Metody numeryczne II

Równania różniczkowe cząstkowe - uzupełnienia

Janusz Szwabiński

szwabin@ift.uni.wroc.pl

Równania różniczkowe cząstkowe - uzupełnienia

1. Paraboliczne równania różniczkowe cząstkowe
   - Zagadnienie dyfuzji w wielu wymiarach
2. Eliptyczne równania różniczkowe cząstkowe
   - Metoda relaksacji
3. Hiperboliczne równania różniczkowe cząstkowe
   - Metoda punktu środkowego (cd)
   - Zagadnienia wielowymiarowe

Paraboliczne równania różniczkowe cząstkowe

Równanie dyfuzji w dwóch wymiarach przestrzennych

$$\frac{\partial U}{\partial t} = D\left[\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2}\right] = D\nabla^2 U = D\mathrm{div}\nabla U$$

Warunki brzegowe Dirichleta

$$\begin{aligned} U(x,0,t) &= y_0(x,t), \qquad (x,t) \in (0,1)\times(0,t_f) \\ U(x,1,t) &= y_1(x,t), \qquad (x,t) \in (0,1)\times(0,t_f) \\ U(0,y,t) &= x_0(y,t), \qquad (y,t) \in (0,1)\times(0,t_f) \\ U(1,y,t) &= x_1(y,t), \qquad (y,t) \in (0,1)\times(0,t_f) \end{aligned}$$

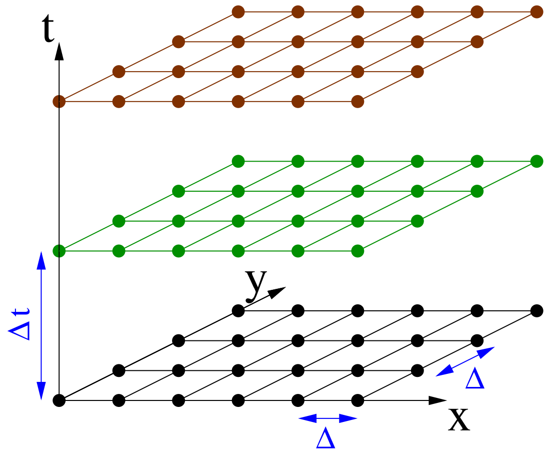
Warunek początkowy

$$U(x,y,0) = U_0(x,y), \quad (x,y) \in (0,1)\times(0,1)$$

Dyskretyzacja

$$U(x,y,t) \quad\rightarrow\quad U^n_{j,l} \equiv U(x_j, y_l, t_n)$$

$$\begin{aligned} x_j &= j\Delta, \qquad j = 0,1,\ldots,J \\ y_l &= l\Delta, \qquad l = 0,1,\ldots,L \\ t_n &= n\Delta t, \qquad n = 0,1,\ldots \end{aligned}$$



FTCS

$$\frac{U^{n+1}_{j,l} - U^n_{j,l}}{\Delta t} = D\left[\frac{\delta_x^2 U^n_{j,l}}{\Delta^2} + \frac{\delta_y^2 U^n_{j,l}}{\Delta^2}\right]$$

$$\begin{aligned} \delta_x^2 U^n_{j,l} &= U^n_{j+1,l} - 2U^n_{j,l} + U^n_{j-1,l} \\ \delta_y^2 U^n_{j,l} &= U^n_{j,l+1} - 2U^n_{j,l} + U^n_{j,l-1} \end{aligned}$$

Błąd obcięcia

$$T^n_{j,l} = \left[\frac{1}{2}\Delta t U_{tt} - \frac{D}{12}\Delta^2 U_{xxxx} - \frac{D}{12}\Delta^2 U_{yyyy} + \ldots\right]^n_{j,l}$$

$\Rightarrow$ schemat jest zgodny

Warunek stabilności

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

czyli

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

Metoda Cranka–Nicholsona

$$U^{n+1}_{j,l} = U^n_{j,l} + \frac{1}{2}\alpha\left(\delta_x^2 U^{n+1}_{j,l}\delta_x^2 U^n_{j,l} + \delta_y^2 U^{n+1}_{j,l} + \delta_y^2 U^n_{j,l}\right)$$

$$\alpha \equiv \frac{D\Delta t}{\Delta^2}$$

$\Rightarrow$ w każdym kroku czasowym układ równań do rozwiązania

$\Rightarrow$ w 2D macierz układu nie jest trójdiagonalna

$\Rightarrow$ dodatkowy nakład obliczeń

Metoda ADI

- podziel krok czasowy Δt na dwa o długości $\Delta t/2$ każdy
- w każdym z nowych kroków potraktuj inną współrzędną przestrzenną niejawnie

$$\begin{aligned} U_{j,l}^{n+1/2} &= U_{j,l}^{n} + \frac{1}{2}\alpha\left(\delta_x^2 U_{j,l}^{n+1/2} + \delta_y^2 U_{j,l}^{n}\right) \\ U_{j,l}^{n+1} &= U_{j,l}^{n+1/2} + \frac{1}{2}\alpha\left(\delta_x^2 U_{j,l}^{n+1/2} + \delta_y^2 U_{j,l}^{n+1}\right) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ każdy krok wymaga rozwiązania prostego trójprzekątniowego układu równań

Analiza stabilności prowadzi do

$$\lambda(k) = \frac{\left(1 - 2\alpha\sin^2\frac{k_x\Delta}{2}\right)\left(1 - 2\alpha\sin^2\frac{k_y\Delta}{2}\right)}{\left(1 + 2\alpha\sin^2\frac{k_x\Delta}{2}\right)\left(1 + 2\alpha\sin^2\frac{k_y\Delta}{2}\right)}$$

$\Rightarrow$ metoda bezwarunkowo stabilna

Można pokazać, że ADI (metoda Peacemana–Rachforda) jest tego samego rzędu co CN

Metody kroków ułamkowych

Rozważmy zagadnienie początkowe postaci

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

$\mathcal{L}$ - pewien operator paraboliczny, niekoniecznie liniowy

Załóżmy, że

- $\mathcal{L} = \mathcal{L}_1 + \ldots + \mathcal{L}_m$
- dla każdego operatora $\mathcal{L}_i$ znamy schemat różnicowy, pozwalający obliczyć szukaną funkcję w następnym kroku czasowym, o ile tylko ten operator stanowiłby jedyny wkład do $\mathcal{L}$

Zapiszemy to symbolicznie w postaci

$$U^{n+1} = \mathcal{U}_i(U^n, \Delta t)$$

Możliwość pierwsza:

$$\begin{aligned} U^{n+1/m} &= \mathcal{U}_1\left(U^n, \Delta t\right) \\ U^{n+2/m} &= \mathcal{U}_2\left(U^{n+1/m}, \Delta t\right) \\ &\ldots \\ U^{n+1} &= \mathcal{U}_m\left(U^{n+(m-1)/m}, \Delta t\right) \end{aligned}$$

Możliwość druga (np. ADI):

- $\mathcal{U}_1$ reprezentuje schemat, który wprawdzie zawiera wszystkie operatory $\mathcal{L}_i$, ale jest zadowalająco stabilny jedynie dla $\mathcal{L}_1$; podobnie $\mathcal{U}_2$ itd.

$$\begin{aligned} U^{n+1/m} &= \mathcal{U}_1\left(U^n, \Delta t/m\right) \\ U^{n+2/m} &= \mathcal{U}_2\left(U^{n+1/m}, \Delta t/m\right) \\ &\dots \\ U^{n+1} &= \mathcal{U}_m\left(U^{n+(m-1)/m}, \Delta t/m\right) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ otrzymany schemat różnicowy jest na ogół schematem stabilnym

Eliptyczne równania różniczkowe cząstkowe

Równanie Poissona

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

z warunkiem brzegowym Dirichleta

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

gdzie

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

Równanie różnicowe

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

lub

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

gdzie

$$i \equiv j(L+1) + l, \quad j = 1, \dots, J-1, \quad l = 1, \dots, L-1$$

$\Rightarrow$ rozwiązanie EPDE sprowadza się do rozwiązania układu

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

Metoda relaksacji

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

$\mathbf{E}$ to macierz, dla której łatwo jest znaleźć macierz odwrotną

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

Zgadując pewne rozwiązanie $U^{(0)}$, wyliczamy U iteracyjnie

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

Metoda Jacobiego

$$\vec{U} \;\rightarrow\; \vec{x}$$

Niech

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} + \mathbf{D} + \mathbf{U}$$

$\mathbf{U}$ - górna macierz trójkątna (zera na diagonali)

$\mathbf{D}$ - macierz diagonalna

$\mathbf{L}$ - dolna macierz trójkątna

Wówczas

$$\mathbf{D}\vec{x}^{(r)} = -(\mathbf{L} + \mathbf{U})\vec{x}^{(r-1)} + \vec{b}$$

Własności:

- jeśli podzielimy równanie wyjściowe przez (-4), macierz $\mathbf{D}$ bedzie macierzą jednostkową
- metoda zbieżna dla dla macierzy $\mathbf{A}$ dominujących przekątniowo (na ogół spełnione dla zagadnień eliptycznych)
- liczba iteracji potrzebna do zredukowania błędu 10^{-p} razy wynosi

$$r \approx \frac{p\ln 10}{(-\ln\rho_s)}$$

ρ_s - promień spektralny macierzy $-\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{U})$

Dla jednorodnej siatki $J \times J$, dla dużych J zachodzi

$$\rho_s \simeq 1 - \frac{\pi^2}{2J^2}$$

Stąd

$$r \simeq \frac{2pJ^2\ln 10}{\pi^2} \simeq \frac{1}{2}pJ^2$$

$\Rightarrow$ bardzo wolna zbieżność

Metoda Gaussa–Seidla

Obliczamy $\vec{x}$ według wzoru

$$(\mathbf{L} + \mathbf{D})\vec{x}^{(r)} = -\mathbf{U}\vec{x}^{(r-1)} + \vec{b}$$

W tym wypadku mamy

$$\rho_s \simeq 1 - \frac{\pi^2}{J^2}$$

a zatem

$$r \simeq \frac{1}{4}pJ^2$$

$\Rightarrow$ zbieżność dwukrotnie szybsza, niż dla metody Jacobiego, ciągle jeszcze zbyt wolna dla zastosowań praktycznych

Stopniowa nadrelaksacja (SOR)

$$(\mathbf{L}+\mathbf{D})\vec{x}^{(r)} = -\mathbf{U}\vec{x}^{(r-1)} + \vec{b}$$

Stąd

$$\vec{x}^{(r)} = -(\mathbf{L}+\mathbf{D})^{-1}\left(\mathbf{U}\vec{x}^{(r-1)} - \vec{b}\right)$$

Dodajemy i odejmujemy $\vec{x}^{(r-1)}$ po prawej stronie

$$\begin{aligned}\vec{x}^{(r)} &= \vec{x}^{(r-1)} - (\mathbf{L}+\mathbf{D})^{-1}\left[(\mathbf{L}+\mathbf{D}+\mathbf{U})\vec{x}^{(r-1)} - \vec{b}\right] \\ &= \vec{x}^{(r-1)} - (\mathbf{L}+\mathbf{D})^{-1}\vec{\xi}^{(r-1)}\end{aligned}$$

gdzie

$$\vec{\xi}^{(r-1)} = (\mathbf{L}+\mathbf{D}+\mathbf{U})\vec{x}^{(r-1)} - \vec{b}$$

Otrzymane równanie modyfikujemy w następujący sposób:

$$\vec{x}^{(r)} = \vec{x}^{(r-1)} - \omega(\mathbf{L}+\mathbf{D})^{-1}\vec{\xi}^{(r-1)}$$

ω - parametr nadrelaksacji

- uzyskana metoda jest zbieżna dla $0 < \omega < 2$
- czasami przyspieszenie zbieżności tylko dla nadrelaksacji (tzn. $1 < \omega < 2$)
- jeśli ρ_{Jac} to promień spektralny iteracji Jacobiego, wówczas optymalny wybór ω to

$$\omega = \frac{2}{1+\sqrt{1-\rho_{Jac}^2}}$$

Wówczas

$$\rho_{SOR} = \left(\frac{\rho_{Jac}}{1+\sqrt{1-\rho_{Jac}^2}}\right)^2$$

i dla dużych J mamy

$$\omega \simeq \frac{2}{1+\pi/J}, \quad \rho_{SOR} \simeq 1 - \frac{2\pi}{J}$$

oraz

$$r \simeq \frac{1}{3}pJ$$

$\Rightarrow$ znaczne przyspieszenie zbieżności w porównaniu z metodą Gaussa–Seidla

Słaby punkt - wybór ω w zagadnieniach, dla których nie możemy wyznaczyć go analitycznie.
Dwie możliwości

- przybliżenie problemu wyjściowego innym, dla którego ω można znaleźć, a następnie zastosowanie tej wartości do problemu wyjściowego
- jeśli rozwiązujemy wiele podobnych zagadnień, różniących się nieznacznie współczynnikami, szukamy eksperymentalnie ω dla jednego z nich, i stosujemy tą wartość dla reszty

Implementacja

Rozważmy ponownie równanie

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

Procedura iteracyjna zdefiniowana jest poprzez jego rozwiązanie

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

Nowe U to średnia ważona

$$U^{(r)}_{j,l} = \omega U^*_{j,l} + (1-\omega) U^{(r-1)}_{j,l}$$

Residuum dane jest wzorem

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

Stąd

$$U^{(r)}_{j,l} = U^{(r-1)}_{j,l} + \frac{\omega}{4}\xi_{j,l}$$

Jako kryterium zbieżności używamy normy wektora $\vec{\xi}$

HRRC - Metoda punktu środkowego

Dla równania adwekcji

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

metoda punktu środkowego ma postać

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

⇒ oprócz warunku początkowego U^0 potrzebujemy jeszcze U^1, aby wystartować schemat

⇒ inna metoda (np. Laxa lub Laxa–Wendroffa) w pierwszym kroku

Analiza stabilności prowadzi do

$$\lambda_{1,2} = -i\gamma \sin k\Delta x \pm \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 k\Delta x}$$

przy czym

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

Metoda jest stabilna dla

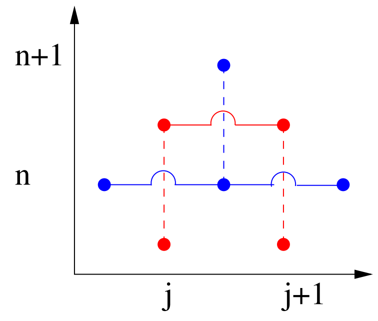
$$|\gamma| \le 1$$

Rozważmy układ równań

$$\begin{aligned} r_t - \mathcal{V} s_x &= 0 \\ s_t - \mathcal{V} r_x &= 0 \end{aligned}$$

W tym wypadku mamy

$$\begin{aligned} \frac{r^{n+1}_{j+1/2} - r^n_{j+1/2}}{\Delta t} &= \mathcal{V}\frac{s^{n+1/2}_{j+1} - s^{n+1/2}_{j}}{\Delta x} \\ \frac{s^{n+1/2}_{j} - s^{n-1/2}_{j}}{\Delta t} &= \mathcal{V}\frac{r^{n}_{j+1/2} - r^{n}_{j-1/2}}{\Delta x} \end{aligned}$$



Łatwo sprawdzić, że schemat różnicowy jest równoważny równaniu

$$\frac{U^{n+1}_j - 2U^n_j + U^{n-1}_j}{\Delta t^2} = \mathcal{V}^2\frac{U^n_{j+1} - 2U^n_j + U^n_{j-1}}{\Delta x^2}$$

czyli bezpośredniej dyskretyzacji równania falowego przy zastosowaniu wzorów trójpunktowych dla pochodnych drugiego rzędu

Rozważamy składową Fouriera postaci

$$\begin{pmatrix} r^n_{j+1} \\ s^{n-1/2}_j \end{pmatrix} = \lambda^n e^{ikj\Delta x}\begin{pmatrix} r^0 \\ s^0 \end{pmatrix}$$

Składowa ta spełnia układ równań różnicowych, jeśli

$$\begin{pmatrix} \lambda - 1 & 2i\gamma\lambda \sin\frac{k\Delta x}{2} \\ 2i\gamma \sin\frac{k\Delta x}{2} & \lambda - 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} r^0 \\ s^0 \end{pmatrix} = 0$$

Ostatnie równanie ma nietrywialne rozwiązanie, jeśli wyznacznik macierzy ukladu jest równy zeru. Stąd

$$\lambda_{\pm} = \left(1 - 2\gamma^2 \sin^2 \frac{k\Delta x}{2}\right) \pm 2\gamma \sin\left(\frac{k\Delta x}{2}\right)\sqrt{-1 + \gamma^2 \sin^2 \frac{k\Delta x}{2}}$$

Warunek stabilności wymaga, aby

$$\gamma^2 \leq 1$$

Wówczas

$$\lambda_{\pm} = \left(1 - 2\gamma^2 \sin^2 \frac{k\Delta x}{2}\right) \pm 2i\gamma \sin\left(\frac{k\Delta x}{2}\right)\sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{k\Delta x}{2}}$$

oraz

$$|\lambda|^2 = 1$$

Ponadto

$$\begin{aligned} \arg \lambda_{\pm} &= \pm \arcsin\left[2\gamma \sin\left(\frac{k\Delta x}{2}\right)\sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{k\Delta x}{2}}\right] \\ &= \pm\xi\left[1 - \frac{1}{24}(1-\gamma^2)\xi^2 + \ldots\right] \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ brak tłumienia

$\Rightarrow$ w rozwiązaniu pojawiają się dwie składowe, poruszające się w przeciwnych kierunkach

Zagadnienia wielowymiarowe

Rozważmy równanie

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\nabla \circ F = -\left(\frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y}\right)$$

Wprowadzając siatkę jednorodną, metoda Laxa będzie miała postać

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

Dla równania adwekcji mamy

$$U_{j,l}^{n+1} = \frac{1}{4}\left(U_{j+1,l}^n + U_{j-1,l}^n + U_{j,l+1}^n + U_{j,l-1}^n\right) - \frac{\Delta t}{2\Delta x}\left\{\mathcal{V}_x\left[U_{j+1,l}^n - U_{j-1,l}^n\right] + \mathcal{V}_y\left[U_{j,l+1}^n - U_{j,l-1}^n\right]\right\}$$

Analiza stabilności prowadzi do

$$\lambda(k) = \frac{1}{2}\left(\cos k_x\Delta + \cos k_y\Delta\right) - i\alpha_x \sin k_x\Delta - i\alpha_y \sin k_y\Delta$$

gdzie

$$\alpha_x = \frac{\mathcal{V}_x \Delta t}{\Delta}, \quad \alpha_y = \frac{\mathcal{V}_y \Delta t}{\Delta}$$

Stąd

$$|\lambda|^2 = 1 - \left(\sin^2 k_x\Delta + \sin^2 k_y\Delta\right)\left[\frac{1}{2} - \left(\alpha_x^2 + \alpha_y^2\right)\right] - \frac{1}{4}(\cos k_x\Delta - \cos k_y\Delta)^2 - (\alpha_y \sin k_x\Delta - \alpha_x \sin k_y\Delta)^2$$

Ponieważ dwa ostatnie wyrazy są ujemne, warunek stabilności przyjmie postać

$$\frac{1}{2} - \left(\alpha_x^2 + \alpha_y^2\right) \geq 0$$

czyli

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{\sqrt{2}\left(\mathcal{V}_x^2 + \mathcal{V}_y^2\right)^{1/2}}$$

Ostatni wzór to przykład wielowymiarowego warunku Couranta–Friedrichsa–Lewy'ego:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{\sqrt{N}|\mathcal{V}|}$$