Metody numeryczne II

Równania różniczkowe cząstkowe, część IV

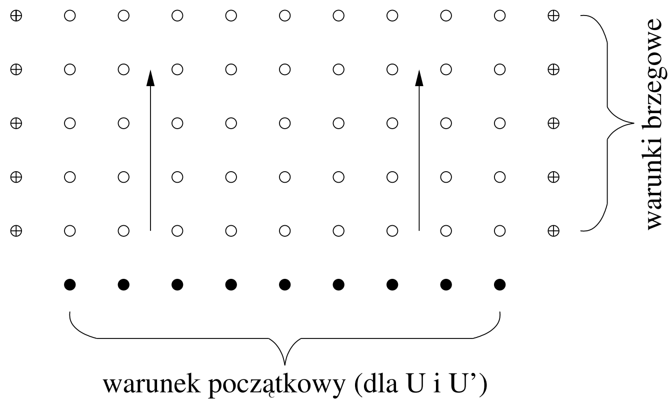
Janusz Szwabiński

szwabin@ift.uni.wroc.pl

Hiperboliczne równania różniczkowe cząstkowe

1. Rozwiązanie analityczne
2. Zagadnienie początkowe zachowujące strumień
3. Dyskretyzacja
4. Dyfuzja i dyspersja
5. Metody drugiego rzędu w czasie

Dobrze postawione zagadnienie hiperboliczne



Prototypowe równanie hiperboliczne

Równanie falowe

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = \mathcal{V}^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

gdzie $\mathcal{V}$ to prędkość rozchodzenia się fali

Rozwiązanie analityczne

Szukamy rozwiązania trójwymiarowego równania falowego dla $t > 0$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} = \frac{1}{\mathcal{V}^2}\frac{\partial^2 U}{\partial t^2}$$

w obszarze

$$\Omega = \{0 < x < a,\ 0 < x < b,\ 0 < z < c\}$$

z warunkiem początkowym

$$\begin{aligned} U(x,y,z,0) &= U_0 > 0,\ (x,y,z) \in \Omega \\ \left.\frac{\partial U}{\partial t}\right|_{t=0} &= 0 \end{aligned}$$

oraz warunkami brzegowymi

$$\begin{aligned} &U(0,y,z,t) = U(a,y,z,t) = 0, \qquad 0 < y < b,\ 0 < z < c,\ t > 0 \\ &U(x,0,z,t) = U(x,b,z,t) = 0, \qquad 0 < x < a,\ 0 < z < c,\ t > 0 \\ &U(x,y,0,t) = U(x,y,c,t) = 0, \qquad 0 < x < a,\ 0 < y < b,\ t > 0 \end{aligned}$$

Poszukujemy rozwiązania w postaci

$$U_{kmn}(x,y,z,t) = X_k(x)Y_m(y)Z_n(z)T_{kmn}(t)$$

$$\Rightarrow \frac{X_k''}{X_k} + \frac{Y_m''}{Y_m} + \frac{Z_n''}{Z_n} = \frac{1}{\mathcal{V}^2}\frac{T_{kmn}''}{T_{kmn}}$$

U_{kmn} jest rozwiązaniem naszego zagadnienia, jeśli

$$\frac{X_k''}{X_k} = -K_k^2,\ \frac{Y_m''}{Y_m} = -M_m^2,\ \frac{Z_n''}{Z_n} = -N_n^2,\ \frac{T_{kmn}''}{T_{kmn}} = -\mathcal{V}^2\lambda_{kmn}^2$$

gdzie

$$\lambda_{kmn}^2 = K_k^2 + M_m^2 + N_n^2$$

Otrzymujemy

$$X_k'' + K_k^2 X_k = 0 \ \Rightarrow\ X_k(x) = A_k \cos K_k x + B_k \sin K_k x$$

$$Y_m'' + M_m^2 Y_m = 0 \ \Rightarrow\ Y_m(y) = C_m \cos M_m y + D_m \sin M_m y$$

$$Z_n'' + N_n^2 Z_n = 0 \ \Rightarrow\ Z_n(z) = E_n \cos N_n z + F_n \sin N_n z$$

$$\begin{aligned} &T_{kmn}'' + \lambda_{kmn}^2 \mathcal{V}^2 T_{kmn} = 0 \\ &\quad\Rightarrow\ T_{kmn}(t) = G_{kmn}\cos\lambda_{kmn}\mathcal{V}t + H_{kmn}\sin\lambda_{kmn}\mathcal{V}t \end{aligned}$$

Z warunków brzegowych wynika

$$\begin{aligned} A_k &= 0, \qquad K_k = \frac{k\pi}{a} \\ C_m &= 0, \qquad M_m = \frac{m\pi}{b} \\ E_n &= 0, \qquad N_n = \frac{n\pi}{c} \end{aligned}$$

Warunek początkowy dla pochodnej prowadzi do

$$H_{kmn} = 0$$

Wprowadzając oznaczenie $L_{kmn} = B_k D_m F_n G_{kmn}$ mamy

$$U(x,y,z,t) = \sum_{k=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} L_{kmn} \sin\frac{k\pi x}{a} \sin\frac{m\pi y}{b} \sin\frac{n\pi z}{c} \cos\lambda_{kmn}\mathcal{V}t$$

przy czym

$$\lambda_{kmn} = \pi\sqrt{\frac{k^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} + \frac{n^2}{c^2}}$$

Z warunku początkowego dla funkcji

$$U_0 = \sum_{k=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} L_{kmn} \sin\frac{k\pi x}{a} \sin\frac{m\pi y}{b} \sin\frac{n\pi z}{c}$$

otrzymamy

$$\begin{aligned} L_{kmn} &= \frac{U_0 \int_0^a \int_0^b \int_0^c \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \sin\frac{k\pi x}{a} \sin\frac{m\pi y}{b} \sin\frac{n\pi z}{c}}{\int_0^a \int_0^b \int_0^c \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \sin^2\frac{k\pi x}{a} \sin^2\frac{m\pi y}{b} \sin^2\frac{n\pi z}{c}} \\ &= \frac{64U_0}{\pi^3(2k-1)(2m-1)(2n-1)} \end{aligned}$$

Zagadnienia początkowe zachowujące strumień

Rozważmy jeszcze raz uproszczone równanie falowe

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = \mathcal{V}^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

Niech

$$\begin{aligned} r &\equiv \mathcal{V}\frac{\partial U}{\partial x} \\ s &\equiv \frac{\partial U}{\partial t} \end{aligned}$$

Równanie falowe można teraz zapisać w postaci dwóch równań liniowych pierwszego rzędu

$$\begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial t} &= \mathcal{V}\frac{\partial s}{\partial x} \\ \frac{\partial s}{\partial t} &= \mathcal{V}\frac{\partial r}{\partial x} \end{aligned}$$

Wprowadzając oznaczenie $\vec{\psi} = (r, s)$, otrzymamy

$$\frac{\partial \vec{\psi}}{\partial t} = -\frac{\partial \mathbf{F}(\psi)}{\partial x}$$

$$\mathbf{F}(\vec{\psi}) = \begin{pmatrix} 0 & -\mathcal{V} \\ -\mathcal{V} & 0 \end{pmatrix} \vec{\psi}$$

Dyskretyzacja

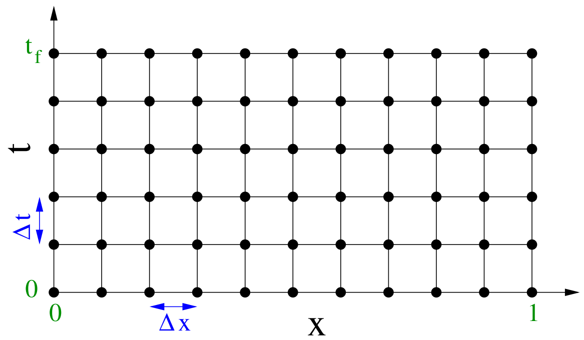
Równanie adwekcji

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\mathcal{V}\frac{\partial U}{\partial x}$$

Dyskretna reprezentacja poszukiwanej funkcji

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

$$\begin{aligned} x_j &= x_0 + j\Delta x, \quad j = 0, 1, \ldots, J \\ t_n &= t_0 + n\Delta t, \quad n = 0, 1, \ldots, N \end{aligned}$$



FTCS

Pochodną po czasie zastępujemy wzorem Eulera

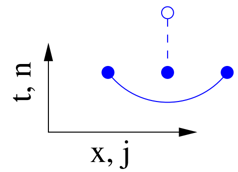
$$\left.\frac{\partial U}{\partial t}\right|_{j,n} = \frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} + O(\Delta t)$$

natomiast pochodną przestrzenną różnicą centralną

$$\left.\frac{\partial U}{\partial x}\right|_{j,n} = \frac{U_{j+1}^n - U_{j-1}^n}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$

Otrzymujemy

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



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

Rozważmy pojedynczą składową Fouriera postaci

$$U_j^n = \lambda^n e^{ikj\Delta x}$$

Otrzymamy

$$U_j^{n+1} = \lambda(k) U_j^n, \quad \lambda(k) = 1 - i\mathcal{V}\frac{\Delta t}{\Delta x}\sin k\Delta x$$

Współczynnik wzmocnienia dla wszystkich k spełnia warunek

$$|\lambda(k)| = 1 + \left(\frac{\mathcal{V}\Delta t}{\Delta x}\right)^2 \sin^2 k\Delta x \geq 1$$

$\Rightarrow$ schemat jest <u>zawsze</u> niestabilny!

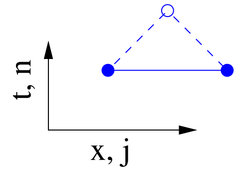
Metoda Laxa

Zastąpmy wartość U_j^n w schemacie FTCS przez jej wartość średnią

$$U_j^n \rightarrow \frac{1}{2}\left(U_{j+1}^n + U_{j-1}^n\right)$$

Otrzymamy schemat Laxa

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

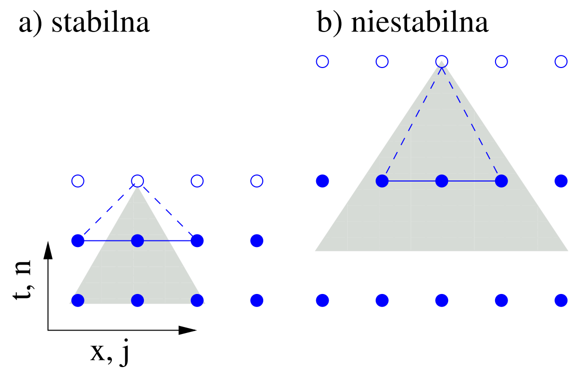


Analiza von Neumanna prowadzi do

$$\lambda(k) = \cos k\Delta x - i\frac{\mathcal{V}\Delta t}{\Delta x}\sin k\Delta x$$

Warunek stabilności Couranta–Friedrichsa–Lewy'ego

$$|\lambda(k)| \leq 1 \Rightarrow \frac{|\mathcal{V}|\Delta t}{\Delta x} \leq 1$$



Metoda Laxa dla układów równań

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} r \\ s \end{pmatrix} = \frac{\partial}{\partial x}\begin{pmatrix} \mathcal{V}s \\ \mathcal{V}r \end{pmatrix}$$

Metoda Laxa ma postać

$$\begin{aligned} r_j^{n+1} &= \frac{1}{2}\left(r_{j+1}^n + r_{j-1}^n\right) + \frac{\mathcal{V}\Delta t}{2\Delta x}\left(s_{j+1}^n - s_{j-1}^n\right) \\ s_j^{n+1} &= \frac{1}{2}\left(s_{j+1}^n + s_{j-1}^n\right) + \frac{\mathcal{V}\Delta t}{2\Delta x}\left(r_{j+1}^n - r_{j-1}^n\right) \end{aligned}$$

Rozważmy składową Fouriera postaci

$$\begin{pmatrix} r_j^n \\ s_j^n \end{pmatrix} = \lambda^n e^{ikj\Delta x}\begin{pmatrix} r^0 \\ s^0 \end{pmatrix}$$

Podstawiając do schematu Laxa i dzieląc przez λ^n, otrzymamy

$$\begin{pmatrix} (\cos k\Delta x) - \lambda & i\frac{\mathcal{V}\Delta t}{\Delta x}\sin k\Delta x \\ i\frac{\mathcal{V}\Delta t}{\Delta x}\sin k\Delta x & (\cos k\Delta x) - \lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} r^0 \\ s^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Rozwiązanie tego równania istnieje, gdy wyznacznik macierzy równania wynosi zero, tzn.

$$\lambda = \cos k\Delta x \pm i\frac{\mathcal{V}\Delta t}{\Delta x}\sin k\Delta x$$

Warunek stabilności wymaga, aby

$$|\lambda| \leq 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{|\mathcal{V}|\Delta t}{\Delta x} \leq 1$$

Dyfuzja

Dlaczego metoda Laxa jest stabilna?

Zapiszmy schemat Laxa dla równania adwekcji w postaci

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

To nic innego, jak reprezentacja FTCS równania

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\mathcal{V}\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2\Delta t}\nabla^2 U, \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$\Rightarrow$ dodaliśmy dyssypatywny wyraz do równania wyjściowego

Dyspersja

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

Rozważamy składową Fouriera postaci

$$U(x,t) = \hat{U}e^{i(\omega t - kx)}$$

Związek dyspersyjny równania adwekcji

$$\omega = \mathcal{V}k$$

Związek dyspersyjny metody Laxa

$$e^{i\omega\Delta t} = \cos(k\Delta x) - \frac{\mathcal{V}\Delta t}{\Delta x} i \sin(k\Delta x)$$

Niech

$$\omega = \Omega + i\Theta$$

Wówczas

$$\begin{aligned} \tan(\Omega\Delta t) &= \frac{\mathcal{V}\Delta t}{\Delta x}\tan(k\Delta x) \\ e^{-2\Theta\Delta t} &= \cos^2(k\Delta x) + \left(\frac{\mathcal{V}\Delta t}{\Delta x}\right)^2 \sin^2(k\Delta x) \end{aligned}$$

W specjalnym przypadku

$$\frac{\mathcal{V}\Delta t}{\Delta x} = 1$$

mamy

$$\begin{aligned} \Theta &= 0 \\ \Omega &= \mathcal{V}k \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ związki dyspersyjne równania różniczkowego i schematu różnicowego zgodne

Metody drugiego rzędu w Δt

Do tej pory omawialiśmy metody, które były

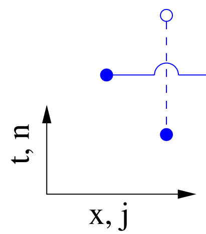
- drugiego rzędu w Δx
- pierwszego rzędu w Δt

$\Rightarrow$ aby uzyskać zadowalającą dokładność, Δt dużo mniejsze, niż wymaga tego warunek stabilności

Metoda punktu środkowego

Najprostszy schemat drugiego rzędu w czasie (ang. *staggered leapfrog*)

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



$\Rightarrow$ do wyliczenia U^{n+1} potrzebujemy U^n i U^{n-1}

Równanie adwekcji

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\mathcal{V}\frac{\partial U}{\partial x}$$

Schemat ma postać

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

Analiza stabilności prowadzi do

$$\lambda^2 - 1 = -2i\lambda\frac{\mathcal{V}\Delta t}{\Delta x}\sin k\Delta x$$

$$\lambda = -i\frac{\mathcal{V}\Delta t}{\Delta x}\sin k\Delta x \pm \sqrt{1 - \left(\frac{\mathcal{V}\Delta t}{\Delta x}\sin k\Delta x\right)^2}$$

Jeżeli

$$\mathcal{V}\Delta t \leq \Delta x$$

czynnik pod pierwiastkiem jest dodatni i

$$|\lambda| = 1$$

dla wszystkich k

Dla bardziej skomplikowanych równań (nieliniowych) metoda punktu środkowego może być niestabilna. Niestabilność tą „leczy” się, wprowadzając mały człon dyfuzyjny

$$\alpha\left(U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n\right), \quad |\alpha| \ll 1$$

Dwustopniowy schemat Laxa–Wendroffa

Określamy wartości pomocnicze $U^{n+1/2}$, obliczone metodą Laxa dla połówkowego kroku czasowego $t_{n+1/2}$ i połówkowego kroku siatki $x_{j+1/2}$

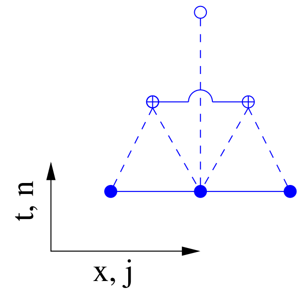
$$U_{j+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2}\left(U_{j+1}^{n} + U_{j}^{n}\right) - \frac{\Delta t}{2\Delta x}\left(F_{j+1}^{n} - F_{j}^{n}\right)$$

Wyliczamy strumienie w pośrednich punktach przestrzeni i czasu

$$F_{j+1/2}^{n+1/2} = F\left(U_{j+1/2}^{n+1/2}\right)$$

Następnie stosujemy metodę punktu środkowego

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



Dla równania adwekcji mamy

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \alpha\left[\frac{1}{2}\left(U_{j+1}^n + U_j^n\right) - \frac{\alpha}{2}\left(U_{j+1}^n - U_j^n\right) - \frac{1}{2}\left(U_j^n + U_{j-1}^n\right) + \frac{\alpha}{2}\left(U_j^n - U_{j-1}^n\right)\right]$$

$$\alpha \equiv \frac{\mathcal{V}\Delta t}{\Delta x}$$

Analiza von Neumanna daje

$$\lambda = 1 - i\alpha \sin k\Delta x - \alpha^2(1 - \cos k\Delta x)$$

czyli

$$|\lambda|^2 = 1 - \alpha^2(1-\alpha^2)(1-\cos k\Delta x)^2.$$

Schemat będzie stabilny, jeśli $|\lambda|^2 \leq 1$, co ponownie prowadzi do warunku Couranta–Friedrichsa–Lewy'ego

Przykład

Równanie adwekcji

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\frac{\partial U}{\partial x}$$

z periodycznymi warunkami brzegowymi oraz z warunkiem początkowym

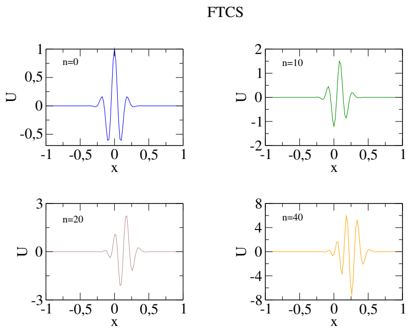
$$U_0(x) = U(x,0) = e^{-x^2/(2\sigma^2)} \cos kx$$

Można sprawdzić, że jeśli $U(x,0) = f(x)$, to rozwiązanie równania ma postać

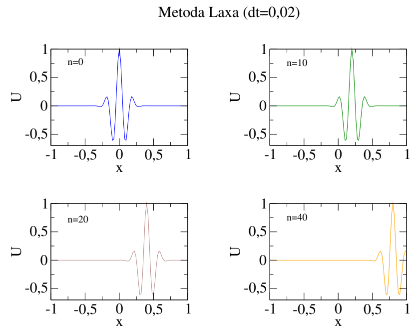
$$U(x,t) = f(x - \mathcal{V}t)$$

$\Rightarrow$ początkowy kształt funkcji $U(x,t)$ zostaje zachowany w czasie

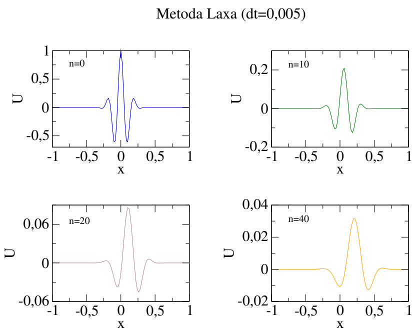
Przykład: metoda FTCS



Przykład: metoda Laxa



Przykład: dyfuzja numeryczna



Przykład: metoda punktu środkowego