_\vartheta + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\left(r^2\sin\vartheta + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta} f_\varphi\right)_\varphi =$$

$$= \underbrace{\left(r^2 f_r\right)_r + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\left(\sin\vartheta\, f_\vartheta\right)_\vartheta + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta} f_{\varphi\varphi}}$$

TOTO NYNÍ DOSADÍM DO SCHRÖDINGEROVY ROVNICE.

TOTO JE TEN LAPLACIÁN

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{2r\psi_r + r^2\psi}{r^2} + \frac{1}{r^2\cdot\sin\vartheta}\left(\cos\vartheta\cdot\psi_\vartheta\, \sin\vartheta\cdot\psi_{\vartheta\vartheta} + \frac{1}{\sin\vartheta}\psi_{\varphi\varphi}\right)\right] \rightarrow$$

$$+ \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{e^2}{r}\psi = E\psi$$

UDĚLÁME SEPARACI PROMĚNNÝCH ⟿ NEMÍCHÁ SE r S ÚHLY ϑ, φ.
ROVNICE SE MI SKLÁDÁ ZE 2 KUSŮ, JEDEN JE FCÍ $\underline{r}$ A DRUHÝ JE FCÍ ϑ, φ. OBĚ VĚCI SE NĚJAK SROVNAJÍ.

R

PŘEDSTAVÍME SI ŽE $\psi = R(r)\cdot\Theta(\vartheta;\varphi)$

$$\cancel{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{2r}{r^2}\Theta\cdot\frac{R_r}{R}+\frac{r^2}{r^2}\Theta\frac{R_{rr}}{R}+\frac{1}{r^2}\cdot\frac{1}{\Theta}\cdot\frac{1}{\sin\vartheta}(\cos\vartheta\, R\cdot\Theta_\vartheta+\sin\vartheta\cdot\right.}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[2\frac{r}{r^2}\Theta\cdot R_r+\frac{r^2}{r^2}\Theta R_{rr}+\frac{1}{r^2}\cdot\frac{1}{\sin\vartheta}(\cos\vartheta\, R\cdot\Theta_\vartheta+\sin\vartheta\cdot R\Theta_{\vartheta\vartheta}+\right.$$

PŘED ZÁVORKU

$$\left.+\frac{1}{\sin\vartheta}\cdot R\cdot\Theta_{\varphi\varphi}\right]-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{e^2}{r}R\cdot\Theta=E\cdot R\cdot\Theta \qquad /\text{PODĚLÍM } \psi=R\Theta$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{2\cancel{r}}{R r^{\cancel{2}}}R_r+\frac{\cancel{r^2}}{R\cancel{r^2}}R_{rr}-\underbrace{\frac{1}{r^2}\cdot\frac{1}{\sin\vartheta\,\Theta}\left(\cos\vartheta\cdot\Theta_\vartheta+\sin\vartheta\cdot\Theta_{\vartheta\vartheta}+\right.}_{\lambda\text{ - KONSTANTA}}\right.$$

$$\left.+\frac{1}{\sin\vartheta}\Theta_{\varphi\varphi}\right]-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{e^2}{r}=E$$

- $\frac{1}{\sin\vartheta}\left(\cos\vartheta\cdot\Theta_\vartheta+\sin\vartheta\cdot\Theta_{\vartheta\vartheta}+\frac{1}{\sin\vartheta}\Theta_{\varphi\varphi}\right)=\lambda\Theta$

- $-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{2}{r}R_r+R_{rr}+\frac{1}{r^2}\lambda\right]-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{e^2}{r}R=ER$

VEDE K TOMU ŽE $\underline{\lambda}$ JE NĚJAKÉ $l\cdot(l+1)$

KDYŽ NA ROVNICE VÝŠE APLIKOVALI GALERKINA (VÁŽENÍ PRO FEM).
TAK JSME DOSTALI MATICI:

RADIÁLNÍ DERIVACE

$$k_{ij}=\frac{1}{2}\int N[j]'\cdot r^2 N[i]'dr-\underbrace{\frac{z}{a_0}\int r N[i]N[j]dr}_{✠}+\underbrace{\frac{1}{2}l(l+1)\int N[i]N[j]dr}_{*k_{ii}}$$

$$B_{ij}=\int r^2 N[i]N[j]dr$$

MÁME ZVOLENÝ EKVIDISTANTNÍ MESH $r[i]=\xi\cdot i$

$$k_{ii}*\ \frac{1}{2}l(l+1)\int N[i]^i N[j]^j dr=\frac{1}{2}l(l+1)\cdot\frac{1!\cdot 1!}{(i+\cancel{k}+j+1)!}\cdot|\Delta_T|=\frac{1}{2}l(l+1)\frac{1}{3!}|\Delta_T|$$

$$\int N[i]^i\cdot N[j]^j dr=\frac{i!\cdot j!}{(i+j+1)!}\cdot|\Delta_T|=\text{-----------}$$

$$✠\ \frac{z}{a_0}\cdot\left[r[i]\underbrace{\int N[i]\cdot N[i]\cdot N[j]dr}_{ZA\ r}+r[j]\underbrace{\int N[i]\cdot N[j]\cdot N[j]dr}_{ZA\ r}\right]=$$

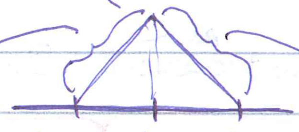
$r[i] \downarrow \xi\cdot i$; $r[j] \downarrow \xi(i+1)$

$$= \frac{Z}{a_0}\left[r[i] \int N[i]^2 \cdot N[j]\,dr + r[j]\int N[i]\cdot N[j]^2\,dr \right] = \frac{Z}{a_0}\left[\xi \cdot i \cdot \frac{2!}{4!} \cdot \overset{\text{ZA } \Delta}{\xi} + \right.$$

$$\left. + \xi \cdot (i+1)\,\frac{2!}{4!}\,\overset{\text{ZA } \Delta}{\xi} \right] = \frac{Z}{a_0}\left[i + i + 1 \right] \frac{2\xi^2}{4!} = \frac{(2i+1)\cdot Z}{a_0} \cdot \frac{\xi^2}{12}$$

$$B_{ii} = \int_i^{i+1} r^2 N[i]\cdot N[i]\,dr = r^2[i]\int N[i]^3\,dr + r^2[i+1]\int N[i]^2 \cdot N[i+1]\,dr =$$

$$= \xi^2 \cdot i \cdot \frac{3!}{4!} \cdot \xi + \xi^2 (i+1)^2 \cdot \frac{2!}{4!} \cdot \xi = \frac{\xi^3}{4!}\left(i \cdot 3! + 2! \cdot (i+1)^2 \right)$$



TOTO JE JEN POLOVINA VÝPOČTU

DRUHÁ PŮLKA

$$\int_{i-1}^{i} r^2 N[i]\, N[i]\,dr = \xi^2 \cdot i^2 \int N^3[i]\,dr + \xi^2 (i-1)^2 \cdot \int N^2[i] \cdot N[i-1]\,dr =$$

$$= \xi^2 \cdot i^2 \,\frac{3!}{4!}\,\xi + \xi^2 (i-1)^2 \cdot \frac{2!}{4!}\,\xi = \frac{\xi^3}{4!}\left(3! \cdot i + 2!\,(i-1)^2 \right)$$

SPOJÍME OBĚ POLOVINY

$$\frac{\xi^3}{4!}\left(3! \cdot i + 2!\,(i+1)^2 + 3! \cdot i + 2!\,(i-1)^2 \right) = \frac{\xi^3}{4!}\left(6i^2 + 2i^2 + \cancel{4i} + 2 + 6i^2 + \right.$$

$$\left. + 2i^2 - \cancel{4i} + 2 \right) = \frac{\xi^3}{4!}\left(12 i^2 + 4i^2 + 4 \right) = \frac{\xi^3}{24}\left(16 i^2 + 4 \right) = \frac{\xi^3}{6}\left(4i^2 + 1 \right)$$

ATOM HELIA (NEBO PODOBNÉHO)

$$H\psi = \left[\sum_{i=1,2\ldots} \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_i^2 - \frac{Z\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 \cdot r_i} \right) + \overbrace{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}^{\text{VAZBA MEZI ELEKTRONY}} \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

$(\nabla r_1, \nabla r_2$ — TĚŽKÉ JÁDRO, PAK VYPADNOU

HODNĚ NAPRD

ATOM HELIA MÁ VELKÝ PROBLÉM A TO TEN, ŽE JSOU V NĚM 2 ELEKTRONY A K NIM 1 JÁDRO (POVAŽUJEME ZA VELMI TĚŽKÉ A NEHYBNÉ) BUDE V POČÁTKU SOUŘADNIC. PROBLÉM S ELEKTRONY BUDE TEN, ŽE TAM BUDE INTERAKCE I MEZI NIMI (COULOMBOVSKÁ).

KINETICKÁ ENERGIE JE ADITIVNÍ $T = \sum_i T_i$, SOUSTAVA ČÁSTIC ⇒ SEČTU JEJICH KIN. EN.

68:28

LAPLACIÁNY BUDOU KAŽDÝ VE SVÉ VLASTNÍ SOUŘADNICI.
TEĎ KDYŽ TO BUDU CHTÍT ROZSEPAROVAT, TAK NAPÍŠU:

$$\psi(\vec{r}_1;\vec{r}_2)=\psi_1(\vec{r}_1)\cdot\psi_2(\vec{r}_2)$$ (JEDNOČÁSTICOVÁ APROX)

(R_1, Θ_1, R_2, Θ_2)

CELKOVÁ VLNOVÁ FCE

KAŽDÉ ψ SE ROZPADÁ NA $R_2(R_1)$ A $\Theta_1(\Theta_2)$, TOMUHLE KROKU BRÁNÍ ČLEN $|\vec{r}_1-\vec{r}_2|$ TOHLE NEJDE NAPSAT JAKO SOUČIN $\underline{R}$. MUSÍ SE S TÍM PROVÉST:

POKUSÍME SE SPOČÍTAT KOLIK JE ENERGIE ZÁKLADNÍHO STAVU (NEJNIŽŠÍ HLADINU):

$E=\langle\psi|H|\psi\rangle$

BUDU PROVÁDĚT TAKOVOU VARIACI ABYCH DOSTAL, CO NEJNIŽŠÍ ENERGII.

$$\int\psi^*\cdot H\psi\, dV_1\, dV_2=\int\psi_1^*\psi_2^*\hat{H}(\psi_1;\psi_2)\, r^2\sin\vartheta_1\, dr_1\, d\varphi_1\, d\vartheta_1\cdot$$

ZÁVISÍ NA $R_1;R_2$ PROTO →

JSME VE VÍCE SOUŘADNICÍCH

$$\cdot r_2^2\sin\vartheta_2\cdot dr_2\, d\varphi_2\, d\vartheta_2=$$

$$=\int\psi_1^*\cdot\psi_2^*\cdot\Big(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_1\psi_1-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_1\Delta_2\psi_2-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_1}\psi_1\psi_2-$$

$$-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\cdot r_2}\cdot\psi_1\cdot\psi_2+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}\psi_1\psi_2\Big)\cdot r_1^2\sin\vartheta_1\, dr_1\, d\varphi_1\, d\vartheta_1\cdot$$

$$\cdot r_2^2\sin\vartheta_2\cdot dr_2\, d\varphi_2\, d\vartheta_2$$

JE NĚKOLIK CEST DALŠÍHO POSTUPU, NEJJEDNODUŠŠÍ BUDE ZVOLIT SI JAK MAJÍ VYPADAT ψ_1 A ψ_2.

$$\psi_i=\sqrt{\frac{2^3}{\pi a^3}}\cdot e^{-\frac{2\cdot r_i}{a_0}}$$

a_0 .. BOHRŮV POLOMĚR

BUDU POČÍTAT JEDNOU S $\underline{r_1}$ A PAK S $\underline{r_2}$

S-ORBITALY MAJÍ TU VÝHODU ŽE V NICH NEVYSTUPUJE ϑ & φ,

PODÍVÁME SE NA PŘÍSPĚVKY OD LAPLACIÁNŮ, STAČÍ VYPOČÍTAT JEN JEDEN:

ZA Z INTEGRACE PŘES ÚHLOVÉ ČÁSTI

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\langle\psi|\Delta_{r_1}|\psi\rangle = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\cancel{\frac{\int \psi_1^*\cdot\psi_2^*\cdot\psi_1\cdot\Delta_1\psi_1\, r_1^2\cdot r_2^2\, dr_1\, dr_2\,(4\pi)^2}{(4\pi)^2\int\psi_1^*\cdot\psi_2^*\cdot\psi_1\cdot\psi_2\, r_1^2\cdot r_2^2\, dr_1\, dr_2}} =$$

MUSÍM NORMOVAT →

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\cancel{\frac{\left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^2\int e^{-\frac{2r_1}{a_0}}}{\left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^2\int e^{-2}}}$$

ATOM HELIA JEDNOČÁSTICOVĚ: VLNOVOU FCI JSME VYTVOŘILI SEPAROVANOU $\psi(\vec{r}_1;\vec{r}_2)=\psi(\vec{r}_1)\cdot\psi(\vec{r}_2)$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\langle\Delta r_1\rangle = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\,\frac{\int_0^\infty \exp\left(-2\frac{Z'\cdot r_1}{a_0}\right)\cdot\left[r_1^2\cdot\frac{Z'^2}{a_0}-2r_1\cdot\frac{Z'}{a_0}\right]dr_1}{\int_0^\infty \exp\left(-2\cdot Z'\cdot\frac{r_1}{a_0}\right)r_1^2\, dr_1} =$$

NORMOVACÍ INTEGRÁL

POZN.: $\int_0^\infty x^k \exp(-\alpha x)\,dx = \frac{k!}{\alpha^{k+1}}$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\left(\frac{Z'}{a_0}\right)^2\cdot\frac{2}{\left(2\frac{Z'}{a_0}\right)^3} - \frac{2Z'}{a_0}\frac{1}{\left(2\cdot\frac{Z'}{a_0}\right)^2}\cdot\frac{\left(2\cdot\frac{Z'}{a_0}\right)}{1}}{\frac{2}{\left(2\frac{Z'}{a_0}\right)^3}} =$$

OPĚTNĚ VZATÁ PRVNÍ HLADINA VODÍKU

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{Z'^2}{a_0^2}-\frac{2Z'}{a_0^2}\right) = \frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{Z'^2}{a_0^2} = \underline{\underline{-Z'\cdot E_1}}$$

$$E_1 = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0}$$

DALŠÍ INTEGRÁL BY VYŠEL:

$$\frac{Z\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left\langle -\frac{1}{r_1}\right\rangle \overset{=\ldots=}{} 2Z\cdot Z'\cdot E_1$$

↳ POCHÁZÍ Z VLNOVÉ FUNKCE ψ

↳ ELEKTRON PŘITAHOVANÝ JÁDREM O NÁBOJI $\underline{Z}$.

POSLEDNÍ ČLEN:

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\underbrace{\left\langle\frac{1}{r_{12}}\right\rangle}_{\text{STŘEDNÍ HODNOTA}} = \frac{1}{4}\,\frac{e^2}{\pi\varepsilon_0}\left(\frac{2z'}{a_0}\right)^6\cdot\int\frac{e^{\left(-2z'\frac{r_1+r_2}{a_0}\right)}}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}\cdot r_1^2 r_2^2\,dr_1\,dr_2 =$$

ŠÍLENÉ NUMERICKY INT.

FINTA

$$= \frac{1}{4}\left(\frac{2z'}{a_0}\right)^6\frac{1}{4\pi}\int\varphi(r_2)\cdot\rho(r_1)\cdot r_2^2\,dr_2 =$$

HUSTOTA r_1

POTENCIÁL Z r_2

$$\varphi(r_2) = 4\pi\int\frac{\rho(r_1)}{4\pi\varepsilon_0|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}\,r_1^2\,dr_1$$

$$\rho(r_1) = e\cdot\exp\left(-2z'\cdot\frac{r_1}{a_0}\right)$$

ELEMENTÁRNÍ NÁBOJ

PŘIPOMÍNÁ GREENOVU FUNKCI POISSONOVY ROVNICE PRO ELEKTROSTATIKU.

VYJDEME NYNÍ Z MAXWELLOVY ROVNICE

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2E(r)\right) = \operatorname{div}\vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0}$$

(POZOR NA VYJÁDŘENÍ div V RADIÁLNÍCH SOUŘADNICÍCH)

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\vec{E}(r)\right) = r^2\frac{\rho}{\varepsilon_0}$$

$$\vec{E}(r) = \frac{1}{r^2}\int_0^r r'^2\cdot\frac{\rho(r')}{\varepsilon_0}\,dr$$

$$E = -\operatorname{grad}\varphi$$

$$\varphi(r_2) = -\int_{r_2}^{\infty}\frac{dr}{r^2}\cdot\int_0^r r_1^2\frac{\rho(r_1)}{\varepsilon_0}\,dr_1 =$$

ZMIZELO $|\vec{r}_1-\vec{r}_2|$

PER PARTES

$$= \left[-\frac{1}{r}\underbrace{\int_0^r r_1^2\frac{\rho(r_1)}{\varepsilon_0}\,dr_1}_{\int_0^{r_2} r_1^2\frac{\rho(r_1)}{\varepsilon_0}dr_1}\right]_{r_2}^{\infty} + \int_{r_2}^{\infty} r_1^2\frac{\rho(r_1)}{\varepsilon_0}\,dr_1 =$$

5)

$$= -\frac{1}{4}\cdot\frac{a_0^2\cdot e}{r_2\cdot z'^3\cdot\varepsilon_0}\left[-a_0+(2z'\cdot r_2+a_0)\cdot\exp\left(-2\cdot\frac{z'\cdot r_2}{a_0}\right)\right]=\varphi(r_2)$$

DÁ SE TEDY POTOM DOKÁZAT: $\left\langle\frac{1}{r_{12}}\right\rangle = -\frac{5}{4}z'\cdot E_1$

$$\langle\hat{H}\rangle = \underbrace{-2z'^2\cdot E_1 + 4z\cdot z'\cdot E_1 - \frac{5}{4}z'\cdot E_1}_{\text{VŠECHNY 3 ČLENY}}$$

KIN. ENERGIE   VAZBA K JÁDRU   VZÁJEMNÁ INTERAKCE DVOU ELEKTRONŮ MEZI SEBOU

KDYŽ SE UDĚLÁ $\frac{\partial}{\partial z'}$: $=(4z'+4z-\frac{5}{4})E_1=0$ $E_1\neq 0$

$$z'=z-\frac{5}{16}=2-\frac{5}{16}=\underline{1{,}69}$$

VYUŽITÍ TRIKU S divergencí VE FEMU

OPĚT SCHRÖDINGEROVA ROVNICE:

$$\hat{H}\psi=\left[\sum_{i=1;2}\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta r_i-\frac{ze^2}{4\pi\varepsilon_0\cdot r_i}\right)+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\cdot r_{12}}\right]\psi(r_1;r_2)$$

NYNÍ NEBUDEME PŘECHÁZET DO RADIÁLNÍCH SOUŘADNIC, ALE ZŮSTANEME V KARTÉZSKÝCH. OPĚT 1-ČÁSTICOVÁ APROXIMACE, $\psi(r_1;r_2)=\psi(r_1)\cdot\psi(r_2)$ BUDEME VYŽADOVAT ABY TYTO VZTAHY BYLY ORTONORMÁLNÍ:

$$\int\psi_i^*\psi_j\,dr_i^3\,dr_j^3=\delta_{ij}$$

$$\langle\psi_1\psi_2|\hat{H}|\psi_1\psi_2\rangle+\sum_{ij}\lambda_{ij}(\langle\psi_i|\psi_j\rangle-\delta_{ij})\xrightarrow{\text{PODMÍNKA}}\min.$$

ORTONORMALITY

↳ LAGRANGEOVY MULTIPLIKÁTORY

↳ TOTO MINIMALIZOVAT

TOTO NENÍ ÚPLNĚ SNADNÉ VYŘEŠIT, POUŽÍVÁ SE HARTREEHO APROXIMACE.

HARTREEHO APROXIMACE

k-POČET ELEK. KTERÉ POČÍTÁME

$$k: \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_k - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r_k} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{j\neq k}\int\frac{|\psi_j|^2}{|\vec{r}_k-\vec{r}_j|}d^3r_j\right)\psi_k = E\psi_k$$

$j\neq k$ – ELEKTRON SE POHYBUJE V POLI OSTATNÍCH ELEKTRONŮ, PRO 2 ELEKTRONY PLATÍ, ŽE V ROVNICI PRVNÍHO ELEKTRONU SE POHYBUJI V POLI DRUHÉHO A NAOPAK.

POTENCIÁL $\phi_j(r_k) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int\frac{e|\psi_j|^2}{|\vec{r}_k-\vec{r}_j|}d^3r_j$

VŠIMNEME SI ŽE JE TO OPĚT GREENOVA FUNKCE $\Delta\phi = -\frac{\rho_k}{\varepsilon_0}$ KDE $\rho_k = e|\psi_k|^2$.

TADY JE SKRYTÁ NEUTRALITA

$$k: \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_k - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{Ze^2}{r_k} + \sum_{j\neq k}e\phi_j\right)\psi_k = E\psi_k$$

1) ZVOLÍME $\psi_j(i) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3}}\cdot e^{-\frac{Z\cdot r_j}{a_0}}$ VÝCHOZÍ APROXIMACI ORBITALŮ, ŽE JSOU TŘEBA PRÁVĚ TY VODÍKU PODOBNÉ.

MUSÍ SE k× UDĚLAT <u>FEM</u>, NA STEJNÉ MESHY!
MUSÍME JEŠTĚ DOPLNIT <u>k</u> NUMERICKÝCH PODMÍNEK:

$$k: \int\psi_k^*\psi_k\, dr_k = 1$$

ZVOLÍM <u>E</u> VYPOČÍTÁM ψ-čka, JESTLI NEJSOU NORMOVANÁ POSUNU <u>E</u> NĚJAKÝM SMĚREM ATD...

m)

FEM V ČASOVÉ OBLASTI

DIFÚZE

IZOTROPNÍ — HOMOG.

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \nabla (D \cdot \nabla \Phi) = D \cdot \Delta \Phi$$

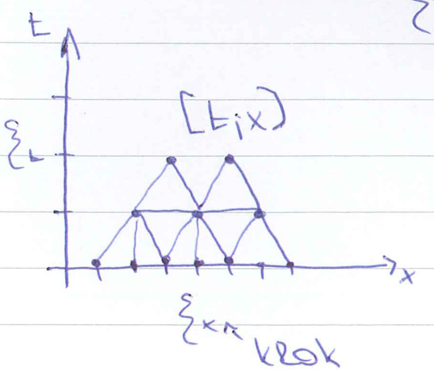
KOEFICIENT DIFÚZE

USTÁLENÝ STAV $\Phi(0;x) = f(x)$ DOPOSUD ŘEŠENO

KDYŽ CHCEME ČAS NECHAT, VLOŽÍME DO TOHO KONEČNÉ DIFERENCE.

FD:
$$\frac{\Phi[t+1;i]-\Phi[t;i]}{\xi_t} = D\,\frac{\Phi[t;i-1]-2\Phi[t;i]+\Phi[t;i+1]}{\xi_x^2}$$

ξ_t KROK V ČASOVÉ OBLASTI



VŠE|CO JE VE STARÉM ČASE SE PŘESUNE DOPRAVA. MUSÍME ZNÁT POČÁTEČNÍ PODMÍNKY!

CELÝ ZLOMEK

i: $\Phi[t+1;i] = \Phi[t;i] + D \% \frac{\xi_t}{\xi_x}$ POZOR, ŘEŠENÍ BUDE OVLIVNĚNO POMĚREM KROKU V ČASOVÉ A PROSTOROVÉ OBLASTI.

HYBRIDNÍ FEM FD MODEL

- VYŽADUJE ABYCHOM PROSTOROVOU ČÁST ŘEŠILI POMOCÍ FEMU KDYŽ TO KONEČNÉ DIFERENCE NEBUDOU ZVLÁDAT
- VEZMEME SI TU STEJNOU ROVNICI:

$$\dot{\Phi} = D \cdot \Delta \Phi \qquad D = \text{KONST.}$$

- KDE NEBUDEME V 1DIMENZI, BUDE PLATIT SLABÁ FORMA V KAŽDÉM ČASOVÉM OKAMŽIKU, KTERÝ SI ZVOLÍM:

$$\forall t: \int \dot{\Phi}\, dV = D \int \Delta \Phi\, dV$$

$$\Phi = \sum \Phi[i]\, N[i]$$

$$\dot{\Phi} = \sum_i \dot{\Phi}[i]\, N[i]$$

N)

PRO VŠECHNY ČASY BUDE j-ROVNIC

$$\sum_i \Phi[i]\int N[j]N[i]\,dV = D\cdot\sum_i \Phi[i]\int N[j]\,\Delta N[i]\,dV =$$

$$= D\sum_i \Phi[i]\Big[\underbrace{\cancel{\int \nabla(N[j]\nabla N[i])\,dS}}_{\text{MOHU VYNECHAT DÍKY OKRAJOVÝM PODMÍNKÁM}} - \int \nabla N[j]\nabla N[i]\,dV\Big] =$$

$$= -D\cdot\sum_i \Phi[i]\int \nabla N[j]\nabla N[i]\,dV$$ TOTO PLATÍ V KAŽDÉM ČASE

PROSTOROVÁ ČÁST FEM, ČASOVÁ UŽ BUDE FD,
DO Φ DOSADÍM KONEČNÉ DIFERENCE.

$$j:\ \sum_i \frac{\tilde{\Phi}[i]-\Phi[i]}{\xi_t}\int \text{ZBYTEK STEJNÝ}\,dV = \ldots$$

$$j:\ \sum_i \tilde{\Phi}[i]\underbrace{\int N[j]N[i]\,dV}_{\text{MATICE SOUSTAVY}} = \overbrace{\sum_i \Phi[i]\Big[-D\cdot\xi_t\int \nabla N[j]\cdot\nabla N[i]\,dV +}^{\text{VEKTOR PRAVÉ STRANY}}$$

$$+\int N[j]N[i]\,dV\Big]$$

FDTD MAXWELLOVY ROVNICE

VLNOVÁ ROVNICE (SKALÁRNÍ)

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \Delta u = 0 \qquad \text{V 1D}\quad \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

TOTO JE ROVNICE HYPERBOLICKÉHO TYPU, MAJÍ ŘEŠENÍ VE TVARU VLN.

NA TUTO ROVNICI APLIKUJEME KONEČNÉ DIFERENCE

$$\frac{1}{c^2}\cdot\frac{u[t+1;i]-2u[t;i]+u[t-1;i]}{\Delta t^2} = \frac{u[t;i+1]-2u[t;i]+u[t;i-1]}{\Delta x^2}$$

NW]

NYNÍ NÁS BUDE ZAJÍMAT BLIŽŠÍ VZTAH MEZI Δt A Δx.
DOSADÍME POKUSNÉ ŘEŠENÍ VE TVARU ROVINNÉ VLNY

$$u(t;x) = A \cdot e^{i(\omega t - kx)}$$ A – AMPLITUDA → KONSTANTNÍ

↓ ZDISKRETIZUJEME t & x

$$u[n;i] = A \cdot e^{i(\omega n \cdot \Delta t - k\Delta x \cdot i)}$$

$n \cdot \Delta t$; $i \cdot \Delta x$ TOTO VYHODNOCUJEME, MÁME EKVIDISTANTNÍ SÍŤ PRO SOUŘADNICE A PRO ČAS.

$$u[n+1;i] = A \cdot e^{i[\omega(n+1)\Delta t + k \cdot \Delta x \cdot i]} = A e^{i[\omega \cdot n\Delta t - k \cdot \Delta x]} \cdot e^{i\omega\Delta t} =$$

$$= u[n;i] \cdot e^{i\omega\Delta t} \qquad u[n;i+1] = u[n;i] \cdot e^{-ik\Delta x}$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{u[n;i] \cdot e^{i\omega\Delta t} - 2 \cdot u[n;i] + u[n;i] \cdot e^{-i\omega\Delta t}}{\Delta t^2} =$$

$$= \frac{u[n;i] \cdot e^{-ik\Delta x} - 2u[n;i] + u[n;i] \cdot e^{ik\Delta x}}{\Delta x^2}$$

$$\frac{1}{c^2\Delta t^2} \cdot \left[\left(e^{i\omega\Delta t} + e^{-i\omega\Delta t}\right) - 2\right] = \left[\left(e^{-ik\Delta x} + e^{ik\Delta x}\right) - 2\right] \cdot \frac{1}{\Delta x^2}$$

ANZAC!

$$\frac{1}{c^2\Delta t^2}\left[2 \cdot (\cos \omega\Delta t) - 2\right] = \frac{1}{\Delta x^2}\left[2 \cdot (\cos k\Delta x) - 2\right]$$

$$2 \cdot \frac{1}{c^2\Delta t^2} \cdot \sin^2 \frac{\omega\Delta t}{2} = 2 \cdot \frac{1}{\Delta x^2} \sin^2 \frac{k\Delta x}{2}$$

$$\sin^2 \frac{\omega\Delta t}{2} = \underbrace{\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}}_{S^2} \sin^2 \frac{k\Delta x}{2}$$

TADY JE TO INDEX LOMU

$$\boxed{\sin \frac{\omega\Delta t}{2} = S \cdot \sin \frac{k\Delta x}{2}} = S \cdot \sin^2 \frac{2\pi \cdot n}{\lambda_0} \cdot \frac{\Delta x}{2}$$

HUSTOTA VZORK. VL. DÉLKY

CHCEME SI TO NAVZORKOVAT ABY NA 1 VLN. DÉLCE BYLO VÍCE MÓDŮ.

x1

KDYŽ BUDE $\frac{\Delta x}{\lambda_D}$ MALÉ TAK TO BUDE DOBRÉ, KDYŽ BUDE VELKÉ TAK MOHOU VZNIKAT PROBLÉMY (KVŮLI SINU), $\sin\frac{k\cdot\Delta x}{2}$ MŮŽE BÝT TŘEBA 0,4 A PAK STAČÍ ABY S=3 A NA PRAVÉ STRANĚ BUDEME MÍT 1,2 A NA LEVÉ POUZE $\sin\frac{\omega\cdot\Delta t}{2}$ COŽ JE NEPŘÍJEMNÉ PROTOŽE ABY S TÍMTO SINUS PORADIL MUSÍ BÝT ω IMAGINÁRNÍ. COŽ JE NAPRD PROTOŽE:

$$e^{i\omega\Delta t} \rightarrow e^{i(i\tilde{\omega})\Delta t} \approx e^{\omega\Delta t}$$

HYPERBOLICKÉ ROVNICE VYŽADUJÍ ABY ČASOVÝ KROK BYL VELMI V TĚSNÉM VZTAHU S KROKEM PROSTOROVÝM.

$$S=\frac{c\cdot\Delta t}{\Delta x} \Rightarrow \Delta t=\frac{S\cdot\Delta x}{c}$$

$$\sin\frac{\omega\cdot S\cdot\Delta x}{c\cdot 2}=\sin\frac{\omega\Delta t}{2}=S\cdot\sin\frac{k\cdot\Delta x}{2}$$

S – BYLO BY DOBRÉ ABY BYLO MENŠÍ NEBO ROVNO 1.

$S\leq 1$ PODMÍNKA! MUSÍ $\leq$ BÝT NEŽ NĚJAKÉ $S_{kritické}$ STABILITY!

PŘ: ZVUK VE VODĚ $c=1500\ m s^{-1}$.
VLNOVÁ DÉLKA $\lambda=1$ mm, SÍŤ 1 UZEL NA DESETINU MILIMETRU (10 NA VLN. DÉLKU)

PŘEDPOKLAD $S=1=\frac{c\cdot\Delta t}{\Delta x}=\frac{c}{c}=1$

$$\frac{1}{\cancel{c^2}}\frac{u_{\dots}}{\cancel{\Delta t^2}}=\frac{u_{\dots}}{\cancel{\Delta x^2}}$$

$u[t+1;i]-2u[t;i]+u[t-1;i]=u[t;i+1]-2[t;i]+u[t;i-1]$

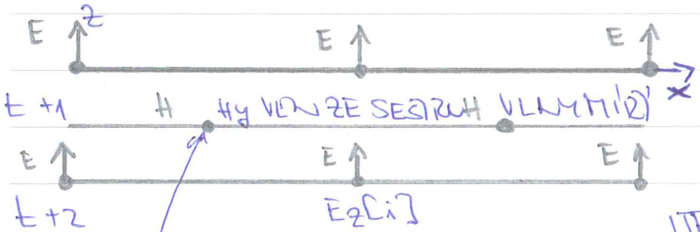
NEZÁVISÍ NA Δx, NENÍ TAM VZORKOVÁNÍ

MAXWELLOVY ROVNICE

V 1D - ZATÍM POTOM ROZŠÍŘÍME DO 3D

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu}\left[\frac{\partial E_z}{\partial x} - \left(M_y^s + \sigma^m H_y\right)\right]$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon}\left[\frac{\partial H_y}{\partial x} - \left(J_z^s + \sigma E_z\right)\right]$$

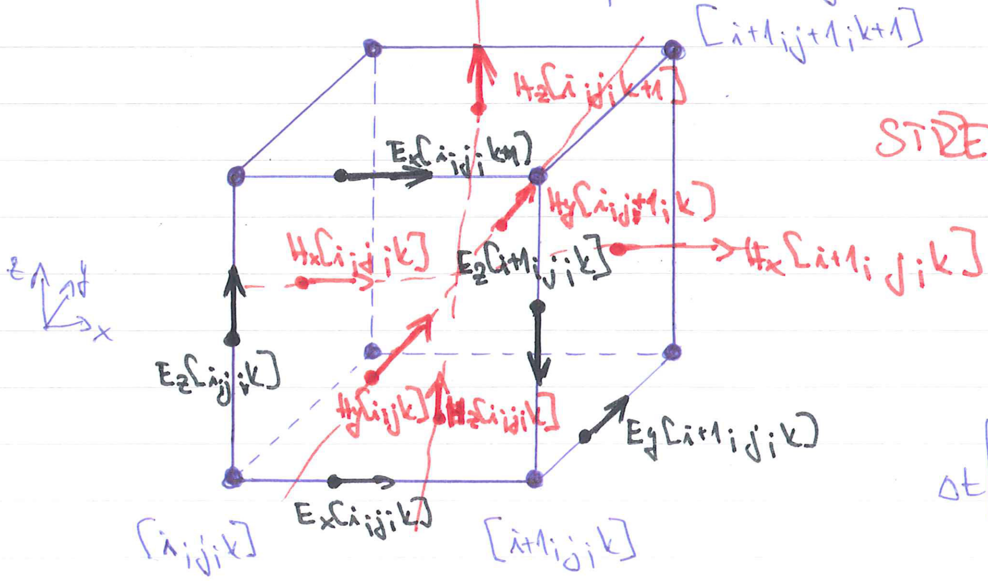


TATO SOUSTAVA MŮŽE BÝT VZHLEDEM KE SVÉ KŘÍŽOVÉ STRUKTUŘE ŘEŠENA V ČASE ITERATIVNĚ SE STŘÍDAVOU AKTUALIZACÍ E & H

V KAŽDÉM TOMTO BODĚ JSEM SCHOPEN Z PŘEDCHOZÍHO E SPOČÍTAT KOLIK JE H. A V t+2 OPAČNĚ Z H SPOČÍTÁM E ATD. V 1D TAKŽE STŘÍDÁM POČÍTÁNÍ E & H

VE 3D:

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad ; \quad \nabla \times \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$$



STŘEDY STĚN

VE FDTD

$$\Delta t \left\{ \begin{array}{l} E(t) \\ H(t+\tfrac{1}{2}) \\ E(t+1) \end{array} \right.$$

$$\varepsilon \cdot \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \nabla \times \vec{H}$$

VYBERU 1 Z KOMPONENT $\quad \varepsilon \cdot \frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z}$

$$\varepsilon \cdot \frac{E_x^{n+1}[i,j,k] - E_x^{n}[i,j,k]}{\Delta t} = \frac{H_z^{n+0.5}[i,j,k] - H^{n+0.5}[i,j-1,k]}{\Delta y} - \frac{H_y^{n+0.5}[i,j,k] - H_y^{n+0.5}[i,j,k-1]}{\Delta z}$$

VYHODNOCUJE $E_x[i,j,k]$ A POTŘEBUJI K TOMU $H_x[i,j,k]$, $H_y[i,j,k]$, $H_z[i,j-1,k]$, $H_y[i,j,k-1]$

$$\mu \frac{H_x}{\partial t} = \frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y}$$

PRO X-SOUŘADNICI

$$\mu \frac{H_x^{n+1,5}[i,j,k] - H_x^{n+0,5}[i,j,k]}{\Delta t} = \frac{E_y^{n+1}[i,j,k+1] - E_y^{n+1}[i,j,k]}{\Delta z} - \frac{E_z^{n+1}[i,\cancel{j+1},j+1,k] - E_z^{n+1}[i,j,k]}{\Delta y}$$

FDTD POUŽÍT JEN V NOUZI NEJVYŠŠÍ – JE POMALÉ, POKUD TEDY NEŘEŠÍME ZVUK TAM UŽ TO UJDE.

FOURIEROVA TRANSFORMACE

- CHCEME ZJISTIT, JAK POČÍTAT FOURIEROVKU NA NAŠICH DISKRETIZOVANÝCH ŘEŠENÍ.

1) STACIONÁRNÍ STAVY ($\dot{u} = 0 \Rightarrow \dot{u} = 0$; $\ddot{u} = 0 \ldots$)
   - NEUMOŽŇUJE NÁM VIDĚT, JAK SE DO TOHO STAVU SYSTÉM DOSTANE.

aa,

2) HARMONICKÉ ŘEŠENÍ - PŘEDPOKLÁDALI JSME, ŽE u JE VE TVARU $u(\vec{x};t) = u(\vec{x}) \cdot e^{i\omega t}$

MÁME ŘEŠENÍ V KAŽDÉM OKAMŽIKU, ALE JE TO SPECIÁLNÍ ŘEŠENÍ, KTERÉ SE V ČASE MĚNÍ PUMPOV. NAHORU A DOLŮ. POKUD BUDE LINEÁRNÍ ROVNICE PAK $u = \sum u_\omega \cdot e^{i\omega t}$

FORMÁLNĚ SE KAŽDÉ FUNKCI DÁ ZAVÉST FOURIERŮV OBRAZ

ZOBRAZUJEME Z $\mathbb{R}$ DO $\mathbb{C}$ — MUSÍ PADAT RYCHLE K NULE

$$\mathbb{R} \quad f(x) \longrightarrow F(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(2\pi i x \xi)\, dx \qquad \mathbb{C}$$

KE KOMPONENTÁM

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\xi) \exp(-2\pi i \cdot x\xi)\, d\xi$$

OD KOMPONENT

PRO NÁS JE PROMĚNNÁ x VELICE ČASTO ČAS

$x \equiv t$

A ξ JE ČASTO FREKVENCE f

$\xi \equiv f$ ... FREKVENCE $\omega = 2\pi f$ ... $\xi = \frac{\omega}{2\pi}$ (LEPŠÍ)

$$F\left(\frac{\omega}{2\pi}\right) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cdot \exp(i\omega t)\, dx \qquad \text{(SPOJITÁ FCE } \omega\text{)}$$

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) \cdot \exp(-i\omega t)\, d\omega \qquad \text{(SPOJITÁ FUNKCE } t\text{)}$$

$f(t) \to F(\omega)$

UŽ JE V KOMPLEXNÍ OBLASTI

ab

VLASTNOSTI: $F(-\omega) = F^*(\omega)$ PRO SIGNÁL $f \in \mathbb{R}$
TOHLE ZAŘIZUJE KAUZALITU.

LINEARITA:

$$a f(t) + b g(t) = a F(\omega) + b G(\omega)$$

ŠKÁLOVÁNÍ: $f(at) \to \frac{1}{|a|} F(\omega/a)$

DÁLE KDYŽ SI ZINTEGRUJEME NORMU FUNKCE f:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(t)|^2 dt = \int_{-\infty}^{\infty} |F(\omega)|^2 d\omega$$

TAK JE JEDNO NA KTERÉ STRANĚ TO DĚLÁM. MÁ TO DŮSLEDKY:

$$D = \varepsilon \cdot E$$

$$D(x) = \varepsilon(x) \cdot E(x) + \dots \quad v\ \mathbb{R}$$

$$D = \varepsilon \circ E$$

$$\downarrow FT$$

$$D(\omega) = \varepsilon(\omega) \cdot E(\omega)$$

FOURIEROVA TRANSFORMACE PERIODICKÉ FUNKCE

VYCHÁZÍ SE Z FOURIEROVA ROZVOJE, PERIODICKÁ FUNKCE

$$u(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \exp\left(-2\pi i \cdot n \frac{t}{T}\right) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \cdot \exp(-i\omega_n \cdot t)$$

$$\omega_n = \frac{2\pi \cdot n}{T} \ ; \ c_n = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} u(t) \exp(i\omega_n t)\, dt$$

$$\lim_{T \to \infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \underbrace{\left[\frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} u(t) \exp(i\omega t)\, dt\right]}_{T \to \infty \ = U(\omega_n)} \cdot \exp(-i\omega_n t)$$

$T \to \infty$ PERIODA JDE K NEKONEČNU

OJC 1

MOHU DOSADIT ZA $\frac{1}{T} = \frac{\omega_n}{2\pi n}$

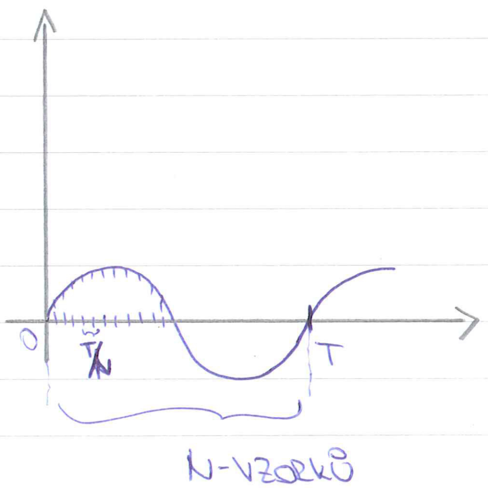
$$= \lim_{\frac{\omega_n}{n} \to 0} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\omega_n}{2\pi n} U(\omega_n) \cdot \exp(-i\omega_n t) =$$

$d\omega_n$ - MALÝ KUS FREKVENCE

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} U(\omega_n) \exp(-i\omega_n t)\, d\omega_n$$

U - JE SPOJITÁ FCE

DISKRÉTNÍ + PERIODICKÝ SIGNÁL



c_n - KOEFICIENTY PRO DISKR HOD. ω

$u(t)$ - SPOJITÁ

VLOŽÍME DO TOHO TU DISKRÉTNOST

$$u(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \exp\left(-2\pi i n \frac{t}{T}\right)$$

$$t_k = k \cdot \frac{T}{N}$$

$$u(t_k) = u[k] = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \exp\left(-2\pi i n \frac{k \cdot \cancel{T}}{\cancel{T} \cdot N}\right) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \exp\left(-2\pi i \frac{nk}{N}\right)$$

$u(t_k) = u[k]$

u VE VZORKU $\underline{k}$ $\quad$ $n \ldots 1; 2; 3 \ldots$

$k \ldots 1; 2; 3 \ldots$

N - POČET PRVKŮ (VZORKŮ) NA 1 PERIODU

V DISKRÉTNÍ FOURIEROVĚ TRANSF. JSOU V EXPONENCIÁLE V JÁDRU TRANSFORMAČNÍ ČÁSTI JSOU KONSTANTY, KTERÉ ČÍSLUJÍ VZORKY ad 5

$$c_n = \frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2} u(t)\exp(i\omega t)\,dt$$ NEZNÁM NEKONEČNĚ MNOHO u

$$c_n = \frac{1}{T}\sum_{k=0}^{N-1} u(t_k)\cdot\exp(i\omega_n t_k)\,dt_k = \frac{1}{T}\sum_{k=0}^{N-1} u[k]\cdot$$

$$\cdot\exp\left(i\,\frac{2\pi n}{T}\cdot\frac{kT}{N}\right)dk\,\frac{T}{N}$$

HODNOTA ROZDÍLU k PO SOBĚ JDOUCÍMI BODY

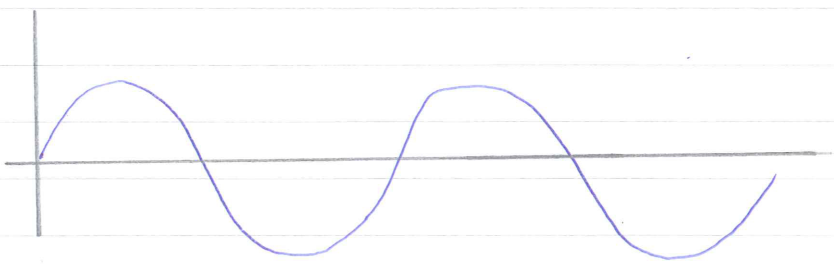
$$c_n = \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1} u[k]\exp\left(2\pi i\cdot\frac{n\cdot k}{N}\right)$$

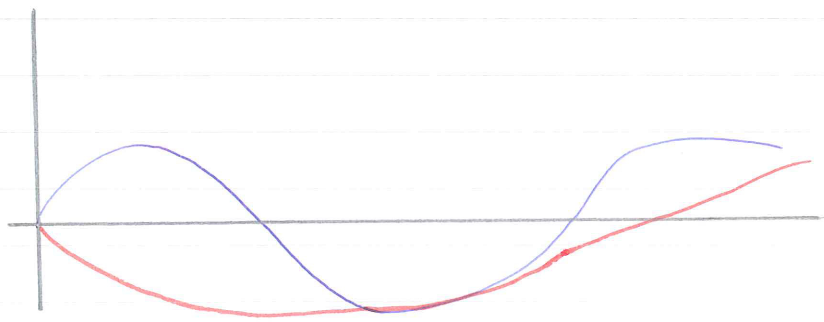
$k \to k+N$ CO SE STANE KDYŽ k OBĚHNE 1 PERIODU

$$c_n \to \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1} u[k]\exp\left(\frac{2\pi i n k}{N} + \frac{2\pi i n N}{N}\right) = c_n$$

JAKMILE OBEJDU 1 PERIODU KOEF c_n SE MI ZAČNOU OPAKOVAT

$$\left.\begin{aligned} c[n] &= \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1} u[k]\exp\left(2\pi i\frac{nk}{N}\right) \\ u[k] &= \sum_{n=0}^{N-1} c[n]\exp\left(-2\pi i\frac{nk}{N}\right)\end{aligned}\right\}$$ DISKRÉTNÍ FOUR. TRANSFORM.





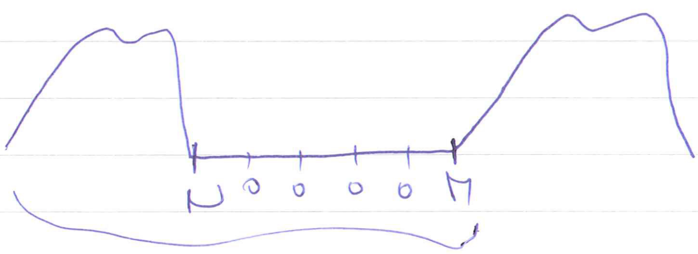
KDYŽ VZORKUJEME DOSTATEČNĚ HUSTĚ, TAK VIDÍME TU SINUSOVKU.

a e)

KDYŽ BUDEME VZORKOVAT ŘÍDCE BUDE TAM ALIASING
DŮSLEDEK DISKRETIZOVANÝCH HODNOT MATEMATICKÉ
POTVRZENÍ NYQUISTŮV TEORÉM - KDYŽ MÁME VZORKOVACÍ
FREKVENCI f (f VZORKŮ ZA 1 SEKUNDU) TAK MAXIMÁLNÍ
FREKVENCE SIGNÁLU, KTERÝ JEŠTĚ ZOBRAZÍME DOBŘE
JE $f/2$.

DISKRÉTNÍ FOURIEROVKA MÁ NĚKTERÉ PŘÍJEMNÉ
VLASTNOSTI, KTERÉ SOUVISÍ S ROZLIŠENÍM SPEKTRA

$u[k]$ _ $k=0 \,..\, N-1$



MŮŽEME DOPLNIT VZORKOVÁNÍ O NULY!

$u[k]$ _ $k=0 \,..\, M$

STEJNÉ SPEKTRUM DOSTANETE Z MODIF. SIGNÁLU I Z
NEMODIFIK. OBRÁZEK $\boxed{20\times 20}$ A ROZŠÍŘENÝ NA $\boxed{100\times 100}$

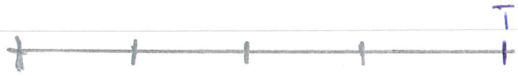
O NULY OBA MAJÍ STEJNOU FOUR. TRANSF.

DFT → FFT

ROZDÍL FFT .. 2^n VZORKŮ, TENHLE PŘECHOD JE ČISTĚ KVŮLI
ZRYCHLENÍ VÝPOČTU. DFT MÁ OBTÍŽNOST N^2 A FFT $N \cdot \log N$
ČÍM VÍC VZORKŮ TÍM ÚČINNĚJŠÍ.

a f1

PŘÍKLAD: 4 VZORKY NA PERIODU



$u[0]$ $u[1]$ $u[2]$ $u[3]$ $\quad N=4$

MŮŽEME TAKOVÉ SPEKTRUM DOPLNIT NULAMI VŽDYCKY, ZAJÍMAJÍ NÁS OPĚT KOEFICIENTY $c[0]; c[1]; c[2]; c[3]$;

$$c[0] = \frac{1}{N}\left(u[0]\cdot e^{2\pi i \frac{0\cdot 0}{4}} + u[1]\cdot e^{2\pi i \frac{0\cdot 1}{4}} + u[2]\, e^{2\pi i \frac{0\cdot 2}{4}} + u[3]\cdot e^{2\pi i \frac{0\cdot 3}{4}}\right)$$

$$c[0] = \frac{1}{N}\Big(\underbrace{u[0] + u[1] + u[2] + u[3]}_{\text{SUMA VŠECH VZORKŮ BEZ SIGNÁLU}}\Big)$$

$$c[1] = \frac{1}{N}\Big(u[0]\cdot e^{2\pi i \frac{1\cdot 0}{4}} + u[1]\cdot e^{\underbrace{2\pi i \frac{1\cdot 1}{4}}_{\pi/2}} + u[2]\cdot e^{\underbrace{2\pi i \frac{1\cdot 2}{4}}_{\pi}} + u[3]\cdot e^{\underbrace{2\pi i \frac{1\cdot 3}{4}}_{3/2\,\pi}}\Big)$$

$$c[1] = \frac{1}{N}\left(u[0] + i\cdot u[1] - u[2] - i\,u[3]\right)$$

$$c[2] = \frac{1}{N}\Big(u[0]\cdot e^{2\pi i \frac{2\cdot 0}{4}} + u[1]\cdot e^{\underbrace{2\pi i \frac{2\cdot 1}{4}}_{\pi}} + u[2]\cdot e^{\underbrace{2\pi i \frac{2\cdot 2}{4}}_{2\pi}} + u[3]\, e^{\underbrace{2\pi i \frac{2\cdot 3}{4}}_{3\pi}}\Big)$$

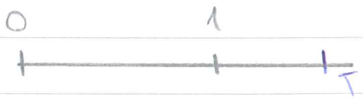
$$c[2] = \frac{1}{N}\left(u[0] - u[1] + u[2] - u[3]\right)$$

$$c[3] = 1/N\Big(u[0]\cdot e^{2\pi i \frac{3\cdot 0}{4}} + u[1]\cdot e^{\underbrace{2\pi i \frac{3\cdot 1}{4}}_{3/2\,\pi}} + u[2]\cdot e^{\underbrace{2\pi i \frac{3\cdot 2}{4}}_{3\pi}} + u[3]\cdot e^{\overbrace{2\pi i \frac{3\cdot 3}{4}}^{9/2\,\pi}}\Big)$$

$$c[3] = 1/N\left(u[0] - i\,u[1] - u[2] + i\,u[3]\right) \qquad u\in\mathbb{R} \Rightarrow c_{-u} = c_u^*$$

ag1

JAK BY DOPADLO FREKV. SPEKTRUM, KTERÉ BY SE DĚLALO ZE **2** VZORKŮ NA PERIODU.



$w[0]$ $\quad$ $w[1]$ ⟵ KOMPONENTY

$c[0]$ $\quad$ $c[1]$

$$c[0] = (w[0] + w[1]) \cdot 1/2$$ OPĚT SUMA KOMPONENT

$$c[1] = 1/2\,(w[0] \cdot e^{\underbrace{2\pi i \frac{1\cdot 0}{2}}_{0}} + w[1]\, e^{\underbrace{2\pi i \frac{1\cdot 1}{4}}_{\pi}})$$

$$c[1] = 1/2\,(w[0] - w[1])$$

LZE TOHLE NĚJAK VYUŽÍT VE 4 KOMPONENTNÍ FOURIEROVCE?

$$c[0] = (w[0]+w[1]+w[2]+w[3]) \cdot 1/4 = (w[0]+w[2]+w[1]+w[3])\,1/4$$

$$c[1] = (w[0]-w[2] + i(w[1]-w[3])) \cdot 1/4$$

$$c[2] = (w[0]-w[1]+w[2]-w[3])\,1/4 = 1/4\,(w[0]+w[2] + \\ +(w[1]+w[3]))$$

$$c[3] = (w[0]-w[2] - i(w[1]-w[3])) \cdot 1/4$$

	00	01	10	11
PŘEDTÍM	0	1	2	3
POTOM	0	2	1	3
	00	10	01	11

DÁ SE PŘEJÍT Z 4 KOMPONENT NA 2, PRÁVĚ TADY VZNIKÁ TA OBTÍŽNOST $\log n$. NA KONCI SE PAK POČÍTAJÍ JEN 2D SPEKTRA. RYCHLÁ BITOVÁ FFT.

ah

2 VZORKY
$$U_0 = u_0 + u_1$$
$$U_1 = u_0 - u_1$$

4 VZORKY
$$U_0 = u_0 + u_1 + u_2 + u_3 = u_0 + u_2 + (u_1 + u_3)$$
$$U_1 = u_0 + i u_1 - u_2 - i u_3 = u_0 - u_2 + i(u_1 - u_3)$$
$$U_2 = u_0 - u_1 + u_2 - u_3 = u_0 + u_2 - (u_1 + u_3)$$
$$U_3 = u_0 - i u_1 - u_2 + i u_3 = u_0 - u_2 - i(u_1 - u_3)$$

8 VZORKŮ ...

2^3 VZORKŮ

2^0				1					1 VZOREK
2^1		1			-1				
2^2	1	i	-1	-i					
2^3	1	$\frac{1+i}{\sqrt{2}}$	i	$\frac{-1+i}{\sqrt{2}}$	-1	$\frac{-1-i}{\sqrt{2}}$	$-i$	$\frac{1-i}{\sqrt{2}}$	

8 VZORKŮ

0	1	2	3	4	5	6	7
000	001	010	011	100	101	110	111

BITOVÁ REVERZE

000	100	010	110	001	101	011	111
0	4	2	6	1	5	3	7

TOHLE 4-SPEKTRUM BUDEME CHTÍT PŘEVÉST NA DVA SPEKTRUM.

4 SPEKT

2 SPEKT

A $u_0 + u_4 + (u_2 + u_6)$ E –

B $u_0 - u_4 + i(u_0 - u_6)$ F –

C $u_0 + u_4 - (u \;\; + u_6)$ G –

D $u_0 - u_4 - i(u_0 - u_6)$ H –

A + 1E

B + $\frac{1+i}{\sqrt{2}} \cdot F$

C − 1 · G

D − $\frac{1+i}{\sqrt{2}} \cdot H$

2x