Metody numeryczne II

Równania różniczkowe cząstkowe, część III

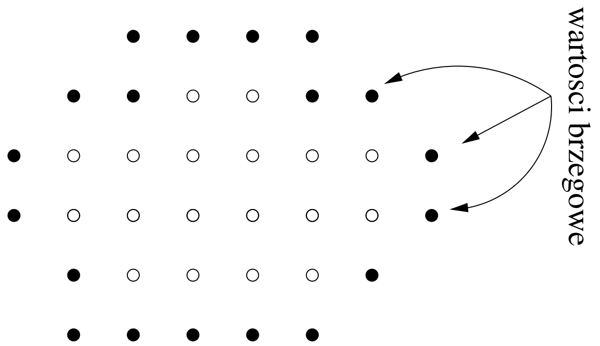
Janusz Szwabiński

szwabin@ift.uni.wroc.pl

Eliptyczne równania różniczkowe cząstkowe

1. Związek z równaniami parabolicznymi
2. Zagadnienie modelowe
3. Schematy różnicowe
4. Błąd obcięcia

Dobrze postawione zagadnienie eliptyczne



Przykłady równań eliptycznych

- równanie Laplace'a

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

- równanie Poissona

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

Związek z równaniami parabolicznymi

Rozważmy równanie

$$c_x \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + c_y \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \left(\frac{\partial c_x}{\partial x} + b_x\right)\frac{\partial U}{\partial x} + \left(\frac{\partial c_y}{\partial y} + b_y\right)\frac{\partial U}{\partial y} + aU = f$$

Potraktujmy zmienną y jako czas Niech

$$\begin{aligned} U_1 &= U \\ U_2 &= \frac{\partial U_1}{\partial y} \end{aligned}$$

Otrzymujemy układ dwóch liniowych, parabolicznych równań różniczkowych cząstkowych

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_2}{\partial y} &= \frac{1}{c_y}\left[1 - c_x \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - \left(\frac{\partial c_x}{\partial x} + b_x\right)\frac{\partial U_1}{\partial x} - \left(\frac{\partial c_y}{\partial y} + b_y\right) U_2 - aU_1\right] \\ \frac{\partial U_1}{\partial y} &= U_2 \end{aligned}$$

Dlaczego nie używamy tej metody ?

- metoda ta nie zadziała w obszarze, w którym znika c_y
- transformacja do PPDE zmienia charakter jednej zmiennej
- brak warunku początkowego dla U_2

Rozważmy dowolne zagadnienie paraboliczne, np.

$$U_t = U_{xx} + U_{yy} + f(x, y)$$

Zbieżne rozwiązanie dąży w granicy $t \to \infty$ do rozwiązania zagadnienia eliptycznego

$$0 = U_{xx} + U_{yy} + f(x, y)$$

Zagadnienie modelowe

Równanie Poissona

$$U_{xx} + U_{yy} = \rho(x, y), \quad (x, y) \in \Omega$$

z warunkiem brzegowym Dirichleta

$$U = 0, \quad (x, y) \in \partial\Omega$$

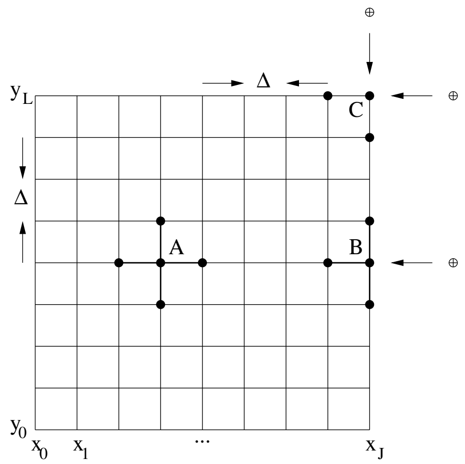
$$\Omega = (x_0, x_{max}) \times (y_0, y_{max})$$

Dyskretyzacja

$$U(x,y) \to U_{jl} \equiv U(x_j, y_l)$$

$$\begin{aligned} x_j &= x_0 + j\Delta, \;\; j = 0, 1, \ldots, J \\ y_l &= y_0 + l\Delta, \;\; l = 0, 1, \ldots, L \end{aligned}$$

Δ - krok na siatce (taki sam w obu kierunkach)



Stosując wzór trójpunktowy dla drugiej pochodnej, otrzymujemy

$$\frac{U_{j+1,l} - 2U_{j,l} + U_{j-1,l}}{\Delta^2} + \frac{U_{j,l+1} - 2U_{j,l} + U_{j,l-1}}{\Delta^2} = \rho_{j,l}$$

lub równoważnie

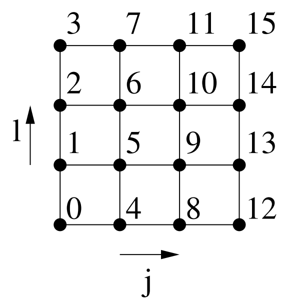
$$U_{j+1,j} + U_{j-1,l} + U_{j,l+1} + U_{j,l-1} - 4U_{j,l} = \Delta^2 \rho_{j,l}$$

$\Rightarrow$ rozwiązanie EPDE sprowadza się do rozwiązania układu równań liniowych ze względu na $U_{j,l}$

Niech

$$i \equiv j(L+1) + l, \;\; j = 0, \ldots, J, \;\; l = 0, \ldots, L$$

Możemy teraz ponumerować węzły siatki pojedynczym indeksem



Po wprowadzeniu indeksu i mamy

$$U_{j,l} \rightarrow U_i$$

oraz

$$U_{i+L+1} + U_{i-(L+1)} + U_{i+1} + U_{i-1} - 4U_i = \Delta^2 \rho_i$$

$$j = 1, 2, \ldots, J-1, \;\; l = 1, 2, \ldots, L-1$$

Punkty brzegowe

$$\begin{aligned} j &= 0, && \text{tzn. } i = 0, \ldots, L \\ j &= J, && \text{tzn. } i = J(L+1), \ldots, J(L+1)+L \\ l &= 0, && \text{tzn. } i = 0, L+1, \ldots, J(L+1) \\ l &= L, && \text{tzn. } i = L, L+1+L, \ldots, J(L+1)+L \end{aligned}$$

Mamy do rozwiązania równanie

$$\mathbf{A}\vec{U} = \vec{b}$$

gdzie

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{I} & & & \\ \mathbf{I} & \mathbf{A}_2 & \mathbf{I} & & \\ & \mathbf{I} & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \mathbf{I} \\ & & & \mathbf{I} & \mathbf{A}_{LJ} \end{pmatrix}, \;\; \mathbf{A}_i = \begin{pmatrix} -4 & 1 & & & \\ 1 & -4 & 1 & & \\ & 1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & 1 & -4 \end{pmatrix}$$

$$i = 1, \ldots, LJ$$

oraz

$$\vec{b} = \Delta^2 \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \\ \vdots \\ \rho_{LJ} \end{pmatrix}$$

Dostępne metody numeryczne

- bezpośrednie metody macierzowe
- metody „szybkie”
- metody relaksacji

Bezpośrednie metody macierzowe

Metody łatwe w implementacji, ale ...

- bardzo duża ilość równań w praktycznych problemach
- ich przydatność zależy od struktury macierzy $\mathbf{A}$

Metody „szybkie”

- metoda Fouriera
- redukcja cykliczna
- FACR

Znajdują zastosowanie w zagadnieniach, w których

- współrzędne dają się rozseparować
- warunki brzegowe zadane są wzdłuż linii przebiegających wzdłuż osi współrzędnych

Metoda Fouriera

- stosujemy, gdy PDE ma współczynniki stałe w przestrzeni

Rozważmy najpierw cykliczne warunki brzegowe

$$U_{jl} = U_{j+J,l} = U_{j,l+L}$$

Dyskretna transformata Fouriera

$$U_{jl} = \frac{1}{JL} \sum_{m=0}^{J-1} \sum_{n=0}^{L-1} \hat{U}_{mn} e^{-2\pi i jm/J} e^{-2\pi i ln/L}$$

$$\rho_{jl} = \frac{1}{JL} \sum_{m=0}^{J-1} \sum_{n=0}^{L-1} \hat{\rho}_{mn} e^{-2\pi i jm/J} e^{-2\pi i ln/L}$$

Podstawiając do równania

$$U_{j+1,j} + U_{j-1,l} + U_{j,l+1} + U_{j,l-1} - 4U_{j,l} = \Delta^2 \rho_{j,l}$$

otrzymamy

$$\hat{U}_{mn}\left(e^{2\pi i m/J} + e^{-2\pi i m/J} + e^{2\pi i n/L} + e^{-2\pi i nl/L} - 4\right) = \hat{\rho}_{mn}\Delta^2$$

czyli

$$\hat{U}_{mn} = \frac{\hat{\rho}_{mn}\Delta^2}{2\left(\cos\frac{2\pi m}{J} + \cos\frac{2\pi n}{L} - 2\right)}$$

Strategia rozwiązania

- oblicz $\hat{\rho}_{mn}$ (najlepiej stosując FFT)

$$\hat{\rho}_{mn} = \sum_{m=0}^{J-1}\sum_{n=0}^{L-1} \rho_{jl} e^{2\pi imj/J} e^{2\pi inl/L}$$

- oblicz $\hat{U}_{mn}$
- oblicz odwrotną transformatę Fouriera ρ_{jl}

Rozważmy teraz warunki brzegowe Dirichleta

$$U = 0, \quad (x, y) \in \partial\Omega$$

Używamy następującego rozwinięcia

$$U_{jl} = \frac{2}{J}\frac{2}{L}\sum_{m=1}^{J-1}\sum_{n=1}^{L-1} \hat{U}_{mn} \sin\frac{\pi jm}{J} \sin\frac{\pi ln}{L}$$

(spełnia ono warunki brzegowe dla $j = 0, J$ i $l = 0, L$)

Podobnie

$$\rho_{jl} = \frac{2}{J}\frac{2}{L}\sum_{m=1}^{J-1}\sum_{n=1}^{L-1} \hat{\rho}_{mn} \sin\frac{\pi jm}{J} \sin\frac{\pi ln}{L}$$

Otrzymujemy ponownie

$$\hat{U}_{mn} = \frac{\hat{\rho}_{mn}\Delta^2}{2\left(\cos\frac{2\pi m}{J} + \cos\frac{2\pi n}{L} - 2\right)}$$

Metody relaksacji

- wykorzystujemy strukturę macierzy rzadkiej $\mathbf{A}$

Niech

$$\mathbf{A} = \mathbf{E} - \mathbf{F}$$

$\mathbf{E}$ - macierz, którą łatwo odwrócić

$\mathbf{F}$ - reszta

Podstawiając do równania

$$\mathbf{A}\vec{U} = \vec{b}$$

otrzymamy

$$\mathbf{E}\vec{U} = \mathbf{F}\vec{U} + \vec{b}$$

Strategia

- zgadujemy funkcję startową $\vec{U}^0$
- poprawiamy ją iteracyjnie według wzoru

$$\mathbf{E}\vec{U}^{(r)} = \mathbf{F}\vec{U}^{(r-1)} + \vec{b}$$

aż do osiągnięcia zbieżności

Własności

- metoda stosunkowo szybka, o ile tylko łatwo jest policzyć $\mathbf{E}^{-1}$

Inne spojrzenie

Mamy do rozwiązania równanie eliptyczne

$$\mathcal{L}U = \rho$$

gdzie $\mathcal{L}$ to eliptyczny operator różniczkowy. Rozważmy pomocnicze równanie dyfuzji

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \mathcal{L}U - \rho$$

z warunkiem początkowym U^0

$t \to \infty$

$\Rightarrow$ rozkład U^0 relaksuje do rozwiązania równowagowego

Zagadnienie modelowe

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} - \rho$$

FTCS

$$U_{j,l}^{n+1} = U_{j,l}^n + \frac{\Delta t}{\Delta^2}\left(U_{j+1,j}^n + U_{j-1,l}^n + U_{j,l+1}^n + U_{j,l-1}^n - 4U_{j,l}^n\right) - \rho_{j,l}\Delta t$$

Warunek stabilności FTCS (w 2D)

$$\frac{\Delta t}{\Delta^2} \leq \frac{1}{4}$$

Biorąc największy możliwy krok czasowy, otrzymamy

$$U_{j,l}^{n+1} = \frac{1}{4}\left(U_{j+1,l}^n + U_{j-1,l}^n + U_{j,l+1}^n + U_{j,l-1}^n\right) - \frac{\Delta^2}{4}\rho_{j,l}$$

Obliczenia kontunuujemy do osiągnięcia zbieżności!

Inne sposoby dyskretyzacji

Przykład Rozważmy jednowymiarowe równanie Poissona

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\epsilon(x)\frac{\mathrm{d}U(x)}{\mathrm{d}x} = \rho(x), \quad x \in \langle 0, 1\rangle$$

z warunkiem brzegowym Dirichleta

$$U(0) = U(1) = 0$$

Budujemy funkcjonał

$$F = \int_0^1 \mathrm{d}x \left\{ \frac{1}{2}\epsilon(x)\left[\frac{\mathrm{d}U(x)}{\mathrm{d}x}\right]^2 + \rho(x)U(x) \right\}$$

Obliczmy wariację funkcjonału

$$\delta F = \int_0^1 \mathrm{d}x \left\{ \epsilon(x)\frac{\mathrm{d}U(x)}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \rho(x) \right\} \delta U = 0$$

Całkujemy pierwszy wyraz przez części

$$\delta F = \int_0^1 \mathrm{d}x \left\{ -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\epsilon(x)\frac{\mathrm{d}U(x)}{\mathrm{d}x}\right) + \rho(x) \right\} \delta U = 0$$

Powyższe równanie ma być spełnione dla wszystkich δU, więc

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\epsilon(x)\frac{\mathrm{d}U(x)}{\mathrm{d}x}\right) + \rho(x) = 0$$

$\Rightarrow$ otrzymaliśmy wyjściowe równanie różniczkowe

$$F = \int_0^1 \mathrm{d}x \left\{ \frac{1}{2}\epsilon(x)\left[\frac{\mathrm{d}U(x)}{\mathrm{d}x}\right]^2 + \rho(x)U(x) \right\}$$

Stosując wzór trójpunktowy do pochodnej pierwszego rzędu oraz wzór trapezów do zamiany całki na sumę, otrzymamy

$$F \simeq \frac{1}{2\Delta}\sum_k \epsilon_{k-\frac{1}{2}}(U_k - U_{k-1})^2 + \sum_k \rho_k U_k$$

Traktujemy każdą zmienną U_k jako zmienną niezależną

$$\frac{\delta F}{\delta U} = 0 \rightarrow \frac{\partial F}{\partial U_k} = 0$$

Otrzymujemy równanie

$$(\epsilon_{k+\frac{1}{2}} + \epsilon_{k-\frac{1}{2}})U_k - \epsilon_{k+\frac{1}{2}}U_{k+1} - \epsilon_{k-\frac{1}{2}}U_{k-1} = \Delta^2\rho_k$$

Obszar zastosowań

- geometria układu nie daje się łatwo opisać w kartezjańskim układzie współrzędnych
- współczynniki równania nie są stałe

Błąd obcięcia

$$\frac{U_{j+1,l}-2U_{j,l}+U_{j-1,l}}{\Delta^2}+\frac{U_{j,l+1}-2U_{j,l}+U_{j,l-1}}{\Delta^2}=\rho_{j,l}$$

Podstawiając $U(x,t)$ za $U_{j,l}$, otrzymamy

$$T_{j,l}=\frac{1}{12}\Delta^2(U_{xxxx}+U_{yyyy})+O(\Delta^4)$$

Jeśli

$$|U_{xxxx}|\leq M_x,\quad |U_{yyyy}|\leq M_y$$

to

$$|T_{j,l}|\leq T\equiv\frac{1}{12}\Delta^2(M_x+M_y)$$

$\Rightarrow$ schemat jest bezwarunkowo zgodny

Niech

$$LU_{j,l}=\frac{U_{j,l+1}+U_{j,l-1}+U_{j+1,l}+U_{j-1,l}-4U_{j,l}}{\Delta^2}$$

Rozwiązanie numeryczne spełnia równanie

$$LU_{j,l}=\rho_{j,l}$$

natomiast rozwiązanie dokładne równanie

$$LU^{ex}_{j,l}=\rho_{j,l}+T_{j,l}$$

Niech

$$\Omega=(0,1)\times(0,1)$$

Błąd rozwiązania

$$e_{j,l}=U_{j,l}-U^{ex}_{j,l}$$

Mamy

$$Le_{j,l}=-T_{j,l}$$

W zagadnieniu Dirichleta na brzegach obszaru musi być

$$e_{j,l}=0$$

Definiujemy funkcję porównawczą

$$\phi_{j,l}=\left(x-\frac{1}{2}\right)^2+\left(y-\frac{1}{2}\right)^2$$

- $\phi_{j,l}$ osiąga na brzegach swoje maksimum
- $L\phi_{j,l}=4$

Wprowadzamy funkcję pomocniczą

$$\psi_{j,l}=e_{j,l}+\frac{1}{4}T\phi_{j,l}$$

Mamy

$$L\psi_{j,l}=Le_{j,l}+\frac{1}{4}TL\phi_{j,l}=-T_{j,l}+T$$

$$|T_{j,l}| \leq T \quad \Rightarrow \quad L\psi_{j,l} \geq 0$$

Stąd

$$\psi_{j,l} + \frac{\Delta^2}{4}(T - T_{j,l}) = \frac{1}{4}(\psi_{j,l-1} + \psi_{j-1,l} + \psi_{j+1,l} + \psi_{j,l+1})$$

Wszystkie wyrazy w powyższym równaniu nieujemne

$\Rightarrow$ $\psi_{j,l}$ nie może być większe od wszystkich swoich sąsiadów

$\Rightarrow$ $\psi_{j,l}$ ma maksimum na brzegu

Na brzegu

- $e_{j,l} = 0$
- $\max \phi = \frac{1}{2}$ (na rogach)

$$\Rightarrow \psi_{j,l} \leq \frac{1}{8}T$$

ϕ jest nieujemne

$$\Rightarrow e_{j,l} \leq \psi_{j,l} \Rightarrow e_{j,l} \leq \frac{1}{96}\Delta^2(M_x + M_y)$$

Definiując funkcję pomocniczą jako

$$\psi_{j,l} = \frac{1}{4}T\phi_{j,l} - e_{j,l}$$

otrzymamy w analogiczny sposób

$$-e_{j,l} \leq \frac{1}{96}\Delta^2(M_x + M_y)$$

Stąd

$$|e_{j,l}| = |U_{j,l} - U^{ex}_{j,l}| \leq \frac{1}{96}\Delta^2(M_x + M_y)$$

Jeśli oszacowanie błędu $e_{j,l}$ jest trudno znalezć

- poszukaj rozwiązania dla coraz mniejszych kroków
- dla dostatecznie małych Δ różnica między dwoma przybliżonymi rozwiązaniami jest dobrym wskaznikiem błędu