Znanstveno računanje 2

5. i 6. predavanje

Saša Singer

singer@math.hr

web.math.hr/~singer

PMF – Matematički odjel, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Parabolička jednadžba u jednoj dimenziji (nastavak):
  - Linearni i nelinearni oblik problema.
  - Opći oblik rubnih uvjeta.
  - Numeričko deriviranje — osnovne formule za funkcije jedne varijable.
  - Formule za ODJ — po vremenu.
  - Diskretizacija paraboličke jednadžbe i “mrežna” aproksimacija.

Sadržaj predavanja (nastavak)

- Razni oblici diskretizacija i numeričko rješavanje:
  - Eksplicitna metoda — linearni problem.
  - Stabilnost eksplicitne metode — problem izbora koraka.
  - Implicitna metoda — linearni problem.
  - Implicitna metoda — nelinearni problem.
  - Crank–Nicolson metoda — linearni problem.
  - Crank–Nicolson metoda — nelinearni problem.
  - Diskretizacija rubnih uvjeta — dodatne jednadžbe.
  - Rješavanje tridijagonalnog linearnog sustava.
  - Metoda jednostavne iteracije za nelinearni problem.

Informacije

Konzultacije (trajno, nažalost):

- utorak, 16–17 sati,   petak, 19–20 sati.

Ovaj petak — 17. 4., nema konzultacija.

Promjena termina nastave — sređeno:

- utorak, 14–16 sati, ovdje u Praktikumu 1.

Onaj tjedan iza kolokvija, 5. 5., imamo nastavu.

Metoda konačnih diferencija za prostorne varijable

Aproksimacije derivacija konačnim razlikama

Gledamo funkciju jedne varijable $u = u(x)$. Za prvu i drugu derivaciju funkcije

$$\frac{du}{dx}, \qquad \frac{d^2u}{dx^2},$$

u nekoj točki x, najčešće koristimo

- aproksimacije konačnim razlikama.

Za funkciju više varijabli $u = u(x, \cdot)$, na isti način možemo dobiti aproksimacije parcijalnih derivacija

$$\frac{\partial u}{\partial x}, \qquad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

po nekoj "prostornoj" varijabli x.

Aproksimacije derivacija konačnim razlikama

Ove aproksimacije koriste se i za

- prvu parcijalnu derivaciju po vremenu

$$\frac{\partial u}{\partial t},$$

  na primjer, kod paraboličkih jednadžbi,

- a rjeđe za više derivacije po vremenu

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

  recimo, kod hiperboličkih jednadžbi.

U nastavku, aproksimacije za derivacije pišemo za funkciju jedne varijable $u = u(x)$.

Aproksimacije za prvu derivaciju

Za prvu derivaciju funkcije u koristimo sljedeće aproksimacije:

- konačnom (ili podijeljenom) razlikom unaprijed

$$\frac{du}{dx}(x) \approx \frac{u(x+h) - u(x)}{h},$$

- konačnom (ili podijeljenom) razlikom unazad

$$\frac{du}{dx}(x) \approx \frac{u(x) - u(x-h)}{h},$$

- simetričnom ili centralnom konačnom (ili podijeljenom) razlikom

$$\frac{du}{dx}(x) \approx \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h}.$$

Lokalne greške diskretizacije

Iz Taylorovog razvoja funkcije u oko točke x, za prethodne tri formule imamo sljedeće tri lokalne greške diskretizacije:

- za razlike unaprijed

$$\delta(x) = -\frac{1}{2}h \cdot \frac{d^2u}{dx^2}(\xi), \quad \xi \in \langle x, x+h \rangle,$$

- za razlike unazad

$$\delta(x) = +\frac{1}{2}h \cdot \frac{d^2u}{dx^2}(\xi), \quad \xi \in \langle x-h, x \rangle,$$

- za simetrične ili centralne razlike

$$\delta(x) = -\frac{1}{6}h^2 \cdot \frac{d^3u}{dx^3}(\xi), \quad \xi \in \langle x-h, x+h \rangle.$$

Opća aproksimacija za prvu derivaciju

Sve tri prethodne aproksimacije su posebni slučajevi tzv.

- nesimetrične ili "opće" konačne (ili podijeljene) razlike.

Ovu aproksimaciju za $u'(x)$ dobivamo tako da

- uzmemo dva nenegativna "koraka" h_1, h_2, od kojih bar jedan mora biti pozitivan,
- "povučemo" interpolacijski polinom p_1 za funkciju u s različitim čvorovima $x - h_1$ i $x + h_2$,
- $u'(x)$ aproksimiramo (konstantnom) derivacijom tog polinoma $p_1'(x)$.

Uočite da se točka x nalazi između čvorova $x - h_1$ i $x + h_2$, s tim da smije biti jednaka jednom od njih.

Opća aproksimacija za prvu derivaciju

Pripadna aproksimacija prve derivacije je

$$\frac{du}{dx}(x) \approx \frac{u(x+h_2) - u(x-h_1)}{h_1 + h_2}.$$

Iz Taylorovog razvoja za u oko točke x, dobivamo da je lokalna greška diskretizacije ove aproksimacije

$$\delta(x) = -\frac{h_2 - h_1}{2} \cdot \frac{d^2u}{dx^3}(x) - \frac{1}{6}\,\frac{h_1^3 + h_2^3}{h_1 + h_2} \cdot \frac{d^3u}{dx^3}(\xi),$$

za neki $\xi \in \langle x - h_1, x + h_2 \rangle$. Označimo $h = \max\{h_1, h_2\}$.

- Ako je h_1 bitno različit od h_2, imamo $\delta(x) = O(h)$.
- Naprotiv, ako je $h_1 = h_2 = h$, onda je $\delta(x) = O(h^2)$.

Opća aproksimacija za prvu derivaciju

Standardne aproksimacije dobivamo izborima:

- $h_1 = 0$, $h_2 = h$ — razlika unaprijed,
- $h_1 = h$, $h_2 = 0$ — razlika unazad,
- $h_1 = h_2 = h$ — simetrična ili centralna razlika.

Ovu opću aproksimaciju prve derivacije možemo gledati i kao

- "težinsku" sredinu razlike unaprijed i unatrag u točki x,

$$\frac{u(x+h_2) - u(x-h_1)}{h_1 + h_2} = \frac{h_2}{h_1 + h_2} \left(\frac{u(x+h_2) - u(x)}{h_2} \right) + \frac{h_1}{h_1 + h_2} \left(\frac{u(x) - u(x-h_1)}{h_1} \right).$$

Točnost centralne razlike za prvu derivaciju

Primijetimo još da je simetrična razlika ($h_1 = h_2 = h$)

- aritmetička sredina razlike unaprijed i razlike unazad,

$$\frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h} = \frac{1}{2}\left(\frac{u(x+h) - u(x)}{h} + \frac{u(x) - u(x-h)}{h}\right),$$

pa se lokalne greške diskretizacije "skrate" (suprotnog su predznaka) i dobivamo

- jedan red točnosti više.

U nastavku — još jedna interpretacija za povećanu točnost.

Točnost centralne razlike za prvu derivaciju

Aproksimaciju za $u'(x)$ možemo dobiti i tako da

- uzmemo dva pozitivna “koraka” h_1, h_2 — sad oba moraju biti pozitivna,
- “povučemo” kvadratni interpolacijski polinom p_2 za funkciju u, s tri različita čvora $x - h_1$, x i $x + h_2$,
- a zatim $u'(x)$ aproksimiramo derivacijom tog polinoma $p_2'(x)$ u “srednjoj” točki x.

Za ekvidistantni izbor čvorova $(h_1 = h_2 = h)$ izlazi upravo

- simetrična ili centralna razlika.

“Dizanje” stupnja interpolacijskog polinoma odmah diže točnost aproksimacije za funkciju i za derivacije!

Aproksimacija za drugu derivaciju

Taj isti kvadratni interpolacijski polinom p_2, s čvorovima $x - h_1$, x i $x + h_2$, možemo iskoristiti i

- za aproksimaciju druge derivacije, tako da
- $u''(x)$ aproksimiramo (konstantnom) drugom derivacijom tog polinoma $p_2''(x)$.

Dobivamo sljedeću aproksimaciju — "centralnom" razlikom drugog reda

$$\frac{d^2u}{dx^2}(x) \approx \frac{2u(x - h_1)}{h_1(h_1 + h_2)} - \frac{2u(x)}{h_1 h_2} + \frac{2u(x + h_2)}{(h_1 + h_2)h_2}.$$

"Centralna" znači da p_2 deriviramo u "srednjem" čvoru x.

Ova razlika je "simetrična" samo za $h_1 = h_2 = h$.

Lokalna greška diskretizacije

Iz Taylorovog razvoja za u oko točke x, dobivamo da je lokalna greška diskretizacije ove aproksimacije

$$\delta(x) = \frac{h_2 - h_1}{3} \cdot \frac{d^3 u}{dx^3}(x) - \frac{1}{12} \, \frac{h_1^3 + h_2^3}{h_1 + h_2} \cdot \frac{d^4 u}{dx^4}(\xi),$$

za neki $\xi \in \langle x - h_1, x + h_2 \rangle$.

Označimo, kao ranije, $h = \max\{h_1, h_2\}$.

- Ako je h_1 bitno različit od h_2, imamo $\delta(x) = O(h)$.
- Međutim, za $h_1 = h_2 = h$, dobivamo da je $\delta(x) = O(h^2)$.

Dakle, ova aproksimacija za drugu derivaciju daje lokalnu grešku istog reda kao i ranija diskretizacija za prvu derivaciju (tj. ove diskretizacije su “lokalno” kompatibilne).

Centralna simetrična razlika za drugu derivaciju

U simetričnom slučaju $h_1 = h_2 = h$, aproksimacija za drugu derivacija ima (poznati) oblik

$$\frac{d^2u}{dx^2}(x) \approx \frac{1}{h^2}\Big(u(x-h) - 2u(x) + u(x+h)\Big).$$

Lokalna greška diskretizacije ove aproksimacije je

$$\delta(x) = -\frac{1}{12}h^2 \cdot \frac{d^4u}{dx^4}(\xi),$$

za neki $\xi \in \langle x-h, x+h\rangle$.

Zaključak: Kad god možemo, treba koristiti simetrične (centralne) aproksimacije za derivacije!

“Druga” derivacija u jednadžbi difuzije

U jednadžbi difuzije, trebamo aproksimacije za derivacije “drugog” reda u obliku

$$\frac{d}{dx}\left(D(x)\frac{d}{dx}u\right),$$

s tim da “koeficijent” $D = D(x)$ može biti

- eksplicitno poznat kao funkcija od x, tj. $D = D(x)$,
- eksplicitno poznat kao funkcija rješenja u, pa onda implicitno ovisi o x, tj. $D = D(u(x))$.

U oba slučaja, derivacije diskretiziramo na isti način, a pišemo samo za $D = D(x)$.

Radi jednostavnosti, gledamo samo simetrični slučaj $h_1 = h_2 = h$, tj. uzimamo da su točke ekvidistantne.

Lošija aproksimacija — unaprijed, unazad

Ako za unutarnju derivaciju koristimo razliku unaprijed, a za vanjsku derivaciju razliku unazad u točki x, onda dobivamo sljedeću aproksimaciju

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dx}\left(D(x)\frac{d}{dx}u\right) &\approx \frac{1}{h}\frac{d}{dx}\Big(D(x)\big(u(x+h)-u(x)\big)\Big) \\
&\approx \frac{1}{h^2}\Big(D(x)\big(u(x+h)-u(x)\big) \\
&\qquad - D(x-h)\big(u(x)-u(x-h)\big)\Big) \\
&\approx \frac{1}{h^2}\Big(D(x)u(x+h)-\big(D(x)+D(x-h)\big)u(x) \\
&\qquad + D(x-h)u(x-h)\Big).
\end{aligned}
$$

Lokalna greška diskretizacije ove aproksimacije je $\delta(x) = O(h)$.

Bolja aproksimacija — centralnim razlikama

Korištenjem centralnih razlika dobivamo bolju aproksimaciju. Za unutarnju derivaciju koristimo centralnu razliku u točki $x + h/2$, a za vanjsku koristimo razliku unazad u toj točki.

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dx}\left(D(x)\frac{d}{dx}u\right) &\approx \frac{1}{h}\,\frac{d}{dx}\left(D\left(x+\frac{h}{2}\right)\big(u(x+h)-u(x)\big)\right) \\
&\approx \frac{1}{h^2}\left[D\left(x+\frac{h}{2}\right)\big(u(x+h)-u(x)\big)\right. \\
&\qquad \left. - D\left(x-\frac{h}{2}\right)\big(u(x)-u(x-h)\big)\right].
\end{aligned}$$

Simetriju dobivamo zato što je centralna razlika $=$ aritmetička sredina razlika unaprijed i unazad — naprijed, nazad za $h/2$.

Bolja aproksimacija — centralnim razlikama

Nakon sređivanja, dobivamo sljedeću aproksimaciju

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}\left(D(x)\frac{d}{dx}u\right) \approx \frac{1}{h^2}\Bigg[&D\left(x+\frac{h}{2}\right)u(x+h) \\ &-\left(D\left(x+\frac{h}{2}\right)+D\left(x-\frac{h}{2}\right)\right)u(x) \\ &+D\left(x-\frac{h}{2}\right)u(x-h)\Bigg].\end{aligned}$$

Lokalna greška diskretizacije ove aproksimacije je $\delta(x) = O(h^2)$.

Parabolične jednadžbe u 1D

Linearni i nelinearni oblik jednadžbe

U nastavku, radi jednostavnosti, gledamo samo sljedeća dva standardna oblika paraboličkih jednadžbi u 1D. Kasnije ćemo se vratiti na modelni problem ploče.

Linearni oblik paraboličke jednadžbe:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \qquad \text{ili} \qquad \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x,t).$$

Nelinearni oblik paraboličke jednadžbe:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D(u)\,\frac{\partial u}{\partial x}\right) + f(x).$$

Smatramo da je problem zadan za $x \in (a,b)$ i $t > 0$.

Napomena. U primjerima često uzimamo da je $f(x) = 0$.

Opći matematički oblik problema

Uz jednadžbu, zadani su još i početni uvjet

$$u(x,0) = v(x), \quad x \in (a,b),$$

te rubni uvjeti na lijevom i desnom rubu intervala.

Opći mješoviti oblik rubnih uvjeta je

$$g_{1,a}(t)\,u(a,t) - g_{2,a}(t)\,\frac{\partial u}{\partial x}(a,t) = g_{0,a}(t), \quad t > 0,$$

$$g_{1,b}(t)\,u(b,t) - g_{2,b}(t)\,\frac{\partial u}{\partial x}(b,t) = g_{0,b}(t), \quad t > 0,$$

gdje su $g_{i,a}$, $g_{i,b}$ zadane funkcije, za $i = 0,1,2$.

Posebni rubni uvjeti

Sve standardne oblike rubnih uvjeta možemo dobiti odgovarajućim izborom funkcija $g_{i,\cdot}$ (oznaka $\cdot = a$ ili b).

- Dirichletov:
$$g_{1,\cdot}(t) = 1, \quad g_{2,\cdot}(t) = 0.$$

- Neumannov:
$$g_{1,\cdot}(t) = 0, \quad g_{2,\cdot}(t) = 1.$$

- Newtonov ili Robinov:
$$g_{1,\cdot}(t) = -\alpha(t), \quad g_{2,\cdot}(t) = \lambda(t), \quad g_{0,\cdot}(t) = -\alpha(t)u_{\mathrm{ext}}(t),$$
s tim da $\lambda(t)$ računamo iz pripadne vrijednosti rješenja $u(\cdot, t)$ na rubu, tj. $\lambda(t) = \lambda(u(\cdot, t))$.

Princip rješavanja

Za numeričko rješavanje domena problema je skup

$$\{\ (x,t) \mid x \in [a,b],\ t \geq 0\ \}.$$

U toj domeni uvodimo diskretiziranu mrežu, preko "pravokutne" (kartezijeve) diskretizacije po svakoj varijabli,

- diskretizacija u vremenu $\times$ diskretizacija u prostoru.

Jednadžbu zatim diskretiziramo (u odgovarajućim točkama)

- na primjer, prvo u vremenu, a onda i u prostoru.

Na isti način diskretiziramo početni uvjet i rubne uvjete.

Za diskretizaciju koristimo diskretne aproksimacije

- (parcijalnih) derivacija — preko konačnih razlika, tj. numeričko deriviranje (slijedi u nastavku).

Princip rješavanja (nastavak)

Na kraju, numerički rješavamo tako dobiveni diskretizirani model. Princip:

- u vremenu — napredujemo, kao za inicijalni problem za ODJ,
- u prostoru — kao u rubnom problemu za ODJ.

Napomena. Obično se uzima da je

- početni uvjet T_0 zadan na zatvorenom intervalu $[a, b]$,
- a rubni uvjeti djeluju tek za $t > 0$,

što dozvoljava prekide rješenja u točkama $(a, 0)$ i $(b, 0)$.

Diskretizacija paraboličke jednadžbe u 1D

Diskretizacija domene jednadžbe

U domenu problema

$$\{ \, (x, t) \mid x \in [a, b], \, t \geq 0 \, \}.$$

uvodimo pravokutnu mrežu čvorova, diskretizacijom po svakoj varijabli,

- diskretizacija u vremenu $\times$ diskretizacija u prostoru.

Najčešće biramo ekvidistantnu mrežu čvorova za obje varijable x i t.

Te mreže dobivamo na sljedeći način.

Diskretizacija u prostoru

Za prostornu varijablu $x \in [a, b]$,

- izberemo prirodni broj M,
- i segment $[a, b]$ podijelimo na $M + 1$ podintervala jednake duljine Δx,

tako da je prostorni razmak među čvorovima jednak

$$\Delta x := \frac{b - a}{M + 1},$$

a čvorovi prostorne mreže su

$$x_j := a + j\Delta x, \quad j = 0, 1, \ldots, M + 1.$$

Čvorovi $x_1, \ldots x_M$ su unutarnji, a x_0 i x_{M+1} su rubni.

Diskretizacija u vremenu

Za vremensku varijablu $t \geq 0$, obično

- "broj podintervala" nema smisla (beskonačna domena),
- već direktno biramo vremenski razmak među čvorovima Δt,

a čvorovi vremenske mreže su

$$t^n := n\Delta t, \quad n = 0, 1, 2, \ldots .$$

Napomena. Kao što ćemo vidjeti, može se dogoditi da Δt ne možemo proizvoljno birati,

- već stabilnost metode određuje maksimalni korak Δt,
- nakon što izberemo Δx.

Pravokutna diskretizacija u domeni i oznake

Kartezijevim produktom ovih mreža, dobivamo pravokutnu mrežu čvorova u domeni

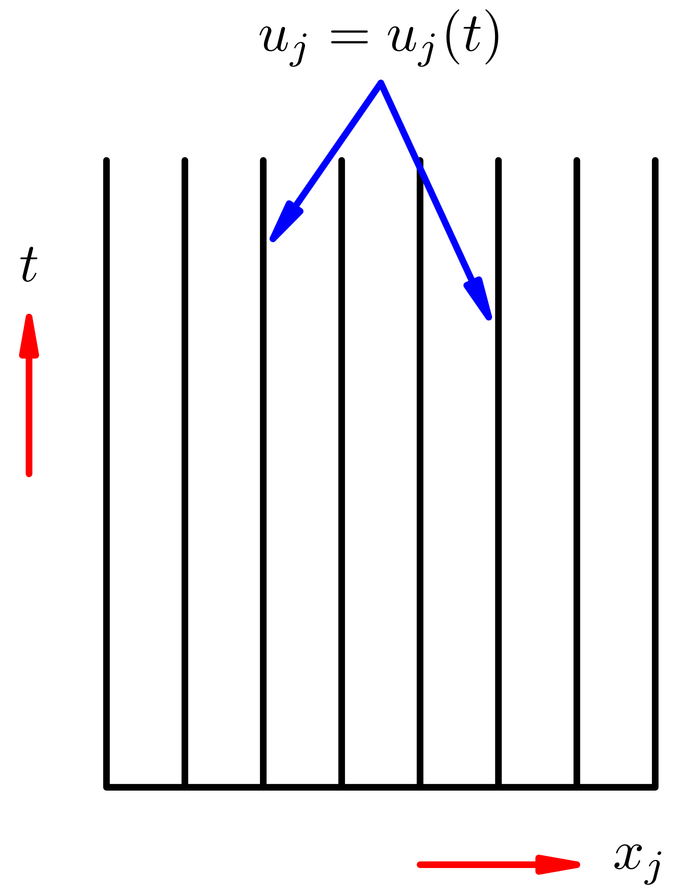
$$(x_j, t^n), \quad j = 0, 1, \ldots, M+1, \quad n = 0, 1, 2, \ldots .$$

Standardne oznake:

- u_j^n označava diskretnu (mrežnu) aproksimaciju za pravo rješenje $u(x_j, t^n)$. Tj. nakon diskretizacije jednadžbe, numerički računamo u_j^n.
- Za sve poznate funkcije f, definiramo $f_j^n := f(x_j, t^n)$. Ovo je samo oznaka vrijednosti "indeksima". Koristimo za početni uvjet, rubne uvjete i koeficijente u jednadžbi.
- Proširenje: ovdje j i n smiju biti realni.

Diskretizacija prvo u prostoru

Ako prvo diskretiziramo domenu u prostoru, dobivamo tzv. longitudinalnu mrežu



Diskretizacija prvo u prostoru — interpretacija

Po longitudinalnim linijama, za fiksni x_j, imamo

- inicijalni problem za ODJ, po diskretnim prostornim točkama x_j,

s tim da "izvana" treba povezati ove probleme po j.

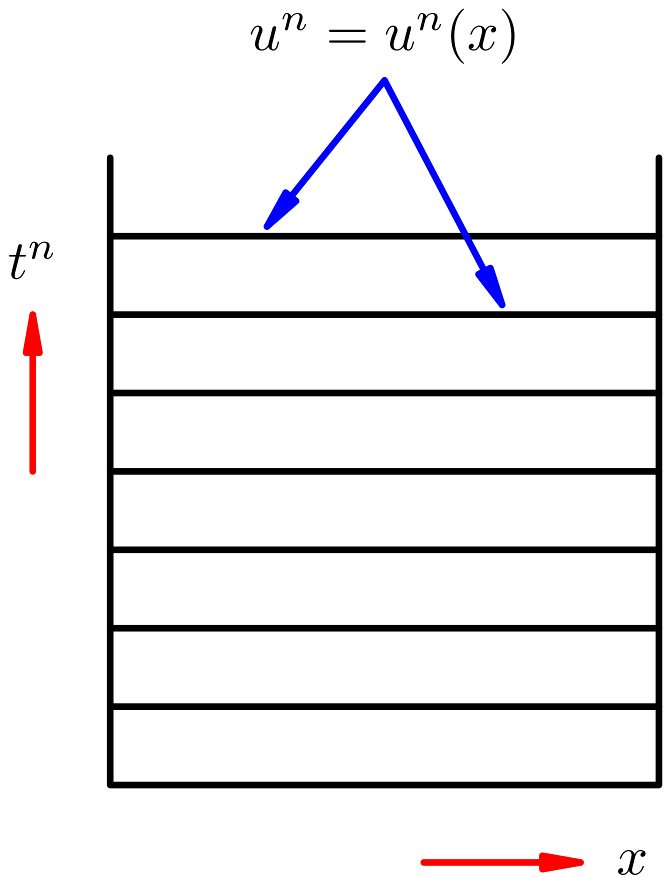
U ovoj interpretaciji, "vanjski" problem možemo gledati kao rubni, tj.

- imamo puno "vezanih" rubnih problema.

Zbog toga, ovaj pristup nije zgodan za dobivanje jednostavnih numeričkih metoda.

Diskretizacija prvo u vremenu

Ako prvo diskretiziramo domenu u vremenu, dobivamo tzv. transverzalnu mrežu



Diskretizacija prvo u vremenu — interpretacija

Po transverzalnim linijama, za fiksni t^n, imamo

- rubni problem za ODJ ili PDJ, po diskretnim vremenskim točkama t^n,

s tim da "izvana" treba povezati ove probleme po n.

U ovoj interpretaciji, "vanjski" problem možemo gledati kao inicijalni, tj.

- napredovati po vremenu, počevši od početnog uvjeta v.

Samo radi jednostavnosti — jer imamo samo prvu derivaciju po t, za dobivanje numeričkih metoda

- prvo koristimo diskretizaciju u vremenu.

Diskretizacija prvo u vremenu — interpretacija

To nam omogućava korištenje

- jednostavnih diskretizacijskih formula po vremenu, kao za inicijalni problem prvog reda kod ODJ.

Osnovne metode za numeričko rješavanje paraboličkih jednadžbi dobivaju se različitim izborom

- aproksimacije prve derivacije po vremenu, tj. lijeve strane jednadžbe.

Pogledajmo prvo jednostavne metode diskretizacije za inicijalni problem, a onda ćemo

- "uvrstiti" odgovarajuću diskretizaciju desne strane s prostornim derivacijama.

Diferencijske metode za inicijalni problem (ODJ, PDJ)

Jednokoračne i višekoračne metode

Postoji mnogo načina kako možemo aproksimirati derivaciju po vremenu $\dfrac{du}{dt}$. Ako derivaciju po vremenu aproksimiramo

- iz dvije susjedne točke (po vremenu), onda dobivamo jednokoračne metode,
- iz više točaka (po vremenu), onda dobivamo višekoračne metode.

Promatrajmo "običnu" diferencijalnu jednadžbu

$$\frac{du}{dt} = f(u, t),$$

pri čemu $f(u, t)$ može sadržavati i derivacije funkcije u, ali samo obzirom na prostorne varijable.

Kolokacijske metode

Označimo aproksimaciju za $u(t^n)$ u trenutku t^n s u^n. Za vremenski korak Δt, opća jednokoračna shema ima oblik

$$\frac{1}{\Delta t}(u^{n+1} - u^n) = \Psi(u^n, u^{n+1}, t^n; \Delta t).$$

Posebno, u tu grupu spadaju i kolokacijske metoda s m "faza" (ili stadija), poznatije kao Runge–Kutta metode:

$$\frac{1}{\Delta t}(u^{n+1} - u^n) = \sum_{j=1}^{m} \beta_j k_j^n,$$

gdje je

$$k_j^n := f\left(u^n + \Delta t \sum_{\ell=1}^{m} \gamma_{j,\ell}\, k_j^n,\ t^n + \rho_j \Delta t\right).$$

Kolokacijske metode

Kolokacijska metoda se bazira na upotrebi kvadraturnih formula na određenom intervalu.

- Sve kvadraturne formule egzaktno integriraju barem konstantu (prema njihovom izvodu), pa zbroj težina mora biti jednak duljini intervala.

Za koeficijente β_j, ρ_j, $\gamma_{j,\ell}$ vrijede sljedeće relacije

$$\sum_{j=1}^{m} \beta_j = 1, \qquad \rho_j = \sum_{\ell=1}^{m} \gamma_{j,\ell}, \quad j = 1, 2, \ldots, m.$$

Primijetite da je $0 \leq \rho_j \leq 1$, za $j = 1, 2, \ldots, m$.

Jednokoračne metode

Pet najpoznatijih jednokoračnih metoda:

- eksplicitna Eulerova metoda (metoda unaprijed)

$$\frac{1}{\Delta t}(u^{n+1} - u^n) = f(u^n, t^n),$$

- implicitna Eulerova metoda (metoda unazad)

$$\frac{1}{\Delta t}(u^{n+1} - u^n) = f(u^{n+1}, t^{n+1}),$$

- ϑ metoda, za $\vartheta \in [0, 1]$,

$$\frac{1}{\Delta t}(u^{n+1} - u^n) = (1 - \vartheta) f(u^n, t^n) + \vartheta f(u^{n+1}, t^{n+1}),$$

Jednokoračne metode

- trapezna metoda

$$\frac{1}{\Delta t}(u^{n+1} - u^n) = \frac{1}{2}\Big(f(u^n, t^n) + f(u^{n+1}, t^{n+1})\Big),$$

- metoda srednje točke (engl. midpoint rule)

$$\frac{1}{\Delta t}(u^{n+1} - u^n) = f\left(\frac{1}{2}(u^n + u^{n+1}), t^n + \frac{1}{2}\Delta t\right).$$

Veze između pojedinih metoda su:

- ϑ metoda je konveksna kombinacija eksplicitne ($\vartheta = 0$) i implicitne ($\vartheta = 1$) Eulerove metode,
- trapezna metoda je posebna ϑ metoda za $\vartheta = \frac{1}{2}$.

Jednokoračne metode — red i tip

- Eulerove metode (eksplicitna i implicitna) su metode prvog reda. Isto, općenito, vrijedi i za ϑ metodu, kao linearnu kombinaciju prethodnih, osim za $\vartheta = \frac{1}{2}$.
- Trapezna metoda i metoda srednje točke su metode drugog reda.

Prema tome kako se iz poznatog u^n dobiva aproksimacija rješenja u novoj vremenskoj točki t^{n+1}, razlikujemo

- eksplicitne metode — izravno se računa u^{n+1}, i to daje samo eksplicitna Eulerova metoda (i ϑ metoda za $\vartheta = 0$);
- implicitne metode — u^{n+1} se računa rješavanjem jednadžbe, i toj klasi pripadaju sve ostale navedene metode.

Ostale metode

Napomena. U primjeni na parcijalne jednadžbe, uglavnom se koriste samo

- jednokoračne metode niskog reda,

poput navedenih.

Metode višeg reda i višekoračne metode se ne koriste,

- zbog prevelikog broja računskih operacija u svakom vremenskom koraku!

Diferencijske metode za paraboličke PDJ

Uvod — oblik jednadžbe za opis metoda

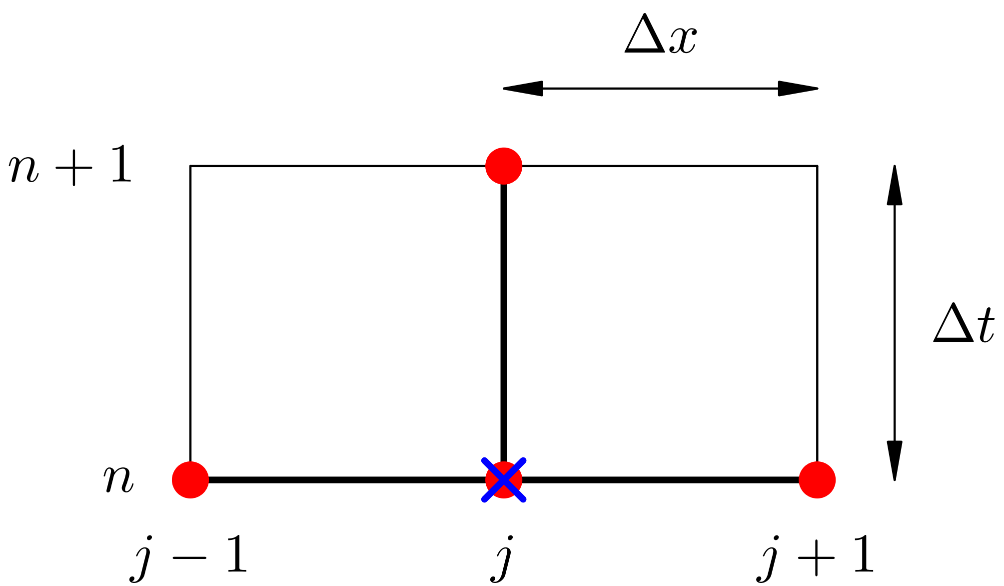
Za početak, gledamo diskretizacije i numeričko rješavanje "obične" linearne jednadžbe oblika

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x,t),$$

gdje je f poznata (zadana) funkcija.

Eksplicitna metoda

Diskretizacija jednadžbe se vrši u (unutarnjoj) točki domene (x_j, t^n), po "predlošku" (engl. "stencil") na sljedećoj slici



Derivaciju po vremenu diskretiziramo razlikom unaprijed!

Eksplicitna metoda

Derivaciju po vremenu zamijenimo razlikom unaprijed

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x_j, t^n) \approx \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}$$

a drugu derivaciju po prostoru drugom simetričnom razlikom

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x_j, t^n) \approx \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2},$$

Time smo dobili diferencijsku shemu

$$\frac{1}{\Delta t}(u_j^{n+1} - u_j^n) = \frac{1}{\Delta x^2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) + f_j^n,$$

koja vrijedi za sve unutarnje čvorove mreže.

Eksplicitna metoda

Prethodnu diferencijsku shemu možemo zapisati kao

$$u_j^{n+1} = u_j^n + d(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) + \Delta t\, f_j^n,$$

pri čemu je

$$d := \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$$

tzv. difuzijski broj.

Ime dolazi iz jednadžbe difuzije s konstantnim koeficijentom.

Uočite da se vrijednost u_j^{n+1} može izračunati direktno, i neovisno od drugih vrijednosti u trenutku $(n+1)\Delta t$. Dakle,

- ova shema je eksplicitna

i zove se eksplicitna Eulerova metoda.

Eksplicitna metoda

Da bismo našli rješenje inicijalnog rubnog problema, moramo zadati početne uvjete:

$$u_j^0 = v(x_j), \quad j = 1, 2, \dots, M,$$

i rubne uvjete, uzmimo (radi jednostavnosti) da su Dirichletovi

$$u_0^n = g_{0,a}(t^n), \quad u_{M+1}^n = g_{0,b}(t^n), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

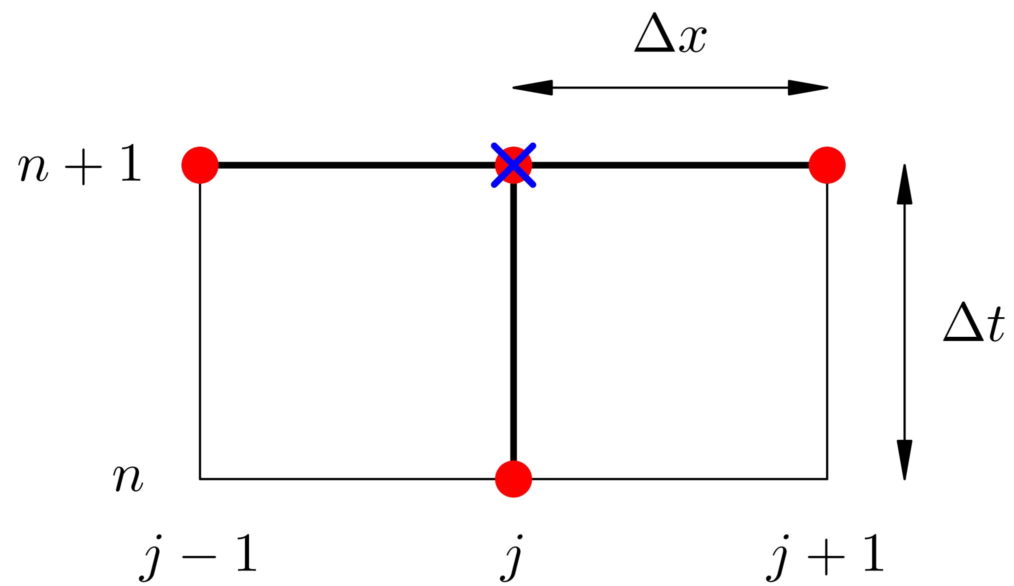
Može i početni uvjet za $j = 0, M+1$, a rubni za $n > 0$.

Eksplicitna metoda je katkad neugodna za upotrebu, jer nameće oštru vezu među koracima Δt i Δx, da bismo dobili konvergenciju metode.

- Za broj difuzije mora vrijediti $d \leq 1/2$.

Implicitna metoda

Jedina razlika implicitne metode obzirom na eksplicitnu je da se diskretizacija jednadžbe vrši u (unutarnjoj) točki domene (x_j, t^{n+1}), po “predlošku” na sljedećoj slici



Derivaciju po vremenu diskretiziramo razlikom unazad!

Implicitna metoda

Zbog toga, drugu derivaciju po prostoru zamijenimo drugom simetričnom razlikom, ali u sljedećem vremenskom trenutku

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x_j, t^{n+1}) \approx \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2},$$

Time smo dobili diferencijsku shemu

$$\frac{1}{\Delta t}(u_j^{n+1} - u_j^n) = \frac{1}{\Delta x^2}(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) + f_j^{n+1},$$

koja vrijedi za sve unutarnje čvorove mreže.

Implicitna metoda

Prethodnu diferencijsku shemu možemo zapisati kao

$$u_j^{n+1} - d(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) = u_j^n + \Delta t\, f_j^{n+1}.$$

Ova shema zove se implicitna Eulerova metoda.

ϑ shema

Kombiniranjem eksplicitne i implicitne Eulerove metode, korištenjem parametra ϑ, $\vartheta \in [0, 1]$, dobivamo sljedeću diferencijsku shemu

$$\frac{1}{\Delta t}(u_j^{n+1} - u_j^n) = \frac{1-\vartheta}{\Delta x^2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \\ + \frac{\vartheta}{\Delta x^2}(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) + (1-\vartheta)f_j^n + \vartheta f_j^{n+1}.$$

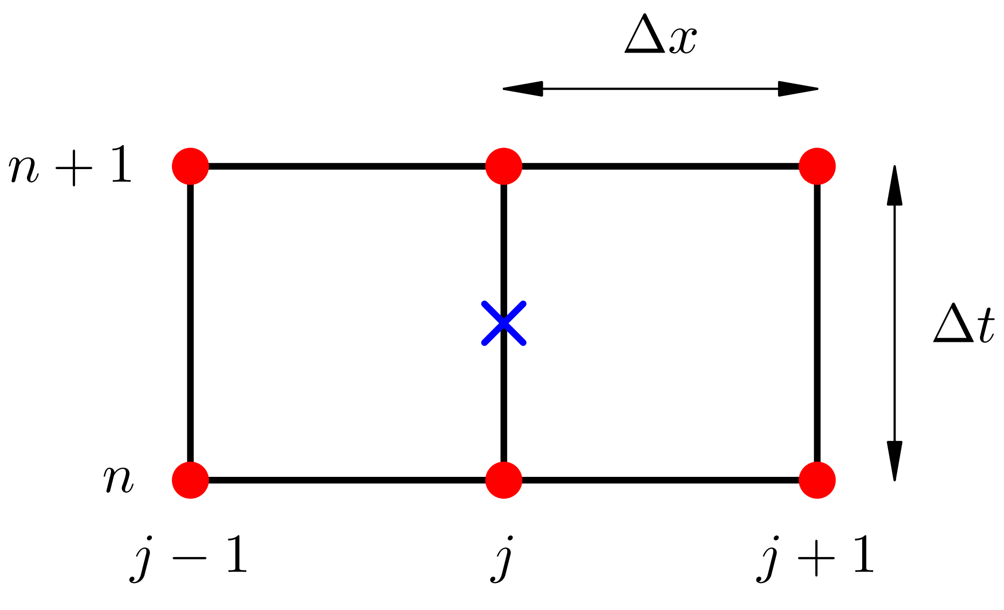
Desna strana je, očito, težinska sredina aproksimacija derivacija u trenucima $n\Delta t$ i $(n+1)\Delta t$. Za ϑ

- $\vartheta = 0$ imamo eksplicitnu shemu,
- $\vartheta = 1$ imamo implicitnu shemu,
- $\vartheta = \frac{1}{2}$ shemu zovemo Crank–Nicolsonova shema.

ϑ shema

Parametar ϑ možemo koristiti da bismo optimizirali točnost, odnosno, stabilnost sheme. Prethodna ϑ shema može se zapisati i ovako

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} - \vartheta d(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) &= u_j^n \\ &+ (1-\vartheta)d(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) + \Delta t\big((1-\vartheta)f_j^n + \vartheta f_j^{n+1}\big). \end{aligned}$$



Crank–Nicolson shema

Za parametar $\vartheta = \frac{1}{2}$ dobivamo Crank–Nicolsonovu metodu

$$u_j^{n+1} - \frac{d}{2}(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) = u_j^n + \frac{d}{2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) + \frac{\Delta t}{2}(f_j^n + f_j^{n+1}).$$

Rješenje tridijagonalnog linearnog sustava

Linearni sustav u implicitnim metodama

U implicitnim metodama dobivamo linearni sustav

- s $(n+1)$-om nepoznanicom i $(n-1)$-om jednadžbom.

Ako zadamo nagibe s_0 i s_n, ostaje točno $n-1$ nepoznanica. Matrica tako dobivenog linearnog sustava je trodijagonalna

$$\begin{bmatrix} 2(h_1+h_2) & h_1 & & & \\ h_3 & 2(h_2+h_3) & h_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & h_{n-1} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) & h_{n-2} \\ & & & h_n & 2(h_{n-1}+h_n) \end{bmatrix}$$

i strogo dijagonalno dominantna po recima, jer je

$$2(h_k+h_{k+1}) > h_k + h_{k+1},$$

pa je i regularna.

Rješenje tridijagonalnog linearnog sustava

Ovaj linearni sustav sigurno ima jedinstveno rješenje $s_1, \ldots s_{n-1}$.

Za rješavanje sustava možemo koristiti Gaussove eliminacije ili LR faktorizaciju bez pivotiranja.

Za trodijagonalnu matricu

$$A = \begin{bmatrix} d_1 & e_1 & & & \\ c_2 & d_2 & e_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & c_{n-1} & d_{n-1} & e_{n-1} \\ & & & c_n & d_n \end{bmatrix}.$$

pretpostavimo da postoji LR faktorizacija bez pivotiranja.

Rješenje tridijagonalnog linearnog sustava

Tada nije teško pokazati da su matrice L i R oblika

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ \ell_2 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ell_{n-1} & 1 & \\ & & & \ell_n & 1 \end{bmatrix},$$

$$R = \begin{bmatrix} r_1 & e_1 & & & \\ & r_2 & e_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & r_{n-1} & e_{n-1} \\ & & & & r_n \end{bmatrix}.$$

Matrice A i R imaju jednake dijagonale iznad glavne.

Rješenje tridijagonalnog linearnog sustava

Ostale elemente matrica L i R računamo po sljedećim rekurzijama

$$
\begin{aligned}
& r_1 = d_1, \\
& \text{za } i = 2, \ldots, n: \\
& \qquad \ell_i = c_i / r_{i-1}, \\
& \qquad r_i = d_i - \ell_i \, e_{i-1}.
\end{aligned}
$$

Supstitucije unaprijed i unatrag su, također, jednostavne!