Numeričko rješavanje parcijalnih diferencijalnih jednadžbi:

- Numeričko rješavanje paraboličke jednadžbe - difuzijske jednadžbe
  - Eksplicitna metoda konačnih razlika
  - Potpuna implicitna metoda konačnih razlika
  - Crank-Nicolsonova metoda
- Numeričko rješavanje eliptičke jednadžbe - Poissonove jednadžbe

Numeričko rješavanje difuzijske jednadžbe

Difuzijska jedadžba opisuje razne procese u praksi:

- u fizici: distribuciju topline po vremenu u nekom objektu
- u financijama: ponašanje vrijednosti opcija (financijski instrument koji dozvoljava "klađenje" da li će vrijednost te imovine rasti ili padati)

Opći oblik difuzijske (paraboličke parcijalne diferencijalne) jednadžbe je

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} - \nabla \cdot (a(x)\, \nabla u(x,t)) = f(x,t), \quad t \in [0,T],\ x \in \Omega$$

pri čemu je potrebno još zadati

- inicijalni uvjet za $t = 0$, i
- rubne uvjete za $x \in \partial\Omega$.

Mi ćemo zbog jednostavnosti promatrati jednostavniji oblik jednadžbe

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t), \qquad x \in [a,b],\ t \in [0,T],$$

s Dirichletovim rubnim uvjetima.

Standardna metoda za dobivanje aproksimacija rješenja parcijalne diferencijalne jednadžbe, kao što je difuzijska, je diskretizacija pomoću konačnih diferencija.

- U toj metodi iz danog područja $[a,b] \times [0,T]$ izabran je skup točaka koji čini mrežu.
- U svakoj točki mreže derivacije u diferencijalnoj jednadžbi zamijenjuju se sa kvocijentima koji se približavaju derivaciji kada mreža postaje sve finija.

Konačne razlike

Parcijalnu derivaciju $\partial u/\partial t$ možemo definirati kao

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = \lim_{\delta z \to 0} \frac{u(x,t+\delta t) - u(x,t)}{\delta t}.$$

Umjesto računanja limesa kada $\delta t \to 0$, uzet ćemo $\delta t > 0$ koji je vrlo mali, i budući da vrijedi

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = \frac{u(x,t+\delta t) - y(x,t)}{\delta t} + \mathcal{O}(\delta t)$$

definirat ćemo aproksimaciju

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) \approx \frac{u(x,t+\delta t) - y(x,t)}{\delta t}.$$

Ovime smo dobili konačnu razliku od $\partial y/\partial t$, a konačnu razliku ovoga oblika posebno ćemo još zvati i **konačna razlika unaprijed**.

Alternativno možemo definirati

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = \lim_{\delta t \to 0} \frac{u(x,t) - u(x,t-\delta t)}{\delta t},$$

tako da je na sličan način aproksimacija dana sa

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) \approx \frac{u(x,t) - u(x,t-\delta t)}{\delta t}.$$

Konačnu razliku ovoga oblika zovemo **konačna razlika unazad**.

Također možemo primijetiti da je

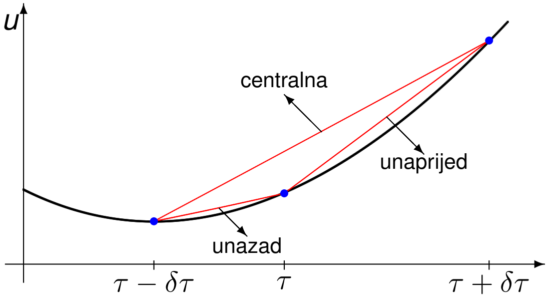
$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = \lim_{\delta t \to 0} \frac{u(x,t+\delta t) - u(x,t-\delta t)}{2\delta t}, \text{ i}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = \frac{u(x,t+\delta t) - u(x,t-\delta t)}{2\delta t} + \mathcal{O}\left((\delta t)^2\right),$$

pa možemo definirati centralnu konačnu razliku

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) \approx \frac{u(x,t+\delta t) - u(x,t-\delta t)}{2\delta t}.$$

Vidimo da je centralna konačna razlika točnija.



Konačna razlika unazad, unaprijed, i centralna.

Konačne razlike u difuzijskoj jednadžbi

- Kada se primijenjuju na difuzijsku jednadžbu, konačne razlike unaprijed i unazad koje aproksimiraju $\partial u / \partial t$ vode do eksplicitne odnosno implicitne metode konačnih razlika.
- Centralna konačna razlika gornjeg oblika po varijabli t se ne koriste u praksi jer daje nestabilne metode.
- Centralna konačna razlika oblika

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) \approx \frac{u(x,t+\delta t/2) - u(x,t-\delta t/2)}{\delta t}$$

pojavljuje se u Crank–Nicolsonovoj shemi za konačne razlike.

Parcijalne derivacije po varijabli x možemo definirati na analogan način:

- konačna razlika unaprijed

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x,t) \approx \frac{u(x+\delta x,t)-u(x,t)}{\delta x}$$

- konačna razlika unazad

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x,t) \approx \frac{u(x,t)-u(x-\delta x,t)}{\delta x}$$

- centralna konačna razlika

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x,t) \approx \frac{u(x+\delta x,t)-u(x-\delta x,t)}{2\delta x}$$

Za drugu parcijalnu derivaciju $\partial^2 u/\partial x^2$ možemo definirati simetričnu centralnu konačnu razliku kao

- konačnu razliku unaprijed od konačnih razlika unazad
- konačnu razliku unazad od konačnih razlika unaprijed

U oba slučaja dobivamo

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t) &= \frac{\frac{u(x+\delta x,t)-u(x,t)}{\delta x} - \frac{u(x,t)-u(x-\delta x,t)}{\delta x}}{\delta x} + \mathcal{O}\left((\delta x)^2\right) \\ &\approx \frac{u(x+\delta x,t)-2u(x,t)+u(x-\delta x,t)}{(\delta x)^2}.\end{aligned}$$

Mreža za difuzijsku jednadžbu

Kako bismo mogli primijeniti metodu konačnih razlika na difuzijsku jednadžbu moramo podijeliti

- x os na ekvidistantne čvorove sa razmakom od δx
- t os na ekvidistantne čvorove sa razmakom od δt

pri čemu uzimamo

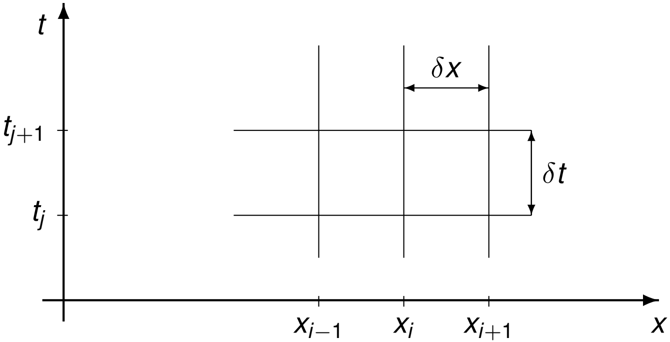
$$\delta x = \frac{b-a}{n}, \qquad \delta t = \frac{T}{m}.$$

Ovime na (x, t) ravnini, unutar domene $[a, b] \times [0, T]$, definiramo mrežu, pri čemu čvorovi mreže imaju oblik

$$(x_i, t_j) = (a + i\delta x, j\delta t), \qquad i = 0, \ldots n, \; j = 0, \ldots, m.$$

U tom slučaju računat ćemo aproksimativno rješenje samo u čvorovima mreže, i pišemo

$$u \approx u(i\delta x, j\delta t)$$



Oznake na mreži.

Eksplicitna metoda konačnih razlika

Razmatramo difuzijsku jednadžbu

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

sa rubnim i inicijalnim uvjetima

$$\begin{aligned} u(a,t) &= y_a(t), \\ u(b,t) &= u_b(t), \\ u(x,0) &= u_0(x). \end{aligned}$$

Želimo naći aproksimaciju rješenja u čvorovima mreže koristeći

- konačnu razliku unaprijed za $\partial u / \partial t$,
- simetričnu centralnu konačnu razliku za $\partial^2 u / \partial x^2$.

Pri tome se difuzijska jednadžba transformira u

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\delta t} + \mathcal{O}(\delta t) = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\delta x)^2} + \mathcal{O}\left((\delta x)^2\right).$$

Zanemarujući izraze $\mathcal{O}(\delta t)$ i $\mathcal{O}\left((\delta x)^2\right)$ dobivamo diferencijsku jednadžbu

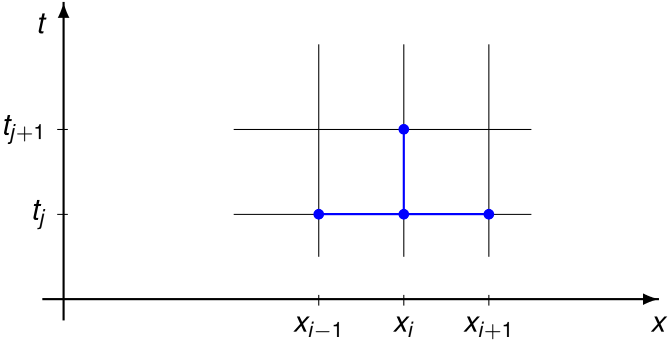
$$u_{i,j+1} = \lambda u_{i-1,j} + (1 - 2\lambda)u_{i,j} + \lambda u_{i+1,j},$$

gdje je

$$\lambda = \frac{\delta t}{(\delta x)^2}, \qquad \textbf{Courantov broj}.$$

Ako u vremenskom koraku j znamo $u_{i,j}$ za sve vrijednosti od i, tada $u_{i,j+1}$ možemo izračunati eksplicitno.

Eksplicitna metoda konačnih razlika



$u_{i,j+1}$ ovisi samo o $u_{i-1,j}$, $u_{i,j}$ i $u_{i+1,j}$.

Sada možemo riješiti diferencijsku jednadžbu za

$$0 < i < n, \qquad 0 < j \leq m.$$

Rubne uvjete koristimo za određivanje $u_{0,j}$ i $u_{n,j}$:

$$\begin{aligned} u_{0,j} &= u_a(j\delta t), && 0 < j \leq m, \\ u_{n,j} &= u_b(j\delta t), && 0 < j \leq m. \end{aligned}$$

Za pokretanje ove iterativne metode koristimo inicijalni uvjet

$$u_{i,0} = u_0(a + i\delta x), \qquad 0 \leq i \leq n.$$

Iterativna metoda završava za $j = m$ i rješenjem

$$u_{i,m}, \quad 0 \leq i \leq n,$$

što predstavlja aproksimaciju rješenja za $u(a + i\delta x, T)$, $0 \leq i \leq n$.

Algoritam eksplicitne metode konačnih razlika

$\lambda = \frac{\delta t}{(\delta x)^2}$;

for $i = 0 : n$

  $u_{stari}(i) = u_0(a + i \cdot \delta x)$;

end

for $j = 1 : m$

  $u_{novi}(0) = u_a(j \cdot \delta t)$;

  $u_{novi}(n) = u_b(j \cdot \delta t)$;

  for $i = 1 : (n - 1)$

    $u_{novi}(i) = \lambda \cdot u_{stari}(i-1) + (1 - 2 \cdot \lambda) \cdot u_{stari}(i) +$
    $+ \lambda \cdot u_{stari}(i+1)$;

  end

  $u_{stari} = u_{novi}$;

end

$u = u_{stari}$;

Stabilnost eksplicitne metode konačnih razlika

- Stabilnost numeričke metode je u bliskoj vezi sa numeričkom greškom.
- Metoda konačnih razlika je stabilna ako greška učinjena u jednom koraku metode ne utječe na povećanje greške u koracima koji slijede.
- Kod neutralno stabilne metode greška ostaje konstantna u svim koracima.
- Ako greške opadaju i po mogućnosti se prigušuju, kažemo da je numerička metoda stabilna.
- Ako, s druge strane, greška raste sa povećanjem broja koraka, aproksimativno rješenje divergira, i kažemo da je numerička metoda nestabilna.

Za daljnju analizu korisno je sve vrijednosti $u_{i,j}$ za fiksni vremenski korak j organizirati u vektor

$$u^{(j)} = \begin{bmatrix} u_{1,j} & \cdots & u_{n-1,j} \end{bmatrix}^T.$$

Za matrični oblik diferencijske jednadžbe definiramo $(n-1) \times (n-1)$ matricu A

$$A = \begin{bmatrix} 1-2\lambda & \lambda & 0 \cdots & 0 & \\ \lambda & 1-2\lambda & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \lambda \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda & 1-2\lambda \end{bmatrix}.$$

Tada eksplicitnu metodu možemo zapisati kao

$$u^{(j+1)} = Au^{(j)} + u_r^{(j)},$$

gdje je

$$u_r^{(j)} = \lambda[\ u_{0,j} \quad 0 \quad \cdots \quad 0 \quad u_{n,j}\ ]^T.$$

Stabilnost metode se odnosi na ponašanje širenja pogreške napravljene u j-tom koraku.

Neka je $\tilde{u}^{(j)} = u(t_j)$ vektor s tovčnim rješenjem u $t = t_j$.

Za ovaj vektor, iteracije će generirati niz $\tilde{u}^{(j+k)}$.

Ukupna pogreška u j-tom koraku

$$\tilde{u}^{(j)} - u^{(j)} = \varepsilon_j.$$

$$\begin{aligned} \tilde{u}^{(j+1)} - u^{(j+1)} &= A\,\tilde{u}^{(j)} + u_r^{(j)} - A\,u^{(j)} - u_r^{(j)} \\ &= A\left[\tilde{u}^{(j)} - u^{(j)}\right] = A\,\varepsilon_j. \end{aligned}$$

Nakon k koraka

$$\tilde{u}^{(j+k)} - u^{(j+k)} = A^k \varepsilon_j.$$

Da bi metoda bila stabilna, greška mora biti prigušena, a za to treba biti

$$\lim_{k\to\infty} A^k \varepsilon_j = 0,$$

Ovo će vrijediti ako i samo ako je

$$\rho(A) < 1,$$

gdje je $\rho(A)$ spektralni radijus matrice A.

Dakle, da bi metoda bila stabilna zahtijevamo da za sve svojstvene vrijednosti $\mu_1(A), \ldots, \mu_{n-1}(A)$ od A vrijedi

$$|\mu_k(A)| < 1, \quad k = 1, \ldots, n-1.$$

Slijedeći korak je računanje svojstvenih vrijednosti od A.
U tu svrhu, matricu pišemo kao

$$A = I + \lambda \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} -2 & 1 & & & 0 \\ 1 & -2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & & & 1 & -2 \end{bmatrix}}_{=G}.$$

Preostaje nam sada samo naći svojstvene vrijednosti $\mu_k(G)$ od matrice G, jer su tada

$$\mu_k(A) = 1 + \lambda \cdot \mu_k(G), \quad k = 1, \ldots, n-1.$$

Svojstvene vrijednosti matrice G su nultočke ortogonalnog polinoma p_{n-1} definiranog tročlanom rekurzijom:

$$p_{n+1}(x) + p_{n-1}(x) = (x+2)p_n(x).$$

Ovo je slično rekurziji za Čebiševljeve polinome.

Uz supstituciju

$$2y = x + 2$$

dobivamo rekurziju

$$U_{n+1}(y) + U_{n-1}(y) = 2yU_n(y).$$

Rekurzija za Čebiševljeve polinome!

Jer je

$$p_{-1}(x) = 0 \quad \text{i} \quad p_0(x) = 1$$

(početne vrijednosti za rekurziju iz teorema) slijedi da je

$$U_{-1}(x) = 0 \quad \text{i} \quad U_0(x) = 1.$$

Iz rekurzije slijedi da je

$$U_1(y) = 2yU_0(y) - U_{-1}(y) = 2y.$$

Radi se o Čebiševljevim polinomima 2. vrste.

(Za Čebiševljeve polinome 1. vrste je $U_1(y) = 2y - 1$.)

Eksplicitna formula za Čebiševljeve polinome 2. vrste:

$$U_n(y) = \frac{\sin((n+1)\arccos y)}{\sin(\arccos y)}.$$

Nultočke polinoma U_{n-1}:

$$y_k = \cos\frac{k\pi}{n}, \quad k = 1, \ldots, n-1$$

Dakle, svojstvene vrijednosti matrice G su nultočke polinoma p_{n-1}

$$\begin{aligned}\mu_k(G) =& x_k = 2y - 2_k = 2\cos\left(\frac{k\pi}{n}\right) - 2 \\ =& -4\sin^2\left(\frac{k\pi}{2n}\right), \quad k = 1, \ldots, n-1.\end{aligned}$$

Dalje vrijedi

$$\mu_k(A) = 1 - 4\lambda\sin^2\left(\frac{k\pi}{2n}\right),\ k = 1, \ldots, n-1.$$

Da bi uvjet stabilnosti $|\mu_k(A)| < 1$ bio zadovoljen, mora vrijediti

$$\left|1 - 4\lambda\sin^2\left(\frac{k\pi}{2n}\right)\right| < 1,\ k = 1, \ldots, n-1.$$

Budući da je $\lambda > 0$ po definiciji slijedi da je uvijek

$$1 - 4\lambda \sin^2\left(\frac{k\pi}{2n}\right) < 1.$$

S druge strane, uvjet

$$-1 < 1 - 4\lambda \sin^2\left(\frac{k\pi}{2n}\right)$$

se može pojednostavniti na

$$\lambda \sin^2\left(\frac{k\pi}{2n}\right) < \frac{1}{2}.$$

Dakle, gornji uvjet stabilnosti ekvivalentan je dvijema jednadžbama

$$\lambda > 0$$

$$\lambda \sin^2\left(\frac{k\pi}{2n}\right) < \frac{1}{2}.$$

Najveći izraz sa sinusom je

$$\sin\left(\frac{(n-1)\pi}{2n}\right) < 1,$$

a ako povećavamo dimenziju matrice A tada vrijedi

$$\lim_{n\to\infty} \sin\left(\frac{(n-1)\pi}{2n}\right) = 1.$$

Ovime smo dobili konačan uvjet.

Teorem

Za

$$0 < \lambda \leq \frac{1}{2}$$

eksplicitna metoda konačnih razlika za difuzijsku jednadžbu je stabilna.

- Ovaj kriterij stabilnosti daje uvjet na veličinu koraka:

$$0 < \delta t \leq \frac{(\delta x)^2}{2}.$$

- Kao posljedica uvjeta stabilnosti, parametri m i n ne mogu biti izabrani nezavisno jedan od drugoga.
- Ako moramo izračunati rješenje sa velikom točnošću, tada δx mora biti malen, što daje kvadratnu ogradu za δt koji mora biti još manji.
- Zato nam je praktičnije naći numeričku metodu koja je bezuvjetno stabilna.

Konvergencija eksplicitne metode konačnih razlika

Da bi numerička metoda bila uopće korisna u primjenama, mora biti konvergentna:

- aproksimacije moraju težiti točnom rješenju kada δx i δt teže ka nuli

Prvo nas zanima lokalna pogreška diskretizacije, to je ostatak koji dobijemo kada u relaciju koja definira metodu uvrstimo točno rješenje:

$$\epsilon_{i,j+1} = u(x_i, t_{j+1}) - \lambda u(x_{i-1}, t_j) - (1 - 2\lambda)u(x_i, t_j) - \lambda u(x_{i+1}, t_j).$$

Izraze u lokalnoj pogrešci diskretizacije razvijamo u Taylorov red i dobivamo

$$\epsilon_{i,j+1} =$$

$$= u(x_i, t_j) + \delta t \frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_j) + \frac{1}{2}(\delta t)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, t_j) + \mathcal{O}((\delta t)^3) -$$

$$- \lambda \Bigg[u(x_i, t_j) - \delta x \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t_j) + \frac{1}{2}(\delta x)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_j) - \frac{1}{6}(\delta x)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x_i, t_j) +$$

$$+ \frac{1}{24}(\delta x)^4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_i, t_j) + \mathcal{O}((\delta x)^5) \Bigg] - (1 - 2\lambda) u(x_i, t_j) -$$

$$- \lambda \Bigg[u(x_i, t_j) + \delta x \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t_j) + \frac{1}{2}(\delta x)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_j) + \frac{1}{6}(\delta x)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x_i, t_j) +$$

$$+ \frac{1}{24}(\delta x)^4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_i, t_j) + \mathcal{O}((\delta x)^5) \Bigg]$$

Ako uvrstimo da je $\delta t = \lambda(\delta x)^2$, sređivanjem prethodnog izraza dobivamo

$$\begin{aligned}\epsilon_{i,j+1} &= \delta t \left(\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_j) - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_j) \right) + \\ &\quad + \frac{(\delta t)^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, t_j) - \lambda \frac{(\partial x)^4}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_i, t_j) + \mathcal{O}((\delta t)^3) + \mathcal{O}((\delta x)^5) \\ &= \frac{(\delta t)^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, t_j) - \lambda \frac{(\partial x)^4}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_i, t_j) + \mathcal{O}((\delta t)^3) + \mathcal{O}((\delta x)^5)\end{aligned}$$

jer je u rješenje difuzijske jednadžbe. Dakle, vrijedi

$$\begin{aligned}u(x_i, t_{j+1}) = \lambda u(x_{i-1}, t_j) + (1 - 2\lambda) u(x_i, t_j) + \lambda u(x_{i+1}, t_j) + \\ + \mathcal{O}((\delta t)^2) + \mathcal{O}((\delta x)^4) (\approx \mathcal{O}((\delta x)^4)).\end{aligned}$$

Drugim riječima, ako bismo u vremenskom koraku j metodi dali egzaktne vrijednosti rješenja u svim čvorovima, pogreška u $(j+1)$-vom koraku bi bila reda veličine $\mathcal{O}(\delta t(\delta x)^2)$.

Ako definiramo

$$u_{egz}^{(j)} = \begin{bmatrix} u(x_1, t_j) & \cdots & u(x_{n-1}, t_j) \end{bmatrix}^T$$
$$\epsilon^{(j+1)} = \begin{bmatrix} \epsilon_{1,j+1} & \cdots & \epsilon_{n-1,j+1} \end{bmatrix}^T$$

tada izraz sa lokalnom pogreškom diskretizacije možemo napisati i u matričnom obliku kao

$$u_{egz}^{(j+1)} = A\, u_{egz}^{(j)} + u_r^{(j)} + \epsilon^{(j+1)}, \qquad j = 0, \ldots m-1.$$

Pri tome je za svaki indeks j

$$\|\epsilon^{(j)}\|_\infty \leq K\delta t(\delta x)^2.$$

Teorem

Promatramo eksplicitnu metodu konačnih razlika za difuzijsku jednadžbu u kojoj je Courantov broj λ *konstantan kada* $\delta t \to 0$ *i* $\delta x \to 0$, *i još je* $\lambda \leq 1/2$. *Neka je rješenje aproksimirano na vremenskom intervalu* $[0, T]$, *s korakom* $\delta t = \lambda(\delta x)^2$, *te neka je* $m = \lfloor T/\delta t \rfloor$. *Tada metoda konvergira, tj. za* $e^{(j)} = u^{(j)} - u_{egz}^{(j)}$ *vrijedi*

$$\lim_{\delta x \to 0} \max_{j=0,\ldots,m} \|e^{(j)}\|_\infty = 0.$$

Dokaz. Prvo primijetimo da je inicijalna vrijednost rješenja zadana, pa je (u egzaktnoj aritmetici) $e^{(0)} = 0$. Drugo, za $\lambda \leq 1/2$ je

$$\|A\|_\infty = \lambda + 1 - 2\lambda + \lambda = 1.$$

Oduzimanjem matričnih oblika iteracije metode i izraza za lokalnu pogrešku diskretizacije dobivamo

$$e^{(j+1)} = Ae^{(j)} - \epsilon^{(j+1)},$$

pa onda induktivno možemo zaključiti da je za svaki j

$$e^{(j)} = A^j e^{(0)} - \sum_{i=0}^{j-1} A^i \epsilon^{(j-i)} = - \sum_{i=0}^{j-1} A^i \epsilon^{(j-i)}.$$

Sada uzimanjem norme dobivamo

$$\begin{aligned} \|e^{(j)}\|_\infty &\leq \sum_{i=0}^{j-1} \|A\|_\infty^i \|\epsilon^{(j-i)}\|_\infty \leq j\,K\,\delta\,t\,(\delta x)^2 \\ &\leq m\,K\,\delta\,t\,(\delta x)^2 \leq T\,K\,(\delta x)^2, \end{aligned}$$

jer je $m\,\delta\,t \leq T$.

Iz dokaza prethodnog teorema jasno je vidljivo da

- Konzistentnost: lokalna pogreška diskretizacije zadovoljava $\|e^{(j)}\|/\delta t \to 0$ kada $\delta x \to 0$.
- Stabilnost: Courantov broj zadovoljava $\lambda \leq 1/2$

osiguravaju konvergenciju metode.

Potpuna implicitna metoda konačnih razlika

- Implicitne metode se koriste kako bi se izbjegla ograničenja vezana uz stabilnost eksplicitne metode.
- Ove metode nam omogućuju da koristimo mreže u x koordinati sa velikim brojem čvorova, bez da moramo uzeti jako mali δt.
- Jedna od implicitnih metoda je i potpuna implicitna metoda konačnih razlika, koja računa aproksimaciju rješenja difuzijske jednadžbe u čvorovima mreže koristeći
  - konačnu razliku unazad za $\partial u/\partial t$,
  - simetričnu centralnu konačnu razliku za $\partial^2 u/\partial x^2$.

Pri tome se difuzijska jednadžba transformira u

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\delta t} + \mathcal{O}(\delta t) = \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{(\delta x)^2} + \mathcal{O}\left((\delta x)^2\right).$$

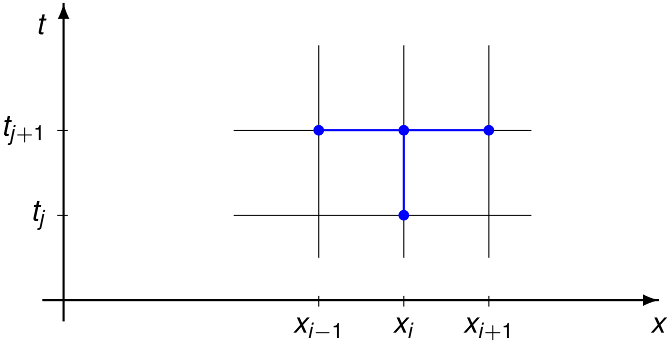
Zanemarujući izraze $\mathcal{O}(\delta t)$ i $\mathcal{O}\left((\delta x)^2\right)$ dobivamo diferencijsku jednadžbu

$$-\lambda u_{i-1,j+1} + (1 + 2\lambda)u_{i,j+1} - \lambda u_{i+1,j+1} = u_{i,j},$$

gdje je opet

$$\lambda = \frac{\delta\tau}{(\delta x)^2}.$$

U potpunoj implicitnoj metodi $u_{i-1,j+1}$, $u_{i,j+1}$ i $u_{i+1,j+1}$ implicitno ovise o $u_{i,j}$.



$u_{i-1,j+1}$, $u_{i,j+1}$ i $u_{i+1,j+1}$ ovise o $u_{i,j}$.

- nove vrijednosti se ne mogu razdvojiti i eksplicitno izračunati iz starih vrijednosti.
- Radi se o simultanom rješavanju jednadžbi, odnosno o rješavanju sustava linearnih jednadžbi.

Sada možemo riješiti diferencijsku jednadžbu za

$$0 < i < n, \qquad 0 < j \leq m.$$

Rubne uvjete koristimo za određivanje $u_{0,j}$ i $u_{n,j}$:

$$\begin{aligned} u_{0,j} &= u_a(j\delta t), & 0 < j \leq m, \\ u_{n,j} &= u_b(j\delta t), & 0 < j \leq m. \end{aligned}$$

Za pokretanje ove iterativne metode koristimo inicijalni uvjet

$$u_{i,0} = u_0(a + i\delta x), \qquad 0 \leq i \leq n.$$

Iterativna metoda završava za $j = m$ i rješenjem

$$u_{i,m}, \quad 0 \leq i \leq n,$$

što predstavlja aproksimaciju rješenja za $u(a + i\delta x, T)$, $0 \leq i \leq n$.

S obzirom da moramo rješavati sustave, sada nam i u fazi računanja treba matrični oblik diferencijske jednadžbe.

Definiramo $(n-1) \times (n-1)$ matricu A

$$A = \begin{bmatrix} 1+2\lambda & -\lambda & 0 \cdots & 0 & \\ -\lambda & 1+2\lambda & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -\lambda \\ 0 & \cdots & 0 & -\lambda & 1+2\lambda \end{bmatrix},$$

i vektor desne strane sustava

$$b = u^{(j)} + u_r^{(j+1)},$$

gdje su

$$\begin{aligned} u^{(j)} &= [\ u_{1,j} \quad \cdots \quad u_{n-1,j}\ ]^T, \\ u_r^{(j+1)} &= \lambda[\ u_{0,j+1} \quad 0 \quad \cdots \quad 0 \quad u_{n,j+1}\ ]^T. \end{aligned}$$

Sada potpunu implicitnu metodu možemo napisati u matričnom obliku kao

$$Au^{(j+1)} = u^{(j)} + u_r^{(j+1)} = b^{(j)}.$$

Vektor $u_r^{(j+1)}$ se pojavljuje zbog rubnih uvjeta, npr. iz prve jednadžbe slijedi

$$(1+2\lambda)u_{1,j+1} - \lambda u_{2,j+1} = u_{1,j} + \lambda u_{0,j+1}.$$

Pokazat ćemo da je matrica A regularna pa se korak implicitne metode može napisati eksplicitno kao

$$u^{(j+1)} = A^{-1}\left(u^{(j)} + u_r^{(j+1)}\right).$$

Algoritam potpune implicitne metode kon. razl.

definiraj rješavač s matricom A; $\lambda = \frac{\delta t}{(\delta x)^2}$;
for $i = 0 : n$
    $u(i) = u_0(a + i \cdot \delta x)$;
end
for $j = 1 : m$
    for $i = 1 : n - 1$
        $b(i) = u(i)$;
    end
    $u(0) = u_a(j \cdot \delta t)$;
    $u(n) = u_b(j \cdot \delta t)$;
    $b(1) = b(1) + \lambda \cdot u(0)$;
    $b(n - 1) = b(n - 1) + \lambda \cdot u(n)$;
    riješi sustav $Au(1 : n - 1) = b$;
end

Stabilnost potpune implicitne metode konačnih razlika

Analognom argumentacijom kao kod eksplicitne metode konačnih razlika, metoda

$$u^{(j+1)} = A^{-1}\left(u^{(j)} + u_r^{(j+1)}\right).$$

će biti stabilna ako

$$\lim_{j\to\infty} A^{-j}e^{(0)} = 0., \quad \forall e^{(0)}.$$

Dakle, metoda će biti stabilna ako i samo ako je

$$\rho(A^{-1}) < 1.$$

Matrica

$$A = I - \lambda \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} -2 & 1 & & & 0 \\ 1 & -2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & & & 1 & -2 \end{bmatrix}}_{=G}.$$

Svojstvene vrijednosti matrice G:

$$\mu_k(G) = -4\sin^2\left(\frac{k\pi}{2n}\right) < 0,\ k = 1, \ldots, n-1,$$

Svojstvene vrijednosti matrice A:

$$\mu_k(A) = 1 - \lambda\mu_k(G) > 1,\ k = 1, \ldots, n-1.$$

Svojstvene vrijednosti matrice A^{-1}:

$$\mu_k(A^{-1}) = \frac{1}{\mu_k(A)} < 1, \quad k = 1, \ldots, n-1.$$

Dakle, za bilo koji $\lambda > 0$ je $0 < \mu_k(A^{-1}) < 1$.

$\Rightarrow$ Potpuna implicitna metoda konačnih razlika je bezuvjetno stabilna.

S druge strane, vidimo da su sve svojstvene vrijednosti matrice A pozitivne, što znači da je matrica pozitivno definitna.

- Zbog toga za rješavanje sustava $Au^{(j+1)} = b^{(j)}$ možemo koristiti metode
  - faktorizaciju Choleskog
  - Gauss–Seidelovu i SOR metodu
  - metodu konjugiranih gradijenata

  koje su specijalno prilagođene za tridijagonalnu matricu.
- Kod efikasno implementirane eksplicitne i implicitne metode broj operacija je istog reda veličine, pa rješavanje sustava kod implicitne metode ne predstavlja preveliki dodatni trošak u odnosu na eksplicitnu.

Crank–Nicolsonova metoda

- Crank–Nicolsonova metoda je također implicitna metoda koja nema problema sa stabilnošću, ali ima grešku diskretizacije derivacije $\partial u/\partial t$ reda veličine $\mathcal{O}\left((\delta t)^2\right)$.
- Crank–Nicolsonova metoda računa aproksimaciju rješenja difuzijske jednadžbe u čvorovima mreže tako da uzima srednju vrijednost diferencijskih jednadžbi eksplicitne i potpuno implicitne metode.

Dakle, ako koristimo konaču razliku unaprijed za $\partial u/\partial t$ dobivamo eksplicitnu metodu

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\delta t} + \mathcal{O}(\delta t) = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\delta x)^2} + \mathcal{O}\left((\delta x)^2\right),$$

a ako koristimo konaču razliku unazad za $\partial u/\partial t$ dobivamo potpunu implicitnu metodu

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\delta t} + \mathcal{O}(\delta t) = \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{(\delta x)^2} + \mathcal{O}\left((\delta x)^2\right).$$

Srednja vrijednost tih dviju jednadžbi je

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\delta t} + \mathcal{O}(\delta t) =$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\delta x)^2} + \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{(\delta x)^2}\right) +$$

$$+ \mathcal{O}\left((\delta x)^2\right).$$

Ovom metodom zapravo aproksimiramo vrijednost difuzijske jednadžbe u točki $(x_i, t_{j+\frac{1}{2}})$, koja se nalazi na pola puta između (x_i, t_j) i (x_i, t_{j+1}):

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) = \frac{\partial^2}{\partial x^2}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}).$$

U ovom slučaju, prvu derivaciju po varijabli t aproksimiramo centralnom konačnom razlikom

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) \approx \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\delta t},$$

a drugu derivaciju po varijabli x sa

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) \approx & \frac{1}{2}\left(\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\delta x)^2} + \right. \\ & \left. \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{(\delta x)^2}\right).\end{aligned}$$

Provjerimo točno koliku smo grešku napravili u varijabli t. Za egzaktne vrijednosti $u_{i,j} = u(x_i, t_j)$ imamo

$$u_{i,j+1} = u_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{\delta t}{2}\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) + \frac{(\delta t)^2}{8}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) + \mathcal{O}\left((\delta t)^3\right)$$

$$u_{i,j} = u_{i,j+\frac{1}{2}} - \frac{\delta t}{2}\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) + \frac{(\delta t)^2}{8}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) + \mathcal{O}\left((\delta t)^3\right).$$

To znači da za centralnu konačnu razliku vrijedi

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\delta t} = \frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) + \mathcal{O}\left((\delta t)^2\right).$$

S druge strane, moramo još provjeriti odnos desne strane u Crank–Nicolsonovoj iteraciji sa $\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}})$.

Uzimanjem srednje vrijednosti konačnih razlika unaprijed i unazad, dobivamo jednakost

$$\frac{1}{2}\left(\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\delta x)^2} + \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{(\delta x)^2}\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_j) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_{j+1})\right) + \mathcal{O}\left((\delta x)^2\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) - \frac{\delta x}{2}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) + \right.$$

$$\left. + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) + \frac{\delta x}{2}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}})\right) + \mathcal{O}\left((\delta x)^2\right)$$

$$= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) + \mathcal{O}\left((\delta x)^2\right).$$

Aproksimirajući difuzijsku jednadžbu u točki $(x_i, t_{j+\frac{1}{2}})$ iteracijama Crank–Nicolsonove metode napravili smo grešku reda veličine $\mathcal{O}\left((\delta x)^2\right) + \mathcal{O}\left((\delta t)^2\right)$.

Srednja vrijednost tih dviju jednadžbi točije sada glasi

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\delta t} + \mathcal{O}\left((\delta t)^2\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\delta x)^2} + \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{(\delta x)^2}\right) +$$

$$+\mathcal{O}\left((\delta x)^2\right).$$

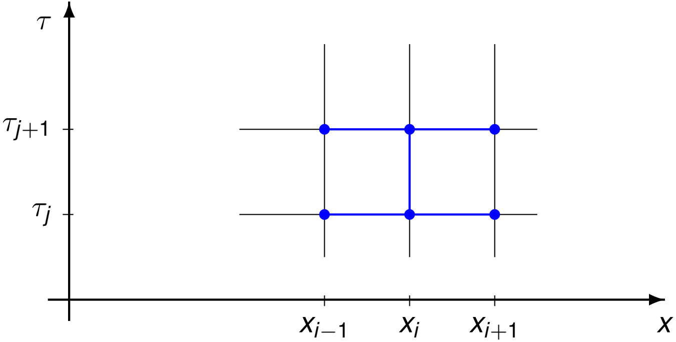
Zanemarujući izraze $\mathcal{O}\left((\delta t)^2\right)$ i $\mathcal{O}\left((\delta x)^2\right)$ dobivamo diferencijsku jednadžbu

$$-\frac{\lambda}{2}u_{i-1,j+1} + (1+\lambda)u_{i,j+1} - \frac{\lambda}{2}u_{i+1,j+1} =$$
$$= \frac{\lambda}{2}u_{i-1,j} + (1-\lambda)u_{i,j} + \frac{\lambda}{2}u_{i+1,j},$$

gdje je opet

$$\lambda = \frac{\delta t}{(\delta x)^2}.$$

U Crank–Nicolsonovoj metodi $u_{i-1,j+1}$, $u_{i,j+1}$ i $u_{i+1,j+1}$ implicitno ovise o $u_{i-1,j}$, $u_{i,j}$ i $u_{i+1,j}$.



$u_{i-1,j+1}$, $u_{i,j+1}$ i $u_{i+1,j+1}$ ovise o $u_{i-1,j}$, $u_{i,j}$ i $u_{i+1,j}$

Sada možemo riješiti diferencijsku jednadžbu za

$$0 < i < n, \qquad 0 < j \leq m.$$

Rubne uvjete koristimo za određivanje $u_{0,j}$ i $u_{n,j}$:

$$\begin{aligned} u_{0,j} &= u_a(j\delta t), && 0 < j \leq m, \\ u_{n,j} &= u_b(j\delta t), && 0 < j \leq m. \end{aligned}$$

Za pokretanje ove iterativne metode koristimo inicijalni uvjet

$$u_{i,0} = u_0(a + i\delta x), \qquad 0 \leq i \leq n.$$

Iterativna metoda završava za $j = m$ i rješenjem

$$u_{i,m}, \quad 0 \leq i \leq n,$$

što predstavlja aproksimaciju rješenja za $u(a + i\delta x, T)$, $0 \leq i \leq n$.

Matrični oblik diferencijske jednadžbe.

Definiramo $(n-1) \times (n-1)$ matricu A

$$A = \begin{bmatrix} 1+\lambda & -\frac{\lambda}{2} & 0 \cdots & 0 & \\ -\frac{\lambda}{2} & 1+\lambda & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -\frac{\lambda}{2} \\ 0 & \cdots & 0 & -\frac{\lambda}{2} & 1+\lambda \end{bmatrix},$$

i $(n-1)\times(n-1)$ matricu B

$$B = \begin{bmatrix} 1-\lambda & \frac{\lambda}{2} & 0\cdots & 0 & \\ \frac{\lambda}{2} & 1-\lambda & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \frac{\lambda}{2} \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{\lambda}{2} & 1-\lambda \end{bmatrix}.$$

Isto tako nam još trebaju vektori

$$u^{(j)} = [\ u_{1,j} \quad \cdots \quad u_{n-1,j}\ ]^T,$$
$$u_r^{(j)} = \lambda[\ u_{0,j} \quad 0 \quad \cdots \quad 0 \quad u_{n,j}\ ]^T.$$

Tada Crank–Nicolsonovu metodu možemo napisati u matričnom obliku kao

$$Au^{(j+1)} = Bu^{(j)} + \frac{1}{2}u_r^{(j)} + \frac{1}{2}u_r^{(j+1)} = b^{(j)}.$$

Pokazat ćemo da je matrica A regularna pa se korak Crank–Nicolsonove metode može napisati eksplicitno kao

$$u^{(j+1)} = A^{-1}\left(Bu^{(j)} + \frac{1}{2}u_r^{(j)} + \frac{1}{2}u_r^{(j+1)}\right).$$

Algoritam Crank–Nicolsonove metode

definiraj rješavač s matricom A; $\lambda = \frac{\delta t}{(\delta x)^2}$;
for $i = 0 : n$
    $u(i) = u_0(a + i \cdot \delta x)$;
end
for $j = 1 : m$
    for $i = 1 : n - 1$
        $b(i) = \frac{\lambda}{2} u(i-1) + (1-\lambda) u(i) + \frac{\lambda}{2} u(i+1)$;
    end
    $u(0) = y_a(j \cdot \delta t)$;
    $u(n) = u_b(j \cdot \delta t)$;
    $b(1) = b(1) + \frac{\lambda}{2} \cdot u(0)$;
    $b(n-1) = b(n-1) + \frac{\lambda}{2} \cdot u(n)$;
    riješi sustav $Au(1 : n-1) = b$;
end

Stabilnost Crank–Nicolsonove metode

Metoda:

$$u^{(j+1)} = A^{-1} B\, u^{(j)} + A^{-1} \left(\frac{1}{2} u_r^{(j)} + \frac{1}{2} u_r^{(j+1)} \right).$$

Metoda je stabilna ako i samo ako

$$\rho(A^{-1} B) < 1$$

Za

$$G = \begin{bmatrix} -2 & 1 & & & 0 \\ 1 & -2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & & & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

je

$$
\begin{aligned}
A &= I - \frac{\lambda}{2} G \\
B &= I + \frac{\lambda}{2} G \\
A^{-1} B &= \left(I - \frac{\lambda}{2} G \right)^{-1} \left(I + \frac{\lambda}{2} G \right)
\end{aligned}
$$

Svojstvene vrijednosti:

$$
\mu_k(A^{-1}B) = \frac{1 + \frac{\lambda}{2}\mu_k(G)}{1 - \frac{\lambda}{2}\mu_k(G)}
$$

Kako je

$$
\mu_k(G) = -4 \sin^2 \left(\frac{k\pi}{2n} \right) \quad \Rightarrow \quad -4 < \mu_k(G) < 0.
$$

$k = 1, \ldots, n-1,$

svojstvene vrijednosti matrice $A^{-1}B$ zadovoljavaju

$$-4 < \mu_k(G) < 0 \quad \Rightarrow$$

$$-1 < -1 + \frac{1}{1+2\lambda} < \mu_k(A^{-1}B) = \frac{1 + \frac{\lambda}{2}\mu_k(G)}{1 - \frac{\lambda}{2}\mu_k(G)} < 1.$$

Dakle,

$$\rho(A^{-1}B) < 1$$

tj. Crank-Nicolsonova metoda je bezuvjetno stabilna.

- Kao i kod potpuno implicitne metode, može se vidjeti da su sve svojstvene vrijednosti matrice A pozitivne, što znači da je matrica pozitivno definitna.
- Zbog toga za rješavanje sustava $Au^{(j+1)} = b^{(j)}$ možemo koristiti metode
  - faktorizaciju Choleskog
  - Gauss–Seidelovu i SOR metodu
  - metodu konjugiranih gradijenata

  koje su specijalno prilagođene za tridijagonalnu matricu.

Numeričko rješavanje Poissonove jednadžbe

Poissonova jednadžba

Poissonova jednadžba opisuje razne procese u fizici:

- prijenos topline,
- procese u elektrostatici,
- i gravitacijskom polju.

Ona zapravo opisuje stacionarni oblik (koji ne ovisi o vremenu) difuzijske jednadžbe uz uvjet da je funkcija a konstantna.

Poissonova jednadžba je oblika

$$-\Delta u(x) = f(x), \qquad x \in \Omega$$

pri čemu je potrebno još zadati

- rubne uvjete za $x \in \partial\Omega$.

1D Poissonova jednadžba

Promotrimo prvo najjednostavniji slučaj Poissonove jednadžbe u jednoj dimenziji — na nekom segmentu, recimo $[0, 1]$.

Jednadžba glasi

$$-\frac{d^2u(x)}{dx^2} = f(x), \qquad x \in [0, 1],$$

pri čemu je funkcija f zadana, a u nepoznata funkcija.

- Da bi Poissonova jednadžba bila dobro zadana, moramo još zadati rubne uvjete na rubu tog segmenta.
- U ovom slučaju, uzmimo najjednostavnije rubne uvjete, tj. zahtijevajmo da na rubu segmenta za funkciju u vrijedi

$$u(0) = u(1) = 0.$$

Diskretizacija 1D Poissonova jednadžba

Da bismo numerički riješili 1D Poissonovu jednadžbu, zajedno s rubnim uvjetima, moramo je diskretizirati, tj. odabrati niz točaka x_i u kojima želimo naći približno rješenje.

- Neka su točke x_i ekvidistantne, tj. neka je

$$x_i = ih, \quad h = \frac{1}{N+1}, \quad i = 0, \ldots, N+1.$$

  Sada imamo $N+1$ podsegmenata, tako da dobivena matrica (slično kao kod difuzijske jednadžbe) bude dimenzija $N \times N$.

- Također, neka je približno rješenje jednadžbe u točkama x_i označeno s $u_i \approx u(x_i)$, i neka je funkcija s desne strane u tim točkama $f_i = f(x_i)$.

Drugu derivaciju aproksimirat ćemo simetričom konačnom razlikom:

$$\frac{d^2u}{dx^2}(x_i) \approx \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2}.$$

Sada uvrstimo aproksimaciju za drugu derivaciju u diferencijalnu jednadžbu, za sve točke x_i. Dobivamo

$$-u_{i-1} + 2u_i - u_{i+1} = h^2 f(x_i), \quad i = 1, \ldots, N.$$

U matričnom obliku, ova jednadžba glasi:

$$-G_N\, u = h^2 f,$$

pri čemu je G_N matrica koja se pojavljivala i kod difuzijske jednadžbe (samo što je sada dimenzije N):

Diskretizacija 1D Poissonova jednadžba (nast.)

$$G_N = \begin{bmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -2 & 1 \\ & & & 1 & -2 \end{bmatrix},$$

$u = [u_1, u_2, \dots u_N]^T$ je nepoznati vektor rješenja, a $f = [f_1, f_2, \dots f_N]^T$ vektor desne strane sustava.

Znamo da su svojstvene vrijednosti matrice G_N jednake

$$\lambda_j = -4\sin^2\left(\frac{\pi j}{2(N+1)}\right), \quad j = 1, \dots, N.$$

Uvjetovanost matrice G_N

Po apsolutnoj vrijednosti najveća svojstvena vrijednost matrice G_N približno je jednaka -4,
dok je najmanja svojstvena vrijednost λ_1 približno jednaka

$$\lambda_1 \approx -4\left(\frac{\pi}{2(N+1)}\right)^2 = -\left(\frac{\pi}{N+1}\right)^2.$$

Ovdje smo iskoristili $\sin x \approx x$ za $x \approx 0$.

Sada je odmah jasno da je matrica $-G_N$ pozitivno definitna i da je njezina uvjetovanost približno jednaka

$$\kappa(G_N) = \frac{\lambda_N}{\lambda_1} \approx \frac{4(N+1)^2}{\pi^2}.$$

To znači da uvjetovanost brzo raste s porastom broja podintervala.

2D Poissonova jednadžba

Sada promatramo slučaj Poissonove jednadžbe (eliptičku parcijalnu diferencijalnu jednadžbu) u dvije dimenzije - na nekom kvadratu, recimo $[0,1] \times [0,1]$.

Jednadžba glasi

$$-\frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial y^2} = f(x,y), \qquad (x,y) \in [0,1] \times [0,1],$$

uz rubni uvjet $u = 0$, tj. funkcija u je jednaka 0 na rubu kvadrata.

Kvadrat podijelimo u mrežu čvorova, a da nam bude jednostavnije, pretpostavimo da je i ta mreža kvadratna, tj. korak u x i y smjeru je jednak

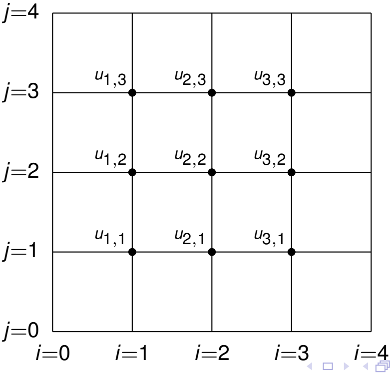
$$h = \frac{1}{N+1}.$$

Diskretizacija 2D Poissonove jednadžbe

Uz tako definirane korake, unutarnji čvorovi mreže su točke (x_i, y_j), gdje je $x_i = ih$, $y_j = jh$, za $i, j = 1, \ldots, N$.

Dakle, imamo $n := N^2$ unutarnjih čvorova mreže.

Takva mreža za $N = 3$ izgleda ovako:



Vrijednost aproksimacije rješenja u čvoru (x_i, y_j) označavamo s $u_{i,j} \approx u(ih, jh)$, a funkcijsku vrijednost s $f_{i,j} = f(ih, jh)$.

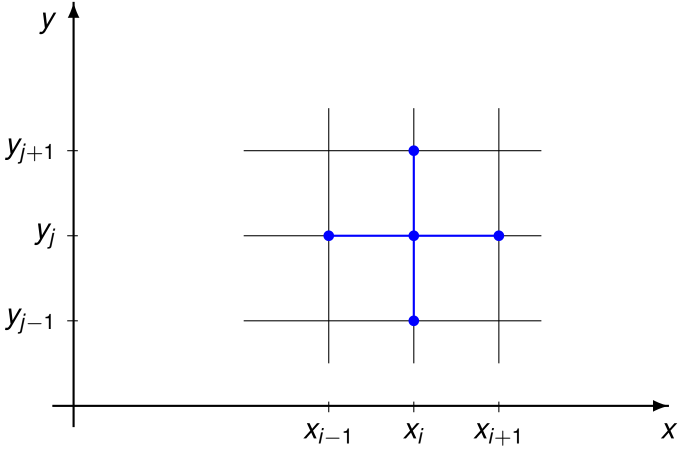
Druge parcijalne derivacije aproksimirat ćemo simetričim konačnim razlikama:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{h^2},$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{h^2}.$$

Uvrstimo li te aproksimacije derivacija u diferencijalnu jednadžbu, dobivamo

$$4u_{i,j} - u_{i-1,j} - u_{i+1,j} - u_{i,j-1} - u_{i,j+1} = h^2 f_{i,j}, \quad i, j = 1, \ldots, N.$$



$u_{i,j}$ ovisi o $u_{i-1,j}$, $u_{i+1,j}$, $u_{i,j-1}$ i $u_{i,j+1}$.

Numeriranje čvorova u kvadratnoj mreži

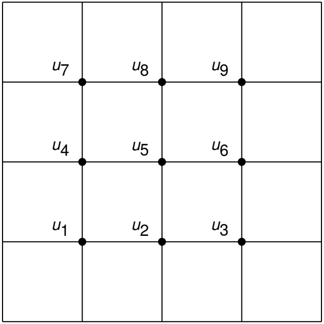
Pitanje je kako treba napisati ove jednadžbe, tako da se dobije linearni sustav s nekom strukturom.

Postoje dva načina da bi se to napravilo.

- Jedan je sekvencijalno numeriranje $u_{i,j}$ po recima ili stupcima (slijeva nadesno, ili zdesna nalijevo, odozgo nadolje ili odozdo nagore),
- a drugi tzv. crveno–crni poredak čvorova, kao kod šahovnice.

Sekvencijalno numeriranje čvorova

Ako $u_{i,j}$ sekvencijalno numeriramo po recima odozdo nagore, na primjer za $N = 3$, dobivamo ovakav poredak čvorova:



Dakle, lako zamjenjujemo $u_{i,j}$ s u_k, gdje $k = (j-1)N + i$.

Linearni sustav za 2D Poissonovu jednadžbu

Ako se na isti način transformiraju i $f_{i,j}$ u f_k, onda dobivamo linearni sustav

$$G_{N\times N} u = h^2 f,$$

gdje je $u = [u_1, u_2, \ldots, u_{N\times N}]^T$, $f = [f_1, f_2, \ldots, f_{N\times N}]^T$, a matrica $G_{N\times N}$ ima N blok-redaka i blok-stupaca, svaki dimenzije N. $G_{N\times N}$ je $N^2 \times N^2$ matrica oblika

$$G_{N\times N} = \begin{bmatrix} G_N + 2I_N & -I_N & & \\ -I_N & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -I_N \\ & & -I_N & G_N + 2I_N \end{bmatrix},$$

pri čemu je I_N jedinična matrica reda N, a opet je

$$G_N = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ & & -1 & 2 \end{bmatrix}.$$

G_N matrica koja nastaje diskretizacijom odgovarajuće 1D Poissonove jednadžbe.

Na primjer, za $N = 3$, matrica linearnog sustava je

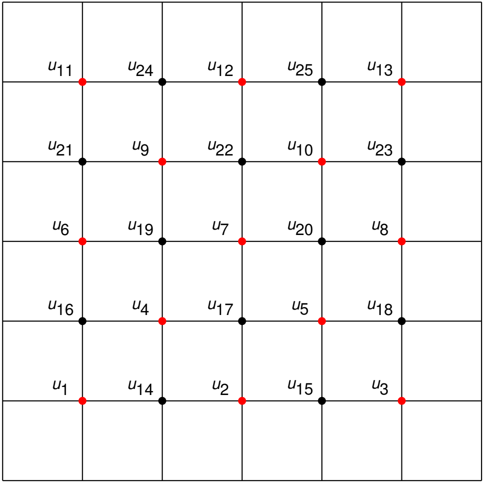
$$G_{3\times 3} = \left[\begin{array}{ccc:ccc:ccc}
4 & -1 & & -1 & & & & & \\
-1 & 4 & -1 & & -1 & & & & \\
 & -1 & 4 & & & -1 & & & \\
\hdashline
-1 & & & 4 & -1 & & -1 & & \\
 & -1 & & -1 & 4 & -1 & & -1 & \\
 & & -1 & & -1 & 4 & & & -1 \\
\hdashline
 & & & -1 & & & 4 & -1 & \\
 & & & & -1 & & -1 & 4 & -1 \\
 & & & & & -1 & & -1 & 4
\end{array}\right]$$

Crveno-crno numeriranje čvorova

Ako čvorove $u_{i,j}$ poredamo u tzv. crveno–crni poredak, dobit ćemo konzistentno poredanu matricu (definicija kasnije).

Crveno–crni poredak dobivamo tako da ih obojamo poput šahovske ploče: svaki crveni čvor (osim rubnog) je okružen s četiri crna susjeda i obratno.

Na primjer, za $N = 5$ takvo crveno–crno bojanje čvorova izgleda ovako:



u_{11} u_{24} u_{12} u_{25} u_{13}
u_{21} u_9 u_{22} u_{10} u_{23}
u_6 u_{19} u_7 u_{20} u_8
u_{16} u_4 u_{17} u_5 u_{18}
u_1 u_{14} u_2 u_{15} u_3

Ako zatim sve čvorove koji su crveno obojani popišemo prije crnih (dodijelimo im indekse prije crnih), ili obratno, dobit ćemo blok matricu oblika

$$PG_{N\times N}P^T = \begin{bmatrix} D_1 & G_{12} \\ G_{21} & D_2 \end{bmatrix}.$$

Lako je vidjeti da su dijagonalni blokovi baš dijagonalne matrice, jer ne postoji veza između dva crvena ili dva crna čvora (osim čvora sa samim sobom).

Konkretno, crveno–crni poredak za matricu $G_{3\times 3}$ daje

$$PG_{3\times 3}P^T = \left[\begin{array}{ccccc|cccc}
4 & & & & & -1 & -1 & & \\
 & 4 & & & & -1 & & -1 & \\
 & & 4 & & & -1 & -1 & -1 & -1 \\
 & & & 4 & & & -1 & & -1 \\
 & & & & 4 & & & -1 & -1 \\
\hline
-1 & -1 & -1 & & & 4 & & & \\
-1 & & -1 & -1 & & & 4 & & \\
 & -1 & -1 & & -1 & & & 4 & \\
 & & -1 & -1 & -1 & & & & 4
\end{array}\right].$$

Svojstvene vrijednosti matrice $G_{N\times N}$

Teorem

Svojstvene vrijednosti matrice $G_{N\times N}$ su

$$\lambda_{j,k} = 4\left[\sin^2\left(\frac{j\pi}{2(N+1)}\right) + \sin^2\left(\frac{k\pi}{2(N+1)}\right)\right], \quad j,k = 1,\ldots,N,.$$

Dokaz. Neka je λ neka svojstvena vrijednost od $G_{N\times N}$ sa odgovarajućim svojstvenim vektorom u, koji se može particionirati u oblik

$$u = \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{bmatrix}, \quad u_\ell = \begin{bmatrix} u_{1,\ell} \\ \vdots \\ u_{N,\ell} \end{bmatrix}, \quad \ell = 1,\ldots,N.$$

Neka je

$$S = G_N + 2I_N.$$

Tada se jednakost

$$G_{N\times N}u = \lambda\, u$$

može napisati u obliku

$$-I\, u_{\ell-1} + (S - \lambda I_N)u_\ell - I\, u_{l+1} = 0, \quad \ell = 1, \dots, N, \qquad (*)$$

gdje smo postavili da je $u_0 = u_{N+1} = 0$.

Svojstvena vrijednosti matrice S su

$$\mu_j(S) = \mu_j(G) + 2 = 2 + \sin^2\left(\frac{j\pi}{N+1}\right).$$

S je simetrična pa postoji ortogonalna matrica Q takva da je

$$S = Q\,\Lambda_S\,Q^T,$$

gdje je Λ_S dijagonalna matrica: $\Lambda_S = [\mu_1(S), \mu_2(S), \dots, \mu_N(S)]^T$.

Pomnožimo blok-rekurziju $(*)$ sa Q^T slijeva kako bismo dobili

$$-I\, v_{\ell-1} + (\Lambda_S - \lambda I) v_\ell - I\, v_{\ell+1} = 0, \quad v_\ell = Q^T u_\ell, \quad \ell = 1, \ldots, N.$$

Budući da su ovdje sve matrice dijagonalne, jednakosti duž vertikalnih linija u mreži imaju oblik

$$-v_{j,\ell+1} + \mu_j(S) v_{j,\ell} - v_{j,\ell-1} = \lambda v_{j,\ell}, \quad j = 1, \ldots, N.$$

Ako je, za fiksnu vrijednost od j, vektor $[v_{j,1} \ \ldots \ v_{j,N}]^T$ svojstveni vektor matrice

$$\begin{bmatrix} \mu_j(S) & -1 & & \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ & & -1 & \mu_j(S) \end{bmatrix},$$

s odgovarajućom svojstvenom vrijednošću λ, i ako uzmemo da su sve ostale komponenete vektora v jednake 0, tada će prethodna jednakost biti zadovoljena.

Svojstvene vrijednosti ove matrice jednake su

$$\begin{aligned}\lambda_{j,k} &= \mu_j(S) + 4\sin^2\left(\frac{k\pi}{2(N+1)}\right) - 2\\ &= 4\sin^2\left(\frac{j\pi}{2(N+1)}\right) + 4\sin^2\left(\frac{k\pi}{2(N+1)}\right),\end{aligned}$$

za $k = 1, \ldots, N$.

Napomena. Formula za $\lambda_{j,k}$ je poopćenje formule za svojstvene vrijednosti matrice G.

Da bismo dobili matricu vezanu uz rekurziju za Čebiševljeve polinome 2. vrste, umjesto korištene supstitucije $2y = x + 2$ treba koristiti $2y = x + \mu_j(S)$. □

Uvjetovanost matrice $G_{N\times N}$

Korolar

Najmanja i najveća svojstvena vrijednost od $G_{N\times N}$ ponašaju se kao

$$\lambda_{min} \approx 2\pi^2 h^2 + \mathcal{O}(h^4) \qquad i \qquad \lambda_{max} \approx 8 + \mathcal{O}(h^2)$$

kada $h \to 0$, tako da se uvjetovanost matrice $G_{N\times N}$ ponaša kao

$$\kappa(G_{N\times N}) \approx \frac{4}{\pi^2} h^{-2} + \mathcal{O}(1) = \mathcal{O}(N^2).$$

Dokaz. Najmanja svojstvena vrijednost od $G_{N\times N}$ je ona za $j = k = 1$, a najveća je ona sa $j = k = N$:

$$\lambda_{min} = 8\sin^2\left(\frac{\pi h}{2}\right), \qquad \lambda_{max} = 8\sin^2\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\pi h}{2}\right).$$

Razvojem u Taylorov red slijedi dokaz teorema.

Rješavanje sustava pomoću standardnih iteracija

Sada ćemo pokazati da matrica $G_{N \times N}$ spada u jednu posebnu klasu matrica, za koje postoje vrlo konkretni rezultati o konvergenciji standardnih iteracija.

U tu svrhu iznijet ćemo niz definicija i teorema bez dokaza, jer su dokazi prilično tehnički.

Definicija

Matrica A ima svojstvo (A) ako postoji matrica permutacije P takva da vrijedi

$$PAP^T = \begin{bmatrix} D_1 & A_{12} \\ A_{21} & D_2 \end{bmatrix},$$

gdje su D_1 i D_2 dijagonalne matrice.

Matrice s konzistentnim poretkom

Od sada pa nadalje pretpostavljamo da je matrica particionirana kao $A = L + D + R$, gdje je D regularna dijagonalna matrica, L strogo donjetrokutasta, a R strogo gornjetrokutasta.

Neka je $\alpha \neq 0$. Definirajmo familiju matrica

$$T_J(\alpha) = -\alpha D^{-1} L - \frac{1}{\alpha} D^{-1} R.$$

Vidimo da je $T_J(1) = T_J$ matrica iteracije u Jacobijevoj metodi. □

Propozicija

Za matrice A sa svojstvom (A), svojstvene vrijednosti matrica $T_J(\alpha)$ ne ovise o α, s tim da D, L i R dobivamo iz rastava matrice PAP^T.

Definicija

Neka je A proizvoljna matrica takva da je $\quad A = L + D + R \quad$ s tim da je D regularna i

$$T_J(\alpha) = -\alpha D^{-1} L - \frac{1}{\alpha} D^{-1} R.$$

Ako svojstvene vrijednosti matrice $T_J(\alpha)$ ne ovise o α, onda kažemo da A ima **konzistentan poredak** (engl. consistent ordering).

Korolar

Ako A ima konzistentan poredak, tada je

$$\rho(T_{GS}) = (\rho(T_J))^2,$$

što znači da Gauss–Seidelova metoda konvergira dvostruko brže nego Jacobijeva metoda (ako barem jedna od njih kovergira).

Optimalni parametar SOR(ω) metode

Kod SOR(ω) metode, one vrijednosti parametra ω za koje je $\rho(T_{SOR(\omega)})$ globalno najmanji, zovemo optimalnim relaksacijskim parametrima i označavamo s ω_{opt}.

Teorem

Pretpostavimo da matrica A ima konzistentan poredak i da matrica T_J u Jacobijevoj metodi ima samo realne svojstvene vrijednosti. Onda SOR(ω) metoda konvergira za bilo koji početni vektor ako i samo ako je $\mu := \rho(T_J) < 1$ (tj. Jacobijeva metoda konvergira) i vrijedi $0 < \omega < 2$. Dodatno, za $\mu < 1$ onda vrijedi i

$$\omega_{\text{opt}} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \mu^2}},$$

$$\rho(T_{SOR(\omega_{\text{opt}})}) = \omega_{\text{opt}} - 1 = \frac{\mu^2}{(1 + \sqrt{1 - \mu^2})^2} = \frac{1 - \sqrt{1 - \mu^2}}{1 + \sqrt{1 - \mu^2}},$$

a za sve $\omega \in \langle 0, 2\rangle$ *vrijedi*

$$\rho(T_{SOR(\omega)}) = \begin{cases} 1 - \omega + \frac{1}{2}\omega^2\mu^2 + \omega\mu\sqrt{1 - \omega + \frac{1}{4}\omega^2\mu^2}, & \textit{za } 0 < \omega \leq \omega_{\mathrm{opt}}, \\ \omega - 1, & \textit{za } \omega_{\mathrm{opt}} \leq \omega \leq 2. \end{cases}$$

Teorem

Neka je A simetrična (hermitska) i pozitivno definitna matrica i pretpostavimo da A ima konzistentan poredak. Onda matrica iteracije T_J *u Jacobijevoj metodi ima samo realne svojstvene vrijednosti i vrijedi* $\rho(T_J) < 1$*, tj. Jacobijeva metoda konvergira.*

Konvergencija stand. iter. za sustav s $G_{N\times N}$

Može se pokazati da matrica $G_{N\times N}$, i svaka matrica dobivena bilo kojom numeracijom čvorova, ima konzistentni poredak.

Dakle, da bismo ispitali konvergenciju iterativnih metoda, dovoljno je naći spektralni radijus matrice T_J.

Prvo, nađimo rastav (cijepanje) matrice $G_{N\times N}$

$$G_{N\times N} = 4I_{N\times N} - (4I_{N\times N} - G_{N\times N}),$$

pa je $M = 4I_{N\times N}$, $N = (4I_{N\times N} - T_{N\times N})$,

$$T_J = M^{-1}N = (4I_{N\times N})^{-1}\,(4I_{N\times N} - G_{N\times N}) = I_{N\times N} - \frac{1}{4}\,G_{N\times N}.$$

Drugim riječima, T_J je polinom od $G_{N\times N}$, pa ako je $\lambda_{i,j}$ svojstvena vrijednost od $G_{N\times N}$, onda je $1-\lambda_{i,j}/4$ svojstvena vrijednost od T_J.

Svojstvene vrijednosti matrice $G_{N\times N}$ na alternativni način možemo napisati kao

$$\lambda_{i,j} = 4 - 2\left(\cos\frac{\pi i}{N+1} + \cos\frac{\pi j}{N+1}\right),$$

odakle slijedi da je

$$\rho(T_J) = \max_{i,j}\left|1-\frac{\lambda_{i,j}}{4}\right| = \left|1-\frac{\lambda_{1,1}}{4}\right| = \left|1-\frac{\lambda_{N,N}}{4}\right| = \cos\frac{\pi}{N+1}.$$

Odmah je vidljivo da će porastom N $\rho(T_J)$ biti sve bliže 1, a iterativne će metode sve sporije konvergirati.

Čak štoviše, možemo procijeniti $\rho(T_J)$ za velike N. Dovoljno dobra aproksimacija bit će prva dva člana u Taylorovom redu za funkciju kosinus

$$\rho(T_J) = \cos\frac{\pi}{N+1} \approx 1 - \frac{\pi^2}{2(N+1)^2}.$$

Spektralni radijus za Gauss–Seidelovu metodu lako je dobiti koristeći

$$\rho(T_{GS}) = \big(\rho(T_J)\big)^2 = \cos^2\frac{\pi}{N+1}.$$

Približno, kvadriranjem prva dva člana u Taylorovom redu, vrijedi

$$\rho(T_{GS}) \approx 1 - \frac{\pi^2}{(N+1)^2}.$$

Konačno, dobivamo

$$\omega_{opt} = \frac{2}{1 + \sin \frac{\pi}{N+1}}, \qquad \rho(T_{SOR(\omega_{opt})}) = \frac{\cos^2 \frac{\pi}{N+1}}{\left(1 + \sin \frac{\pi}{N+1}\right)^2}.$$

Veličinu $\rho(T_{SOR(\omega_{opt})})$ možemo približno ocijeniti za velike N. Vrijedi

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

$$\approx 1 - 2 \sin \frac{\pi}{N+1} \approx 1 - \frac{2\pi}{N+1}.$$

Primijetite da spektralni radijus i kod Jacobijeve metode i kod Gauss–Seidelove metode ima oblik $1 - O(1/N^2)$, dok kod SOR metode s optimalnim parametrom spektralni radijus ima oblik $1 - O(1/N)$, što pokazuje da bi SOR za optimalni izbor parametra morao biti reda veličine N puta brži i od Jacobijeve i od Gauss–Seidelove metode.