0.1 Numerické metódy

V predošlých častiach sme videli použitie metódy separácie premenných na hľadanie riešení niektorých PDR na geometricky pomerne jednoduchých oblastiach. V prípade, že oblasť v ktorej hľadáme riešenie je zložitejšia táto metóda nie je veľmi použiteľná. V zložitejších prípadoch sa preto používajú numerické metódy hľadania riešení PDR. Predstavíme si dve základné – metódu konečných diferencií a metódu konečných prvkov.

Metóda konečných diferencií

Myšlienka metódy konečných diferencií vychádza z aproximácie derivácie diferenciami. Definičný obor funkcie rozdelíme na konečný počet úsekov (zvyčajne) rovnakej dĺžky Δx. Existuje viacero spôsobov ako aproximovať deriváciu diferenciami:

1. Dopredná diferencia

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}$$

2. Spätná diferencia

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x}$$

3. Centrovaná diferencia (v princípe aritmetický priemer doprednej a spätnej diferencie)

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0 - \Delta x)}{2\Delta x}$$

V prípade derivácií vyšších rádov s využitím aproximácií pre $f'(x_0 + \Delta x)$ a $f'(x_0 - \Delta x)$ vieme získať aproximáciu druhej derivácie

$$f''(x_0) \approx \frac{f(x_0 + \Delta x) - 2f(x_0) + f(x_0 - \Delta x)}{(\Delta x)^2}.$$

Podobne môžeme aproximovať aj parciálne derivácie, napríklad pre funkciu dvoch premenných $u(x, y)$ a centrovanú diferenciu dostávame.

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_0, y_0) \approx \frac{u(x_0 + \Delta x, y_0) - u(x_0 - \Delta x, y_0)}{2\Delta x}$$
$$\frac{\partial u}{\partial y}(x_0, y_0) \approx \frac{u(x_0, y_0 + \Delta y) - u(x_0, y_0 - \Delta y)}{2\Delta x}$$

S využitím aproximácie druhej derivácie vieme potom aproximovať aj Laplacov operátor aplikovaný na funkciu $u(x, y)$

$$\nabla^2 u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \approx \frac{u(x_0 + \Delta x, y_0) - 2u(x_0, y_0) + u(x_0 - \Delta x, y_0)}{(\Delta x)^2} + \frac{u(x_0, y_0 + \Delta y) - 2u(x_0, y_0) + u(x_0, y_0 - \Delta y)}{(\Delta y)^2}$$

V prípade, že $\Delta x = \Delta y$, uvedenú aproximáciu možno prepísať na tvar

$$\nabla^2 u \approx \frac{u(x_0 + \Delta x, y_0) + u(x_0 - \Delta x, y_0) + u(x_0, y_0 + \Delta y) + u(x_0, y_0 - \Delta y) - 4u(x_0, y_0)}{(\Delta x)^2}$$

Princíp použitia na riešenie PDR je v princípe jednoduchý. Derivácie sa nahradia diferenciami, a namiesto parciálnej diferenciálnej rovnice dostaneme parciálnu diferenčnú rovnicu. Z nej potom odvodíme numerickú schému. Postup si ukážeme na príklade jednorozmernej rovnice vedenia tepla na intervale $(0, L)$.

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ u(0, t) &= 0, \\ u(L, t) &= 0, \\ u(x, 0) &= f(x). \end{aligned}$$

Keďže u je funkcia dvoch nezávislých premenných x a t, zvolíme dĺžku delenia Δx a Δt aj pre x aj pre t. Zrejme by sme chceli Δx a Δt čo najmenšie avšak uvidíme, že voľba príliš malých hodnôt pre dĺžky úsekov môže spôsobiť neprimerané predĺženie doby výpočtu.

Ak použijeme doprednú diferenciu na aproximáciu časovej derivácie, parciálnu diferenciálnu rovnicu aproximujeme

$$\frac{u(x_0, t_0 + \Delta t)}{\Delta t} \approx k \frac{u(x_0 + \Delta x, t_0) - 2u(x_0, t_0) + u(x_0 - \Delta x, t_0)}{\Delta x} \tag{1}$$

Ak rozdelíme interval $(0, L)$ rovnomerne na N rovnakých úsekov, hodnota Δx bude

$$\Delta x = \frac{L}{N}.$$

Označme potom $x_j = j\Delta x$.

Vývoj teploty budeme počítať v nejakom časovom úseku, ktorý tiež diskretizujeme, t.j. budeme počítať teplotu v konkrétnych časoch $t_m = m\Delta t$.

Budú nás teda zaujímať hodnoty $u(x_j, t_m)$. Označme $u(x_j, t_m) = u_j^{(m)}$. Potom ak prepíšeme (1) v novom značení a nahradíme $\approx$ symbolom $=$, dostaneme parciálnu diferenčnú rovnicu

$$\frac{u_j^{(m+1)} - u_j^{(m)}}{\Delta t} = k\frac{u_{j+1}^{(m)} - 2u_j^{(m)} + u_{j-1}^{(m)}}{\Delta x}$$

a začiatočnú podmienku a okrajové podmienky môžeme prepísať ako

$$\begin{aligned} u_j^{(0)} &= f(x_j), \qquad j = 0, 1, 2, \ldots, N \\ u_0^{(m)} &= 0, \text{ pre každé } m \\ u_N^{(m)} &= 0, \text{ pre každé } m. \end{aligned}$$

V diferenčnej rovnici si môžeme všimnúť, že hodnotu teploty v čase t_{m+1} v bode x_j vieme spočítať z hodnôt teplôt v čase t v bodoch x_{j-1}, x_j a x_{j+1}, teda po úprave

$$\begin{aligned} u_j^{(m+1)} &= u_j^{(m)} + s(u_{j+1}^{(m)} - 2u_j^{(m)} + u_{j-1}^{(m)}) \\ &= su_{j-1}^{(m)} + (1-2s)u_j^{(m)} + su_{j+1}^{(m)}, \end{aligned} \tag{2}$$

pričom

$$s = k\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \tag{3}$$

Z toho potom dostávame, že

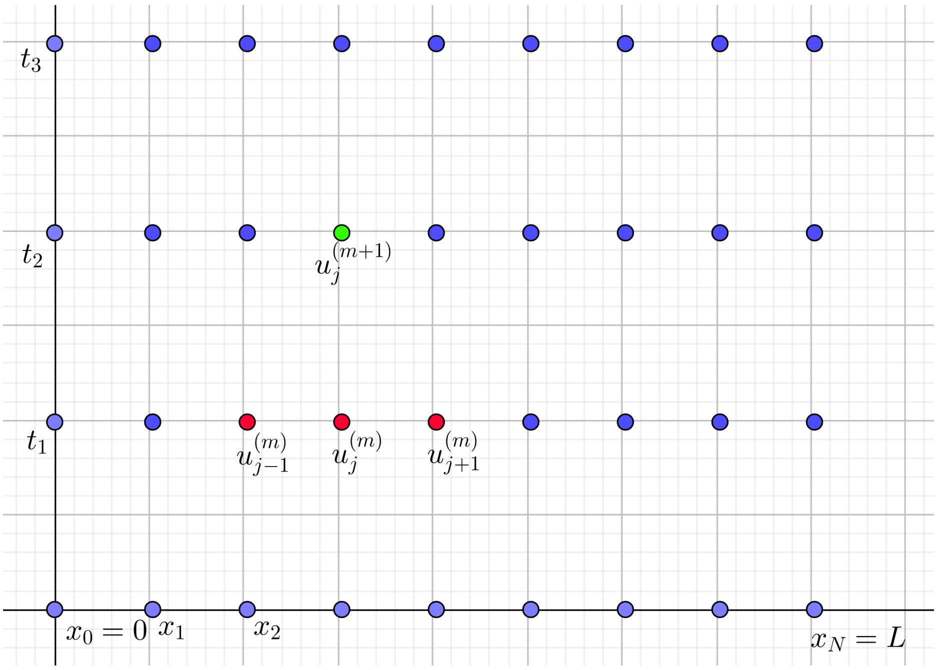
$$\Delta t = \frac{s(\Delta x)^2}{k},$$

čiže hodnota parametra s určuje dĺžku úseku delenia časovej premennej. V prípade nami získanej schémy musí $s \leq \frac{1}{2}$, v opačnom prípade je schéma nestabilná a nezískame riešenie. Taktiež si môžeme všimnúť, že Δt závisí priamo úmerne od druhej mocniny Δx. Takže ak máme husté delenie priestorovej premennej, potrebujeme zvoliť Δt veľmi malé, napríklad pre $\Delta x = 0,001$ je $\Delta t = 0,000001s/k$ takže aby sme získali rozumné riešenie, daný časový úsek budeme musieť rozdeliť na veľmi veľa častí, čo spomaľuje výpočet

Vyjadrenie (2) umožňuje vytvoriť maticovú reprezentáciu uvedenej schémy. Ak vytvoríme stĺpcový vektor z hodnôt $u_j^{(m)}$, $j = 1, \ldots, N-1$ ako stĺpcový vektor $U^{(m)}$, potom stĺpcový vektor $U^{(m+1)}$ s hodnotami $u_j^{(m+1)}$, $j =$

$1, \ldots, N-1$ dostaneme vynásobením prvého vektora štvorcovou trojdiagonálnou maticou, s $1-2s$ na diagonále a s nad a pod diagonálou.

$$A = \begin{pmatrix} 1-2s & s & 0 & \cdots & 0 \\ s & 1-2s & s & \cdots & 0 \\ 0 & s & 1-2s & \cdots & 0 \\ & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & s & 1-2s \end{pmatrix}$$



Obr. 1: Hodnota $u_j^{(m+1)}$ sa spočíta ako vhodná kombinácia hodnôt $u_{j-1}^{(m)}$, $u_j^{(m)}$, $u_{j+1}^{(m)}$, teda ak poznáme hodnotu teploty v čase t_m pre tri susedné body, vieme spočítať teplotu v čase t_{m+1} pre jeden bod.

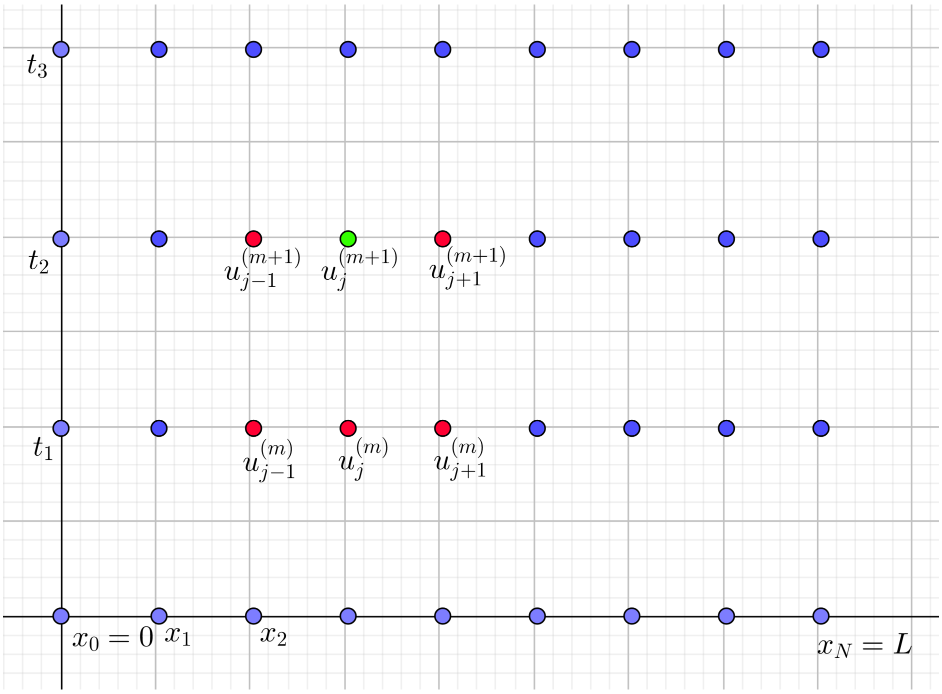
Potom riešenie v každom (diskrétnom) čase je možné nájsť pohodlne pomocou násobenia uvedenou maticou

$$U^{(1)} = AU^{(0)}, \qquad U^{(2)} = AU^{(1)} = A^2U^{(0)}, \cdots$$

Vyššie sme spomenuli, že nevýhodou tejto schémy je nestabilita pri zlej voľbe s (resp. Δt). Jednou zo schém, ktoré týmto neduhom netrpia je Crankova-Nicholsonova schéma, ktorá má tvar

$$\frac{u_j^{(m+1)} - u_j^{(m)}}{\Delta t} = \frac{k}{2} \left[\frac{u_{j+1}^{(m)} - 2u_j^{(m)} + u_{j-1}^{(m)}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{j+1}^{(m+1)} - 2u_j^{(m+1)} + u_{j-1}^{(m+1)}}{(\Delta x)^2} \right]$$

Ak tu označíme opäť $s = k\Delta t/(\Delta x)^2$ tak táto schéma je stabilná pre každé s. Nevýhodou je zložitejší výpočet, pretože na získanie hodnôt v čase t_{m+1} je nutné počítať systém lineárnych rovníc



Obr. 2: Na výpočet hodnoty $u_j^{(m+1)}$ (zelený bod) je potrebné poznať hodnoty v červených bodoch. Keďže ale hodnoty v čase t_{m+1} nepoznáme, z tejto schémy získame $N-2$ rovníc s $N-2$ neznámymi (okrajové podmienky v x_0 a x_N poznáme, preto $N-2$) a ich riešením získame hodnoty u v čase t_{m+1}.

Literatúra

[1] Richard Haberman: *Applied partial differential equations with Fourier series and boundary value problems*, Pearson Education Inc., 2013.