Metody numeryczne

Równania różniczkowe cząstkowe, część II

Janusz Szwabiński

szwabin@ift.uni.wroc.pl

Paraboliczne równania różniczkowe cząstkowe

1. Rozwiązanie analityczne
2. Naiwna dyskretyzacja
3. Analiza stabilności
4. Metody niejawne
5. Kilka słów o równaniu Schrödingera

Zagadnienie modelowe

Przepływ ciepła w ośrodku jednorodnym bez źródeł

$$U_t = U_{xx}, \quad t > 0,\ 0 < x < 1$$

$$U(0,t) = U(1,t) = 0, \quad t > 0$$

$$U(x,0) = U_0(x), \quad 0 < x < 1$$

Rozwiązanie analityczne

Postulujemy rozwiązanie postaci

$$U(x,t) = f(x)g(t) \ \Rightarrow \frac{f_{xx}}{f} = \frac{g_t}{g} = -k^2$$

Otrzymujemy dwa równania

$$\begin{aligned} f_{xx} &= -k^2 f \\ g_t &= -k^2 g \end{aligned}$$

których rozwiązania są postaci

$$\begin{aligned} f(x) &= A\cos kx + B\sin kx \\ g(t) &= Ce^{-k^2 t} \end{aligned}$$

A, B, C – pewne stałe

$$U(x,t) = De^{-k^2 t}\sin kx, \quad D = BC$$

Z warunków brzegowych mamy

$$U(1,t) = 0 \;\; \Rightarrow \;\; k = m\pi, \;\; m \in \mathcal{Z}$$

czyli

$$U(x,t) = De^{-(m\pi)^2 t}\sin m\pi x$$

Całka ogólna

$$U(x,t) = \sum_{m=1}^{\infty} a_m e^{-(m\pi)^2 t}\sin m\pi x$$

Warunek początkowy

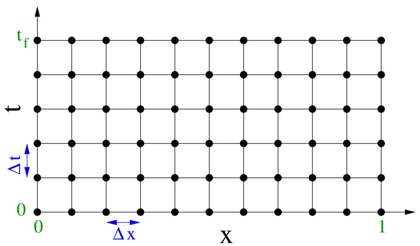
$$U(x,0) = U_0(x) = \sum_{m=1}^{\infty} a_m \sin m\pi x$$

prowadzi do

$$a_m = 2\int_0^1 \mathrm{d}x U_0(x)\sin m\pi x$$

„Naiwna” dyskretyzacja

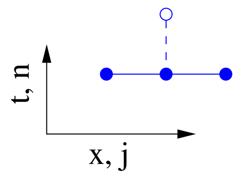
$$x_j = j\Delta x, \qquad j = 0, \ldots, J$$
$$t_n = n\Delta t, \qquad n = 0, 1, \ldots$$



$$U(x,t) \;\rightarrow\; U_j^n \equiv U(x_j, t_n)$$

Schemat FTCS (ang. *forward time centered space*)

$$U_t = U_{xx} \;\rightarrow\; \frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} = \frac{U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n}{\Delta x^2}$$

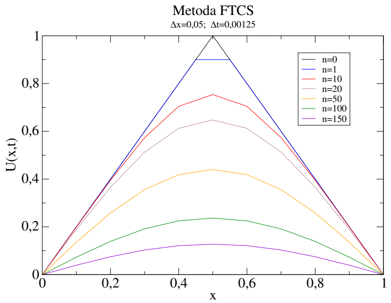


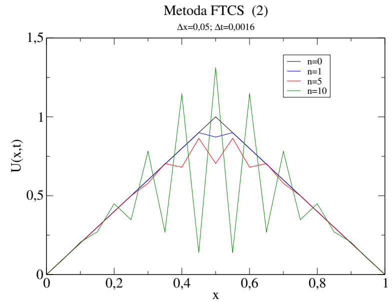
Stąd

$$U_j^{n+1} = U_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2}\left(U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n\right), \quad n = 0, 1, \ldots$$

Przykład

$$U(x,0)=\begin{cases}2x, & x\le \frac{1}{2}\\ 2-2x, & x>\frac{1}{2}\end{cases}$$





$\Rightarrow$ niefizyczne oscylacje w rozwiązaniu

$\Rightarrow$ metoda nie zawsze stabilna

Dlaczego schemat FTCS bywa niestabilny?

Niech

$$(HU)_j=\frac{U^n_{j+1}-2U^n_j+U^n_j-1}{(\Delta x)^2}$$

Wówczas

$$U^{n+1}=(1-H\Delta t)U^n$$

Niech

ψ_λ - stan własny operatora H

ϵ_λ - wartość własna

H jest hermitowski

$\Rightarrow$ wartości własne są rzeczywiste

$\Rightarrow$ stany własne są ortogonalne

Wybierzmy stany własne tak, aby były ortonormalne. Mamy

$$U^n=\sum_\lambda U^n_\lambda \psi_\lambda$$

Dokładna ewolucja w czasie rozwiązania U^n dana jest wzorem

$$U^n=e^{-nH\Delta t}U^0$$

zatem

$$U^n_\lambda=e^{-n\epsilon_\lambda\Delta t}U^0_\lambda$$

$\Rightarrow$ składowe o małych długościach fali tłumione dużo szybciej z upływem czasu od pozostałych

Ewolucja w ramach FTCS

$$U_\lambda^n = (1-\epsilon_\lambda \Delta t)^n U_\lambda^0$$

$\Rightarrow$ dla wystarczająco małych Δt dobre przybliżenie zachowania rzeczywistego

$\Rightarrow$ dla za dużych Δt może nastąpić wzmocnienie pewnych składowych $\rightarrow$ oscylacje

Błąd obcięcia

Błąd obcięcia dla równania

$$\frac{U_j^{n+1}-U_j^n}{\Delta t} = \frac{U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n}{\Delta x^2}$$

definiujemy jako

$$T(x,t) \equiv \frac{\Delta_{+t}U(x,t)}{\Delta t} - \frac{\delta_x^2 U(x,t)}{\Delta x^2},$$

gdzie

$$\begin{aligned} \Delta_{+t} g(t) &= g(t+\Delta t) - g(t), \\ \delta_x^2 f(x) &= f(x+\Delta x) - 2f(x) + f(x-\Delta x) \end{aligned}$$

a $U(x,t)$ to rozwiązanie dokładne

Własności różnic skończonych

$$\begin{aligned} \frac{\Delta_{+x}f(x)}{\Delta x} &= f'(x) + \frac{1}{2}\Delta x f''(x) + O(\Delta x^2) \\ \frac{\delta_x^2 f(x)}{\Delta x^2} &= f''(x) + \frac{1}{12}\Delta x^2 f^{(4)}(x) + O(\Delta x^4) \end{aligned}$$

Stąd

$$T(x,t) = U_t + \frac{1}{2}\Delta t U_{tt} - U_{xx} - \frac{1}{12}\Delta x^2 U_{xxxx} + O(\Delta t^2) + O(\Delta x^4)$$

Ponadto

$$U_t - U_{xx} = 0 \ \Rightarrow T(x,t) = \frac{1}{2}\Delta t U_{tt} - \frac{1}{12}\Delta x^2 U_{xxxx} O(\Delta t^2) + O(\Delta x^4)$$

$\Rightarrow$ FTCS jest liniowy w czasie i drugiego rzędu w położeniu

Jeśli istnieją stałe skończone M_t i M_x takie, że

$$|U_{tt}| \leq M_t, \ \ |U_{xxxx}| \leq M_x,$$

to

$$|T(x,t)| \leq \frac{1}{2}M_t \Delta t + \frac{1}{12}M_x \Delta x^2$$

Z ostatniej nierówności wynika natychmiast, że

$$\lim_{\Delta t, \Delta x \to 0} T(x,t) = 0$$

dla każdego $(x,t) \in (0,1) \times (0,t_f)$

$\Rightarrow$ FTCS jest schematem bezwarunkowo zgodnym

Analiza stabilności von Neumanna

Definicja Schemat numeryczny będziemy nazywali stabilnym, jeśli amplituda składowej Fouriera rozwiązania, która jest skończona w chwili początkowej $t = 0$, pozostaje skończona dla wszystkich kroków czasowych n

Rozważmy pojedynczą składową Fouriera,

$$U_j^n = Ce^{ik(j\Delta x)}$$

Mamy

$$\begin{aligned} U_j^{n+1} &= Ce^{ikj\Delta x} + \gamma\left[Ce^{ik(j+1)\Delta x} - 2Ce^{ikj\Delta x} + Ce^{ik(j-1)\Delta x}\right] \\ &= (1-2\gamma)Ce^{ikj\Delta x} + \gamma Ce^{ikj\Delta x}\left[e^{ik\Delta x} + e^{-ik\Delta x}\right] \\ &= Ce^{ikj\Delta x}\left[1 - 2\gamma + 2\gamma\cos k\Delta x\right] \\ &= U_j^n(1 - 4\gamma\sin^2\frac{k\Delta x}{2}) \end{aligned}$$

Stąd

$$U_j^{n+1} = \lambda(k)U_j^n,$$

gdzie

$$\lambda(k) = 1 - 4\gamma\sin^2\frac{k\Delta x}{2}$$

to tzw. współczynnik wzmocnienia

Aby schemat był stabilny, musi być

$$|\lambda(k)| \le 1 \quad \Rightarrow \quad |1 - 4\gamma\sin^2\frac{k\Delta x}{2}| \le 1$$

Warunek ten musi być spełniony dla każdego k, zatem

$$|1 - 4\gamma| \le 1$$

Warunek stabilności

$$\Delta t \le \frac{1}{2}\Delta x^2$$

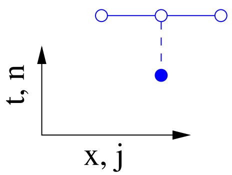
Interpretacja fizyczna

- maksymalny krok Δt_m jest czasem dyfuzji związanym z odległością Δx
- inaczej, jest to czas, w którym informacja przebywa drogę Δx
- $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ to prędkość rozchodzenia się informacji po siatce

Metody niejawne

Rozważmy schemat różnicowy

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} = \frac{U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2}$$



$\Rightarrow$ w każdym kroku czasowym musimy rozwiązać układ równań liniowych ze względu na U_j^{n+1}, $j = 1, \ldots, J$

$$-\gamma U_{j-1}^{n+1} + (1+2\gamma)U_j^{n+1} - \gamma U_{j+1}^{n+1} = U_j^n, \quad j = 1, 2, \ldots, J-1$$

$$\gamma = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$$

Dzieląc obustronnie przez γ i przechodząc do granicy $\gamma \to \infty$ otrzymamy

$$U_{j-1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j+1}^{n+1} = 0, \quad j = 1, 2, \ldots, J-1,$$

czyli

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = 0$$

$\Rightarrow$ poprawne zachowanie fizyczne dla bardzo dużych kroków czasowych

Współczynnik wzmocnienia

$$\lambda(k) = \frac{1}{1 + 4\gamma \sin^2 \frac{k\Delta x}{2}}$$

$\Rightarrow$ dla dowolnych Δt mamy $|\lambda(k)| \leq 1$

$\Rightarrow$ schemat bezwarunkowo stabilny!

Rozważmy układ równań

$$-\gamma U_{j-1}^{n+1} + (1+2\gamma)U_j^{n+1} - \gamma U_{j+1}^{n+1} = U_j^n, \quad j = 1, 2, \ldots, J-1$$

Niech

$$U_{j+1}^{n+1} = \alpha_j U_j^{n+1} + \beta_j$$

α_j i β_j –pewne współczynniki

Po podstawieniu otrzymujemy

$$-\gamma U_{j-1}^{n+1} + (1+2\gamma)U_j^{n+1} - \gamma\alpha_j U_j^{n+1} - \gamma\beta_j = U_j^n$$

czyli

$$U_j^{n+1} = \frac{\gamma}{1 + (2-\alpha_j)\gamma} U_{j-1}^{n+1} + \frac{U_j^n + \gamma\beta_j}{1 + (2-\alpha_j)\gamma}$$

Stąd

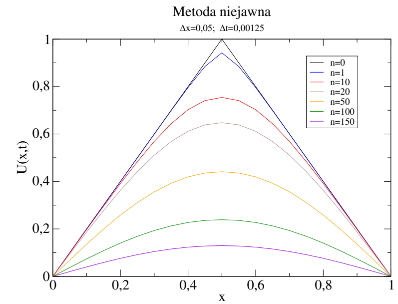
$$\alpha_{j-1} = \frac{\gamma}{1+(2-\alpha_j)\gamma}$$

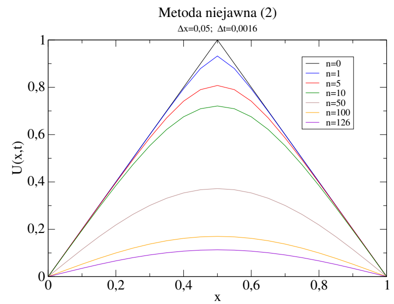
$$\beta_{j-1} = \frac{U_j^n + \gamma\beta_j}{1+(2-\alpha_j)\gamma}$$

Wartości początkowe

$$\alpha_{J-1} = 0, \;\; \beta_{J-1} = U_J^{n+1}$$

Przykład

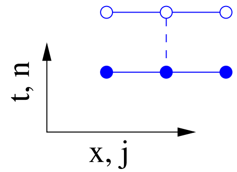




Metoda Cranka–Nicholsona

Utwórzmy średnią z metody jawnej i niejawnej

$$\frac{U_j^{n+1}-U_j^n}{\Delta t} = \frac{1}{2}\frac{\left(U_{j+1}^{n+1}-2U_j^{n+1}+U_{j-1}^{n+1}\right)+\left(U_{j+1}^n-2U_j^n+U_{j-1}^n\right)}{\Delta x^2}$$



$\Rightarrow$ metoda drugiego rzędu w Δt

Współczynnik wzmocnienia

$$\lambda(k) = \frac{1 - 2\gamma \sin^2 \frac{k\Delta x}{2}}{1 + 2\gamma \sin^2 \frac{k\Delta x}{2}}$$

$\Rightarrow$ dla dowolnych Δt mamy $|\lambda(k)| \leq 1$

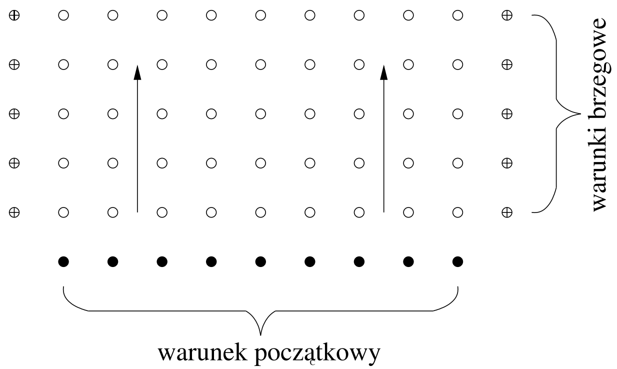
$\Rightarrow$ schemat bezwarunkowo stabilny!

Kilka słów o równaniu Schrödingera

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = H\psi$$

$$(\hbar = 1,\ m = \tfrac{1}{2})$$

$\Rightarrow$ równanie paraboliczne



Warunek brzegowy

$$\lim_{|x|\to\infty} \psi(x) = 0$$

Formalne rozwiązanie

$$\psi(x,t) = e^{-iHt}\psi(x,0)$$

FTCS

$$\psi_j^{n+1} = (1 - iH\Delta t)\psi_j^n$$

Schemat niejawny

$$\psi_j^{n+1} = (1 - iH\Delta t)^{-1}\psi_j^n$$

$\Rightarrow$ metoda FTCS jest całkowicie niestabilna

$\Rightarrow$ metoda niejawna jest bezwarunkowo stabilna, ale nie jest unitarna!

Wzór Cayley'a

$$e^{-iHt} \simeq \frac{1 - \frac{1}{2}iH\Delta t}{1 + \frac{1}{2}iH\Delta t}$$

Stąd

$$(1 + \frac{1}{2}iH\Delta t)\psi_j^{n+1} = (1 - \frac{1}{2}iH\Delta t)\psi_j^n$$

- metoda stabilna
- unitarna
- drugiego rzędu w czasie i przestrzeni