Znanstveno računanje 2
7. i 8. predavanje

Saša Singer

singer@math.hr
web.math.hr/~singer

PMF – Matematički odjel, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Parabolička jednadžba u 1D — 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.

Sljedeća tri tjedna — imamo nastavu:

- 19. 5., 26. 5., 2. 6.

Naravno, do na štrajk!

Diferencijske metode za paraboličke PDJ

Uvod — oblik jednadžbe za opis metoda

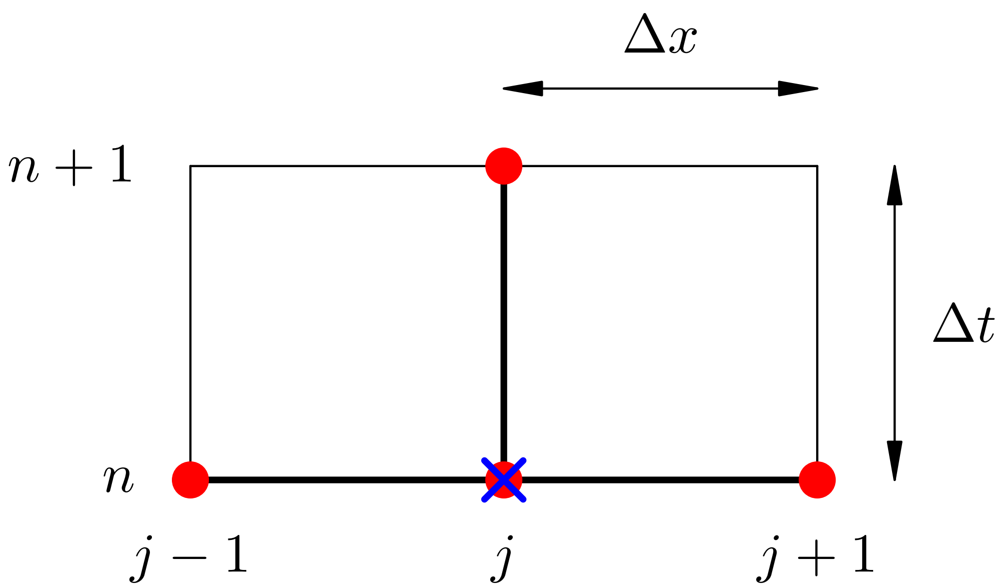
Za početak, gledamo diskretizacije i numeričko rješavanje "obične" linearne jednadžbe oblika

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

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

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

pri čemu je

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

tzv. difuzijski broj.

Ime dolazi iz jednadžbe difuzije s konstantnim koeficijentom.

Da bismo našli rješenje inicijalnog rubnog problema, moramo još uvrstiti

- "diskretizirane" početne i rubne uvjete

u gornju diferencijsku shemu.

Eksplicitna metoda

Diskretizirani početni uvjet je

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

Uzmimo (radi jednostavnosti) da su rubni uvjeti Dirichletovi. Onda imamo

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

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

Uočite da se tada 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

Lokalna greška diskretizacije jednadžbe je

$$d_j^n = \frac{1}{2}\Delta t \, \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_j, t^n) - \frac{1}{12}\Delta x^2 \, \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_j, t^n)$$

$$+ O(\Delta t^2) + O(\Delta x^4),$$

pa je ova shema konzistentna ($d_j^n \to 0$, kad $\Delta t, \Delta x \to 0$).

Metoda konvergira ako globalna greška aproksimacije funkcije

$$e_j^n := u(x_j, t^n) - u_j^n$$

teži prema nuli, kad $\Delta t, \Delta x \to 0$.

Uz konzistentnost, za to trebamo još i stabilnost sheme.

Eksplicitna metoda

Može se pokazati da je eksplicitna metoda stabilna,

- ako i samo ako za broj difuzije vrijedi

$$d = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}.$$

To nameće oštru vezu između koraka Δt i Δx, pa je

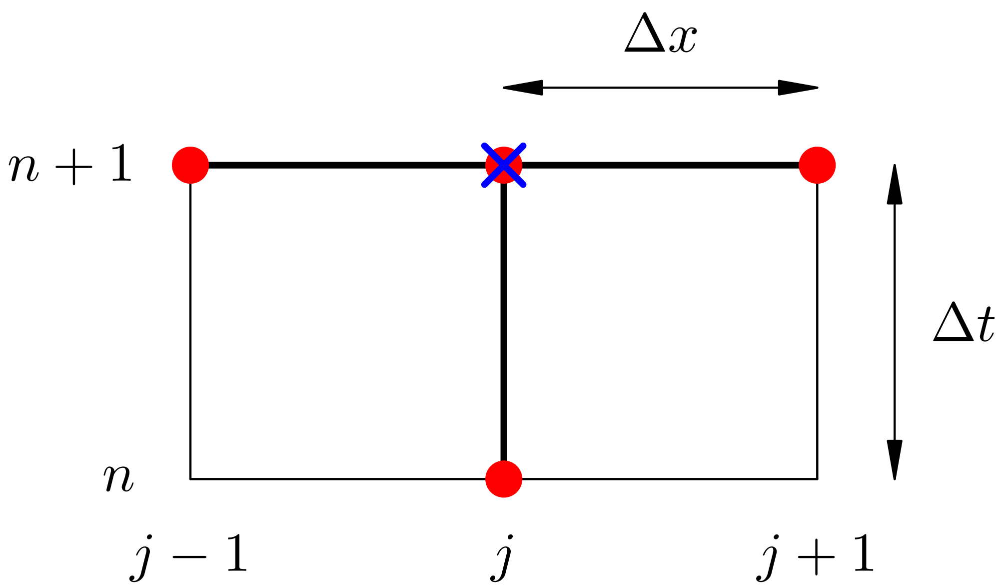
- eksplicitna metoda katkad neugodna za upotrebu.

Razlog: moramo uzeti jako mali vremenski korak Δt, da dobijemo konvergenciju.

Primjer. Ponašanje metode za $d = 0.4$ i $d = 0.6$.

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

Formula je ista kao i prije, samo u drugoj točki.

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

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

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

Implicitna metoda

Prethodnu diferencijsku shemu možemo zapisati kao

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

u svim unutarnjim čvorovima mreže.

Kad dodamo početni uvjet i rubne uvjete, za dani n,

- vrijednosti u_j^{n+1} u sljedećem vremenskom trenutku

dobivamo kao

- rješenje tridijagonalnog linearnog sustava jednadžbi.

Zato je ova shema implicitna i zove se

- implicitna Eulerova metoda.

Implicitna metoda

Lokalna greška diskretizacije jednadžbe je

$$d_j^n = -\frac{1}{2}\Delta t\,\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_j, t^{n+1}) - \frac{1}{12}\Delta x^2\,\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_j, t^{n+1})$$

$$+ O(\Delta t^2) + O(\Delta x^4),$$

Razlika obzirom na eksplicitnu metodu je samo u točki i prvom minusu. Zato je i implicitna shema konzistentna

Za razliku od ranije, može se pokazati da je implicitna metoda stabilna,

- za svaku vrijednost broja difuzije d, bez ograničenja,

što osigurava i konvergenciju metode.

Primjer. Ponašanje metode za $d = 0.4$ i $d = 1.0$.

ϑ shema

Kombiniranjem eksplicitne i implicitne Eulerove metode, s "težinskim" parametrom ϑ, uz $\vartheta \in [0, 1]$, dobivamo sljedeću diferencijsku shemu

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

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

Prethodna ϑ shema može se zapisati i ovako

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

Lako se vidi da je shema implicitna čim je $\vartheta \neq 0$, jer

- opet vodi na rješavanje tridijagonalnog linearnog sustava.

Lokalna greška diskretizacije jednadžbe je

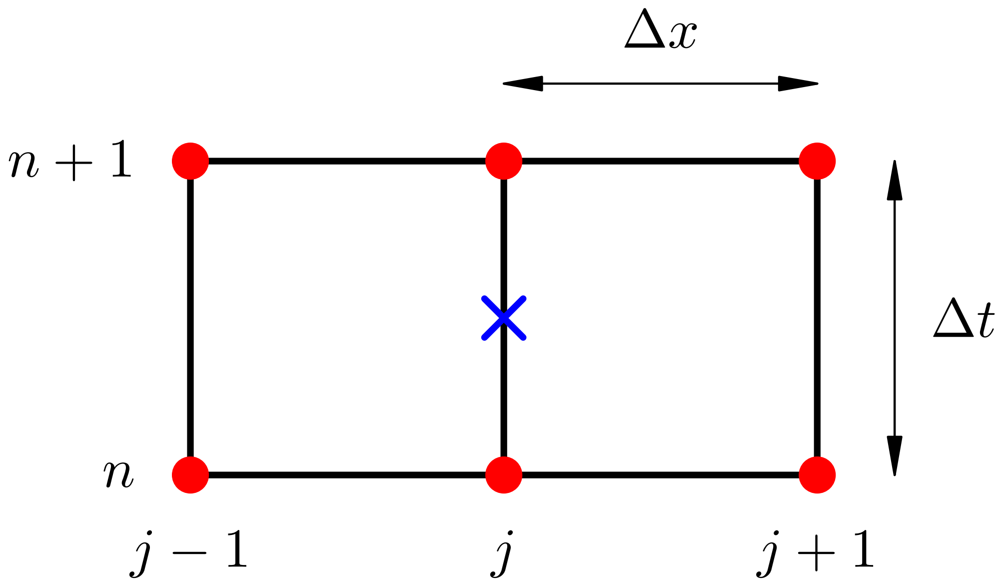
$$
d_j^n = -\left(\vartheta - \frac{1}{2}\right)\Delta t \, \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_j, t^{n+1}) - \frac{1}{12}\Delta x^2 \, \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_j, t^{n+1})
$$

$$
+ O(\Delta t^2) + O(\Delta x^4).
$$

Crank–Nicolson shema

Parametar ϑ možemo koristiti da bismo optimizirali točnost, odnosno, stabilnost sheme.

Pokazuje se da je najbolje uzeti $\vartheta = \frac{1}{2}$, tj. diskretizirati u "srednjoj" točki, po "predlošku"



Crank–Nicolson shema

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

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

Lokalna greška diskretizacije jednadžbe je

$$d_j^n = -\frac{1}{12}\Delta x^2 \,\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_j, t^{n+1}) + O(\Delta t^2) + O(\Delta x^4),$$

tj. dobivamo za jedan red točniju aproksimaciju u vremenskoj varijabli.

Crank–Nicolson shema

Može se pokazati da je Crank–Nicolson metoda stabilna,

- za svaku vrijednost broja difuzije d, bez ograničenja,

(kao i implicitne metode), što osigurava i konvergenciju metode.

Primjer. Ponašanje metode za $d = 0.4$ i $d = 1.0$.

Metode za nelinearni oblik jednadžbe

Nelinearni oblik paraboličke jednadžbe je

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

Funkcija D može ovisiti o rješenju u, ili direktno o x i t.

Napomena. U jednadžbi difuzije je f ovisio samo o x. Da "skratimo" pisanje formula, uzimamo da je $f(x,t) = 0$.

Vremensku derivaciju diskretiziramo kao i ranije.

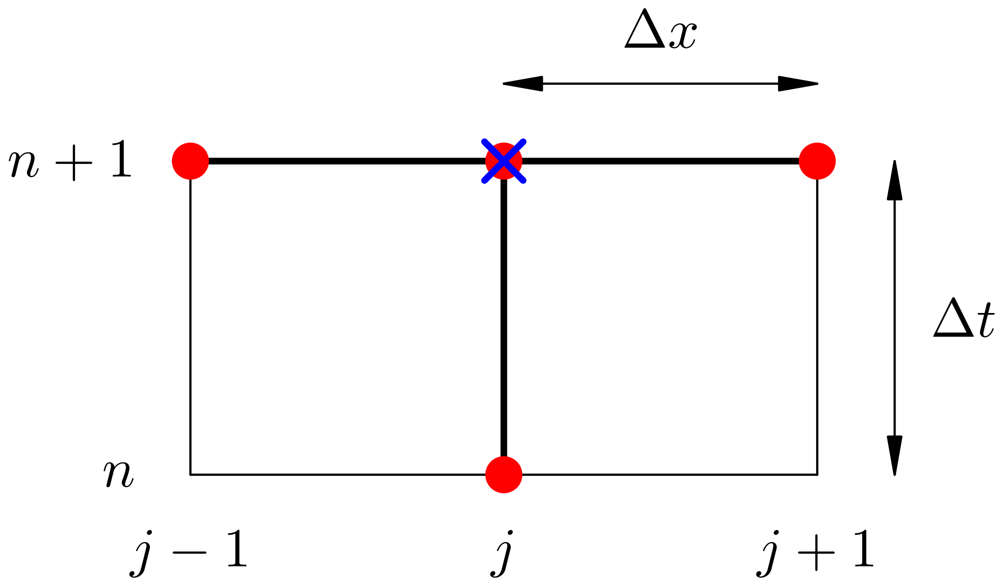
Za prostornu koristimo simetrične centralne razlike.

Oznake za diskretizirane vrijednosti funkcije D

$$D_j^n := D(u(x_j, t^n)) = D(u_j^n), \qquad D_j^n := D(x_j, t^n).$$

Implicitna metoda

Kod implicitne metode diskretizacija jednadžbe vrši u (unutarnjoj) točki domene (x_j, t^{n+1}), po “predlošku”



Implicitna metoda

Derivaciju po vremenu diskretiziramo razlikom unazad

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

Prostornu derivaciju zamijenimo simetričnom centralnom razlikom, u sljedećem vremenskom trenutku

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(D(u)\,\frac{\partial u}{\partial x}\right)(x_j, t^{n+1}) \approx$$

$$\approx \frac{D_{j+1/2}^{n+1} u_{j+1}^{n+1} - (D_{j+1/2}^{n+1} + D_{j-1/2}^{n+1}) u_j^{n+1} + D_{j-1/2}^{n+1} u_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2}.$$

Implicitna metoda

Time smo dobili diferencijsku shemu

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

Ovu diferencijsku shemu možemo zapisati kao

$$u_j^{n+1} - d\Big(D_{j+1/2}^{n+1} u_{j+1}^{n+1} - (D_{j+1/2}^{n+1} + D_{j-1/2}^{n+1}) u_j^{n+1} + D_{j-1/2}^{n+1} u_{j-1}^{n+1}\Big) = u_j^n,$$

u svim unutarnjim čvorovima mreže.

Implicitna metoda

Kad dodamo početni uvjet i rubne uvjete, za dani n,

- vrijednosti u_j^{n+1} u sljedećem vremenskom trenutku

opet dobivamo kao

- rješenje tridijagonalnog linearnog sustava jednadžbi.

Koeficijenti sustava ovise o prostoru i vremenu.