Numerično reševanje parcialnih diferencialnih enačb (1)

Uvod:

- Vseskozi bomo uporabljali standardno oznako PDE (parcialna diferencialna enačba (na srečo je ista tudi v angleščini)).

- Kaj opisujejo PDE?
  - matematične probleme,
  - fizikalne pojave,
  - tehnične probleme,
  - ekonomske, finančne, biološke, družbene probleme,
  - ⋮

- Osredotočili se bomo na tri pomembne modelne enačbe matematične fizike (eliptična, parabolična in hiperbolična).

- Postopki bodo uporabni tudi za druge tipe PDE.

· Splošni problem za eno PDE:

- $\mathcal{L} : \mathcal{C}^m(D) \to \mathcal{C}(D)$ parcialni diferencialni operator skupnega reda m (skupni najvišji odvod je reda m), (D odprta povezana (ne nujno enostavno povezana) podmnožica v $\mathbb{R}^d$.
- Iščemo skalarno polje $u : D \to \mathbb{R}$, da je $\mathcal{L}u = 0$ in u zadošča nekim dodatnim pogojem.

Primeri:

a) Problemi ravnotežja: iščemo $u \in \mathcal{C}^m(D)$, da je

$$(\mathcal{L}u)(x) = 0, \quad x \in D,$$
$$(Ru)(x) = 0, \quad x \in \partial D,$$

ali krajše $\mathcal{L}u = 0$, $Ru = 0$!!!

pri čemer je ∂D rob zaprtja $\overline{D}$ in $Ru = 0$ predstavlja robne pogoje.

Taki primeri se pojavijo pri določanju stacionarnega viskoznega toka, pri stacionarni temperaturi, pri stacionarni porazdelitvi napetosti...

Klasičen primer je konzervativno električno polje v $\mathbb{R}^3$:

$$-\Delta \phi = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad \text{na } D \subseteq \mathbb{R}^3$$

$$(R\phi) = 0 \quad \text{na } \partial D$$

ϕ je potencial (V)

$\Delta \phi = \phi_{xx} + \phi_{yy} + \phi_{zz}$, ρ je gostota naboja (As/m^3), ε_0 – električna konstanta

$\varepsilon_0 = 8{,}85 \cdot 10^{-12}\ F/m$

Od tod dobimo električno polje $E = -\nabla \phi$, ∇ – gradient

Problemi te vrste sodijo v eliptične parcialne diferencialne enačbe, ki so posplošitev robnih problemov pri navadnih diferencialnih enačbah

b) Problemi širjenja, prenašanja, razvoja, ...

Tukaj je ena od spremenljivk v $x \in \tilde{D} \subseteq \mathbb{R}^{d+1}$ časovna komponenta ki opazujemo kaj se dogaja s skalarnim poljem u v času $t \in (0, T)$

PDE se glasi

$$\mathcal{L}u = 0, \quad (t, x) \in (0, T) \times D$$

Včasih lahko vodilni odvod po t (času) eksplicitno izrazimo in dobimo

$$\frac{\partial u}{\partial t} = u_t = \mathcal{L}u, \quad (t, x) \in (0, T) \times D,$$

ali

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = u_{tt} = \mathcal{L}u, \quad (t, x) \in (0, T) \times D$$

z robnimi pogoji $\mathcal{R}u = 0, \ (t, x) \in (0, T) \times \partial D$

ter z začetnimi pogoji $\mathcal{I}u = 0, \ t = 0, \ x \in \overline{D}$

Klasičen primer je širjenje toplote:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda_x \frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\lambda_y \frac{\partial T}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda_z \frac{\partial T}{\partial z}\right)$$

$$+ I(x, y, z, t) = C \frac{\partial T}{\partial t}$$

I – notranji izvor toplote

$\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$ – koeficienti prevodnosti v koordinatnih oseh

$C = \rho \cdot c_p$ – ρ gostota, c_p – specifična toplota

T – temperatura.

Med take probleme sodijo: določanje pritiska v nestacionarni tekočini, širjenje toplote, nihanje, valovno gibanje ..., elektromagnetni pojavi, ...

PDE je <u>linearna</u>, če je linearen operator $\mathcal{L}$ in dodatni pogoji.
Če nastopajo linearno le najvišji odvodi, ne pa tudi tisti nižjega reda, je enačba <u>kvazilinearna</u>.

Klasifikacija PDE drugega reda

· Privzemimo, da je PDE drugega reda linearna v najvišjih odvodih (omejimo se na $d=2$, $\mathcal{L}: \mathcal{C}^2(D) \to \mathcal{C}(D)$, $D \subseteq \mathbb{R}^2$):

$$(*) \quad \mathcal{L}u = a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + e = 0.$$

· Funkcije a, b, c in e so dovolj gladke in odvisne od $x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}$ ter $\frac{\partial u}{\partial y}$.

- Označimo:

$$p = \frac{\partial u}{\partial x} \text{ i } q = \frac{\partial u}{\partial y}, \; r = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \; s = \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}$$

$$t = \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}.$$

- Računajmo:

$$dp = \frac{\partial p}{\partial x} dx + \frac{\partial p}{\partial y} dy = r dx + s dy,$$

$$dq = \frac{\partial q}{\partial x} dx + \frac{\partial q}{\partial y} dy = s dx + t dy.$$

Sledi

$$r = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{dp - s dy}{dx} = \frac{dp}{dx} - \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \frac{dy}{dx}$$

$$t = \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{dq - s dx}{dy} = \frac{dq}{dy} - \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \frac{dx}{dy}$$

Vstavimo v $(*)$:

$$a\left(\frac{dp}{dx} - \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \frac{dy}{dx}\right) + b \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}$$

$$+ c\left(\frac{dq}{dy} - \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \frac{dx}{dy}\right) + e = 0$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\left(-a\frac{dy}{dx} + b - c\frac{dx}{dy}\right)$$

$$+\left(a\frac{dp}{dx} + c\frac{dq}{dy} + e\right) = 0 \quad \Big/ \left(-\frac{dy}{dx}\right)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\left(+a\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 - b\frac{dy}{dx} + c\right)$$

$$-\left(a\frac{dp}{dx}\frac{dy}{dx} + c\frac{dq}{dy}\frac{dy}{dx} + e\cdot\frac{dy}{dx}\right) = 0$$

Značaj PDE se spreminja tam, kjer se "izgubijo" najvišji odvodi, torej, ko je

$$a\left(\frac{dy}{dx}\right)^2 - b\frac{dy}{dx} + c = 0$$

Če je $a\lambda^2 - b\lambda + c = 0$, potem imamo smer krivulje, vzdolž katere rešitev PDE zadošča navadni DE za $p = \frac{\partial u}{\partial x}$ in $q = \frac{\partial u}{\partial y}$:

$$a\frac{dp}{dx}\frac{dy}{dx} + c\frac{dq}{dx} + e\frac{dy}{dx} = 0$$

Takim krivuljam rečemo karakteristike.

- Tip enačbe pa je odvisen od tipa kvadratne enačbe $a\lambda^2 - b\lambda + c = 0$. Glede na tip rešitev te enačbe ločimo:
  - eliptični tip: $b^2 - 4ac < 0$,
  - parabolični tip: $b^2 - 4ac = 0$,
  - hiperbolični tip: $b^2 - 4ac > 0$.

Modelni zgledi:

1) Poissonova enačba oblike

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f$$

je eliptičnega tipa ($a = 1$, $b = 0$, $c = 1$ in $b^2 - 4ac = -4 < 0$)

2) Difuzijska enačba ($d = 1$)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \gamma^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$ je paraboličnega tipa ($a = b = 0$ („prva" spremenljivka je t, „druga" je x), $c = -\gamma^2$, $b^2 - 4ac = 0$).

(3) Valovna enačba v eni dimenziji (9)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \gamma^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$ je hiperbolična

$(a = 1, b = 0, c = -\gamma^2, \; b^2 - 4ac = 4\gamma^2 > 0)$.

Zgornje enačbe zlahka zapišemo

Andi v treh dimenzijah:

- $$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = f$$
- $$\frac{\partial u}{\partial t} = \gamma^2 \Delta u$$
- $$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \gamma^2 \Delta u.$$

Za prehod v splošno dimenzijo

potrebujemo primeren zapis.

Oglejmo si primer splošne linearne

enačbe eliptičnega tipa reda $2m$:

$$\mathcal{L} u = f \text{ na } D \subseteq \mathbb{R}^d,$$

kjer je

$$\mathcal{L} := \sum_{|\alpha|+|\beta|\le 2m} (-1)^{|\alpha|} D^{\alpha} a_{\alpha,\beta}(x) D^{\beta}.$$

Tukaj sta $\alpha := (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_d) \in \mathbb{N}^d$,

$$\beta := (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_d) \in \mathbb{N}^d$$

multiindeksa in $|\alpha| = \sum_{i=1}^{d} \alpha_i$,

$$D^{\alpha} := \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{\alpha_1} \partial x_2^{\alpha_2} \dots \partial x_d^{\alpha_d}}$$

Za eliptičnost $\mathcal{L}$ zahtevamo še

pozitivnost, torej

$$\sum_{|\alpha|+|\beta|=2m} a_{\alpha,\beta}(x)\, y^{\alpha+\beta} > 0, \quad x \in D, \; y \in \mathbb{R}^d, \; y \neq 0.$$

Pri tem velja dogovor

$$y^{\gamma} = y_1^{\gamma_1} y_2^{\gamma_2} \dots y_d^{\gamma_d}$$

Numerične metode in diskretizacija

- Numerični pristop zahteva primerno diskretizacijo.
- Najpogostejše metode:
  - diferenčna metoda,
  - metoda končnih elementov,
  - kolokacija in posplošitve; Galerkinove metode,
  - metoda robnih elementov.

Diferenčna metoda:

- Privzemimo enačbo

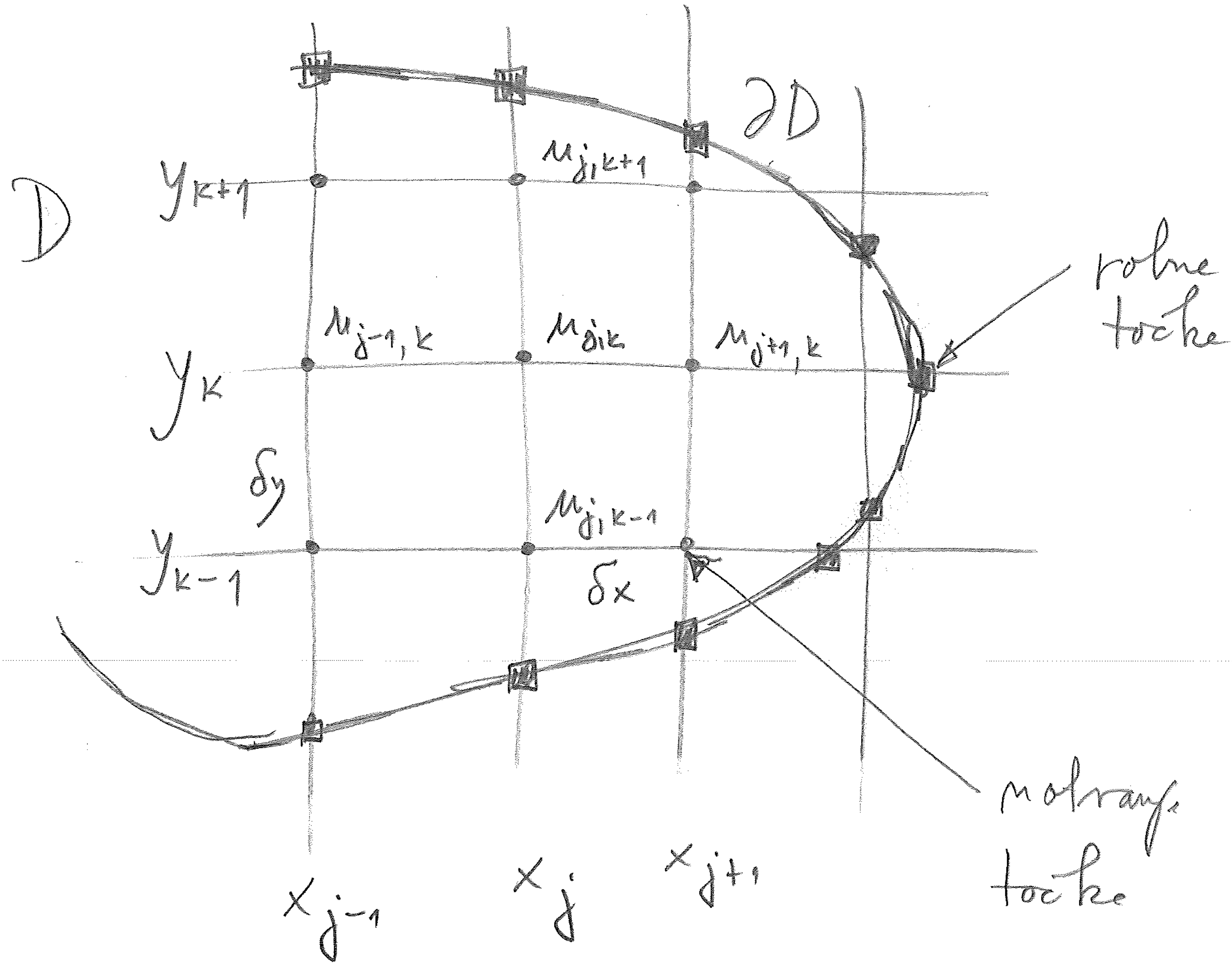
$$\mathcal{L}u = 0 \quad \text{na } D,$$

$$\mathcal{R}u = 0 \quad \text{na } \partial D.$$

- Pri diferenčni metodi območje najprej diskretiziramo (ponavadi ekvidistantno razdelimo v vsaki koordinatni smeri).

Izberemo t.i. koordinatne premice (12)

$x_j = x_0 + j\,\delta_x$, $y_k = y_0 + k\,\delta_y$, ...



$u_{jk} \approx u(x_j, y_k)$ ... numerični približek za rešitev v točki (x_j, y_k).

· Točke, ki so presečišča koordinatnih premic in ležijo v D, predstavljajo diskretno aproksimacijo D_δ območja D.

- Točke diskretnega roba označimo z ∂D_δ.

Točkam diskretne aproksimacije (x_j, y_k) pridružimo neznanke $u_{j,k}$ in zanje zapišemo „smiselne enačbe".

- V $\mathcal{L}$ nastopajo parcialni odvodi, za njihovo aproksimacijo pa smiselno uporabimo naslednji izrek za aproksimacijo odvodov funkcij ene spremenljivke:

<u>Izrek</u>: Naj bo $f \in C^{n+r+1}([a,b])$ in naj bodo $x = (x_i)_{i=0}^{n}$, $x_i \in [a,b]$, interpolacijske točke. Potem je

$$f^{(r)}(x) = p^{(r)}(x) + \sum_{k=0}^{r} \frac{r!}{k!}\, \omega^{(k)}(x) \cdot$$

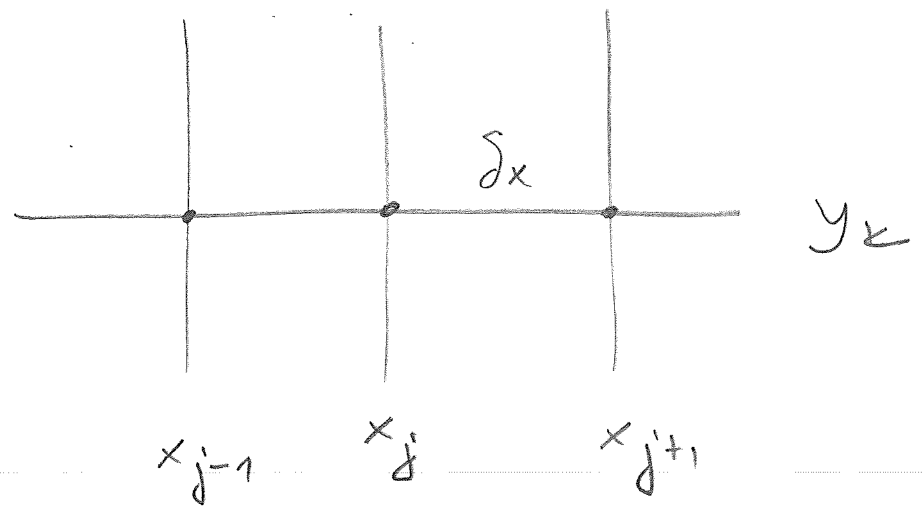
$\omega(x) = (x-x_0)\cdots(x-x_n)$

$$[x_0, x_1, \ldots, x_n, \overbrace{x, x, \ldots, x}^{r-k+1}]f, \quad x \in [a,b]$$ in

je $p(x) = \sum_{i=0}^{n} (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_i)[x_0, \ldots, x_n]f$ interp. polinom.

<u>Primeri</u>: Kako aproksimiramo prve parcialne odvode?

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_j, y_k) = ?\,?$$



Več ekvivalentnih možnosti:

- metoda nedoločenih koeficientov,
- razvoj v Taylorjevo vrsto,
- <u>odvajanje interpolacijskega polinoma</u>.

Izberimo zadnjo možnost in pišimo

$$f(x) := u(x, y_k).$$

Zanima nas $f'(x_j) = \frac{\partial u}{\partial x}(x_j, y_k)$.

Za interpolacijske točke izberimo x_{j-1}, x_j, x_{j+1}. Interpolacijski polinom se zapiše (privzemimo oznako $f_j := f(x_j)$):

$$p(x) = f_{j-1} + (x - x_{j-1})[x_{j-1}, x_j]f + (x - x_{j-1})(x - x_j)[x_{j-1}, x_j, x_{j+1}]f$$

$$= f_{j-1} + (x - x_{j-1})\frac{f_j - f_{j-1}}{x_j - x_{j-1}} + (x - x_{j-1})(x - x_j)\frac{[x_j, x_{j+1}]f - [x_{j-1}, x_j]f}{x_{j+1} - x_{j-1}}$$

$$= f_{j-1} + (x - x_{j-1})\frac{f_j - f_{j-1}}{x_j - x_{j-1}} + (x - x_{j-1})(x - x_j)\frac{\frac{f_{j+1} - f_j}{x_{j+1} - x_j} - \frac{f_j - f_{j-1}}{x_j - x_{j-1}}}{x_{j+1} - x_{j-1}}$$

$$= f_{j-1} + (x - x_{j-1})\frac{f_j - f_{j-1}}{\delta x} + (x - x_{j-1})(x - x_j)\frac{f_{j+1} - 2f_j + f_{j-1}}{2\delta x^2}.$$

Omenjeni izrek nas pripelje do $(r=1)$ 16

$$f'(x) = \frac{\partial u}{\partial x}(x, y_k) = p'(x) +$$

$$\sum_{k=0}^{1} \frac{1!}{k!} \omega^{k}(x) [x_{j-1}, x_j, x_{j+1}, \overbrace{x, \dots, x}^{1-k+1}] f$$

$$= p'(x) + \omega(x) [x_{j-1}, x_j, x_{j+1}, x, x] f +$$

$$\omega'(x) [x_{j-1}, x_j, x_{j+1}, x] f.$$

Torej je $f'(x_j) = \frac{\partial u}{\partial x}(x_j, y_k) =$

$$p'(x_j) + \overbrace{\omega(x_j)}^{=0} [x_{j-1}, x_j, x_{j+1}, x, x] f$$

$$+ \omega'(x_j) [x_{j-1}, x_j, x_{j+1}, x] f$$

$$= \frac{f_j - f_{j-1}}{\delta x} + \cancel{\overbrace{(x_j - x_{j-1})}^{\delta x}} \frac{f_{j+1} - 2f_j + f_{j-1}}{2\delta x^{\cancel{2}}}$$

$$+ (x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1}) [x_{j-1}, x_j, x_{j+1}, x] f$$

$$= \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2\delta_x} - \delta_x^2 f^3(\xi)/3!$$

Torej je $\frac{\partial u}{\partial x}(x_j, y_k) \doteq \frac{u_{j+1,k} - u_{j-1,k}}{2\delta x}$

Podobno dobimo:

$$\frac{\partial u}{\partial y}(x_j, y_k) = \frac{u(x_j, y_{k+1}) - u(x_j, y_{k-1})}{2\delta y} + O(\delta y^2)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, y_k) = \frac{u(x_{j-1}, y_k) - 2u(x_j, y_k) + u(x_{j+1}, y_k)}{\delta x^2} + O(\delta x^2)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x_j, y_k) = \frac{u(x_j, y_{k+1}) - 2u(x_j, y_k) + u(x_j, y_{k-1})}{\delta y^2} + O(\delta y^2)$$

Od tod sledi diskretna aproksimacija Laplaceovega operatorja

$$\Delta u(x_j, y_k) = \frac{u(x_{j-1}, y_k) - 2u(x_j, y_k) + u(x_{j+1}, y_k)}{\delta x^2} + \frac{u(x_j, y_{k-1}) - 2u(x_j, y_k) + u(x_j, y_{k+1})}{\delta y^2} + O(\delta x^2 + \delta y^2).$$

Če je $\delta x = \delta y = h$, sledi

$$\Delta u(x_j, y_k) = \frac{1}{h^2}\Big(u(x_{j-1}, y_k) + u(x_{j+1}, y_k) + u(x_j, y_{k-1}) + u(x_j, y_{k+1}) - 4u(x_j, y_k)\Big) + O(h^2).$$

- Kako aproksimiramo mešane odvode?

Omenjenega izraza ne moremo več uporabiti.
Lahko pa uporabimo ideje iz ene dimenzije:

Izberimo Lagrangeovo bazo na točkah $x_j, x_{j\pm1}, x_{j\pm2}, \dots$, torej

$$\ell_j(x), \ell_{j\pm1}(x), \dots$$

Podobno izberimo Lagrangeovo bazo na točkah $y_k, y_{k\pm1}, y_{k\pm2}, \dots$, torej

$$\ell_k(y), \ell_{k\pm1}(y), \dots$$

Definirajmo

$$p(x,y) := \sum_{r,s} u(x_{j\pm r}, y_{k\pm s})\, \ell_{j\pm r}(x)\, \ell_{k\pm s}(y)$$

Velja: $p(x_{j\pm r}, y_{k\pm s}) = u(x_{j\pm r}, y_{k\pm s})$

- Polinom p odvajamo in v odvod vstavimo točko, za katero želimo diferenčno aproksimacijo.
- Okrnitveno napako dobimo z razvojem aproksimacij v Taylorjevo vrsto.

Primer: Simetrična diferenca mešanega odvoda $\dfrac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}(x, y)$ na točkah $x_{j-1}, x_j, x_{j+1}, y_{k-1}, y_k, y_{k+1}$.

Očitno je interpolacijski polinom parabola v vseh spremenljivkah. Spomnimo se:

$$l_{j-1}(x) = \frac{(x - x_j)(x - x_{j+1})}{(x_{j-1} - x_j)(x_{j-1} - x_{j+1})} = \frac{(x - x_j)(x - x_{j+1})}{+2\delta_x^2}$$

$$l_j(x) = \frac{(x - x_{j-1})(x - x_{j+1})}{-\delta_x^2}$$

$$l_{j+1}(x) = \frac{(x - x_{j-1})(x - x_j)}{2\delta_x^2}$$

Podobno je

$$l_{k-1}(y) = \frac{(y-y_k)(y-y_{k+1})}{2\delta_y^2}$$

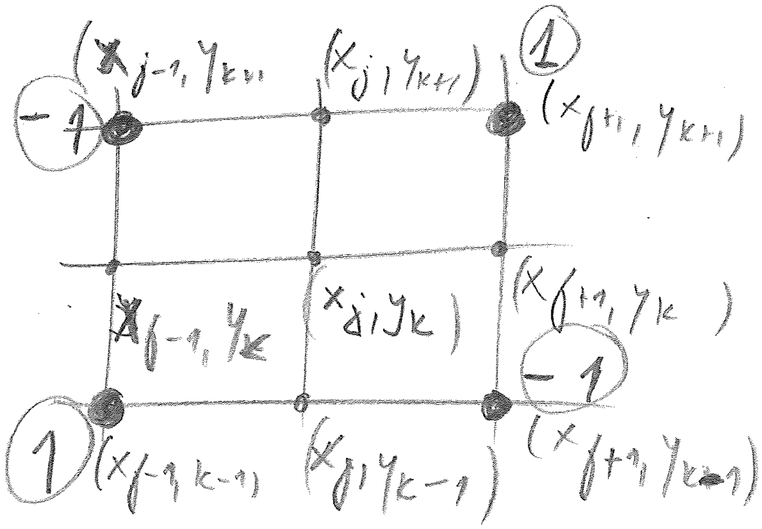
$$l_k(y) = \frac{(y-y_{k-1})(y-y_{k+1})}{-\delta_y^2}$$

$$l_{k+1}(y) = \frac{(y-y_{k-1})(y-y_k)}{2\delta_y^2}.$$

S kar nekaj računanja (pomagajte si z Mathematico!) dobimo

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x \partial y}(x_j, y_k) = \frac{u(x_{j-1}, y_{k-1}) - u(x_{j-1}, y_{k+1}) - u(x_{j+1}, y_{k-1}) + u(x_{j+1}, y_{k+1})}{4\delta_x \delta_y}$$

$$+ \mathcal{O}(\delta_x^2 + \delta_y^2)$$



Kako utemeljimo okrnitveno napako aproksimacije?

V diferenčno aproksimacijo vstavimo

$$x_{j\pm1} = x_j \pm \delta_x \quad , \quad y_{k\pm1} = y_k \pm \delta_y$$

in razvijemo v Taylorjevo vrsto kot funkcijo dveh spremenljivk.

Z nekaj računanja (vaji?!) dobimo

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}(x_j, y_k) + \frac{1}{6}\left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^3 \partial y}(x_j, y_k)\,\delta_x^2 + \frac{\partial^4 u}{\partial x \partial y^3}(x_j, y_k)\,\delta_y^2\right)$$

$$+ \mathcal{O}(\delta_x^2 \delta_y^2).$$

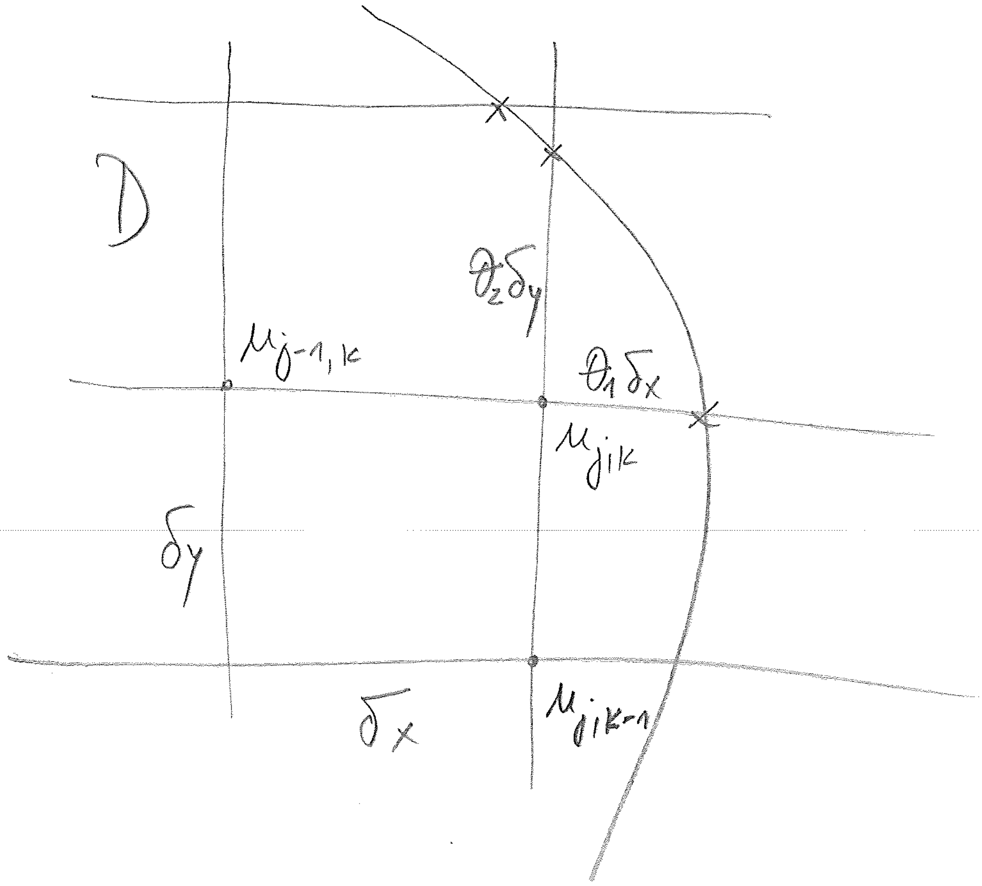
<u>Točke blizu roba!</u>

- te točke so posebne vsaj iz dveh razlogov:

  1) upoštevati moramo robne in začetne pogoje,

  2) zaradi oblike roba moramo pogosto uporabiti posebne aproksimacije.

Oglejmo si primer diskretne aproksimacije Laplaceovega operatorja v točki (x_j, y_k), ki ima za sosedi dve robni točki.



Denimo, da sta vrednosti

$u(x_j + \theta_1 \delta_x, y_k) = g_{j+\theta_1, k}$ in

$u(x_j, y_k + \theta_2 \delta_y) = g_{j, k+\theta_2}$ dani z robnimi pogoji. Izpeljemo pettočkovno nesimetrično aproksimacijo v točki (x_j, y_k):

(izpeljava na vajah)

$$\Delta u(x_j, y_k) =$$

$$2\,\frac{\theta_1 u(x_{j-1}, y_k) - (1+\theta_1)\,u(x_j, y_k) + u(x_j + \theta_1 \delta_x, y_k)}{\theta_1(1+\theta_1)\,\delta_x^2}$$

$$+2\,\frac{\theta_2 u(x_j, y_{k-1}) - (1+\theta_2)\,u(x_j, y_k) + u(x_j, y_k + \theta_2 \delta_y)}{\theta_2(1+\theta_2)\,\delta_y^2}$$

$$+\frac{1}{3}(1-\theta_2)\frac{\partial^3 u}{\partial y^3}(x_j, y_k)\,\delta_y + \frac{1}{3}(1-\theta_1)\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x_j, y_k)\,\delta_x$$

$$+\mathcal{O}(\delta_x^2 + \delta_y^2)$$

- Žal je taka napaka samo prvega reda!
- To pomeni, da oblika roba lahko vpliva na natančnost pri aproksimaciji PDE.
- Za diferenčne metode so najprimernejša pravokotna območja, pri drugačnih pa uporabljamo druge metode (recimo metodo končnih elementov).