

Numerisk løsning av PDL

Arne Morten Kvarving

Department of Mathematical Sciences
Norwegian University of Science and Technology

6. November 2007

Problem og framgangsmåte

- Fram til nå har vi sett på ordinære differensialligninger hvor løsningen kun avhenger av en fri variabel.
- Vi skal nå se på partielle differensialligninger - ligninger hvor løsningen avhenger av to (generelt flere) variable.
- Generelt format for andre ordens kvasilineær PDL i to variable:

$$au_{xx} + 2bu_{xy} + cu_{yy} = F(x, y, u_x, u_y)$$

Disse kan igjen kategoriseres i tre klasser.

Klassifisering av problem

- $ac - b^2 > 0$: Vi har en elliptisk ligning.
Eksempel: Laplace

$$\nabla^2 = 0, \quad (a = c = 1, b = 0)$$

- $ac - b^2 = 0$: Vi har en parabolisk ligning.
Eksempel: Varmeledningsligningen

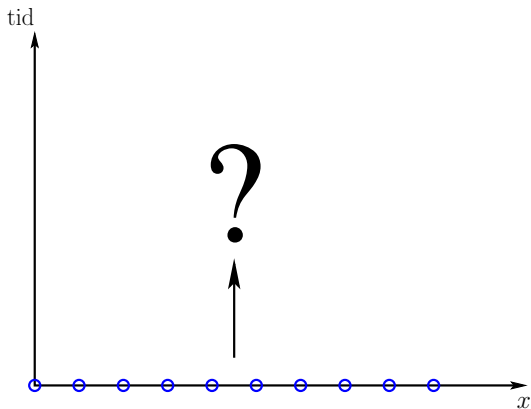
$$u_t = u_{xx}, \quad (a = 1, b = c = 0, F = u_t)$$

- $ac - b^2 < 0$: Vi har en hyperbolsk ligning.
Eksempel: Bølgeligningen

$$u_{tt} = u_{xx}, \quad (a = 1, b = 0, c = -1)$$

Disse er ikke pensum.

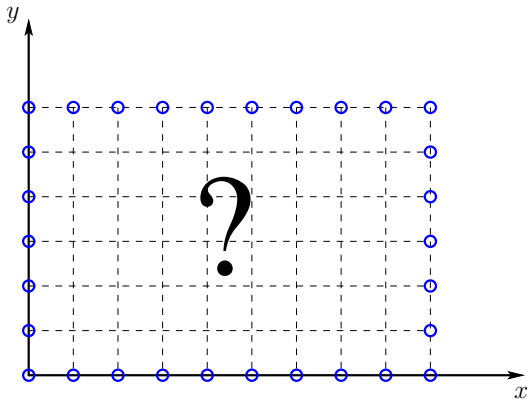
Klassifisering av problem



Initialverdiproblem - gitt en løsning ved $t = 0$ finn løsningen framover i tid.

Klassifisering av problem

- Vi ser nå på randverdiproblem:



Fundamental forskjell!

Klassifisering av problem

- Problemet nå er gitt verdiene rundt, finn verdiene inni området.
- To forskjellige typer randverdier vi kan få oppgitt er
 - Dirichlet randbetingelser: Gitt funksjon på randen. Disse er enkle å takle.
 - Neumann randbetingelser: Vet hva den deriverte er langs randen. Vanskeligere å takle, spesielt implementasjonsmessig. Ikke pensum. Et eksempel på slike problem er problem der vi har en gitt varmefluks over randen.

Framgangsmåte for numerisk løsning

- Vi innfører et grid og erstatter de deriverte i ligningen med numeriske tilnærminger. Når dette er gjort får vi et algebraisk ligningssystem som vi løser. Løsningen av dette systemet vil være vår tilnærming til løsningen *i gridpunktene*. Vi får altså ikke svar for punkt utenfor gridet vårt. Hvis vi trenger dette må vi ty til interpolasjon.
- Disse metodene kalles for differansemeter.
- Vanskelig å løse problem i irregulære geometrier.
- Fins andre metoder som gir deg løsning som er gyldig overalt og som takler irregulær geometri mye mer elegant - elementmetoden. Ikke pensum.

Hvordan tilnærme den deriverte numerisk

- Som vi har sett tidligere kan den deriverte tilnærmes ved

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i + h) - f(x_i)}{h} + \mathcal{O}(h)$$

Dette kalles for en foroverdifferanse. Den bruker usymmetriske punkt og er derfor ikke veldig nøyaktig.

- En bedre tilnærmelse får vi ved

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i + \frac{h}{2}) - f(x_i - \frac{h}{2})}{h} + \mathcal{O}(h^2).$$

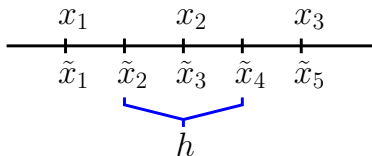
Denne er altså en orden høyere og grunnen til det er at vi velger punkt symmetrisk rundt x_i .

- Men vi skal bruke disse på et grid, og på gridet er ikke $x_i + \frac{h}{2}$. Så den er ikke egnet til å tilnærme den førstederiverte som den står. Men vi kan selvfølgelig bruke den skrittlengde $2h$, altså

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$

Hvordan tilnærme den deriverte numerisk

- Men formelen med skrittlengde h er likevel nyttig. Betrakt gridet



Vi får

$$f'(\tilde{x}_2) = \frac{f(\tilde{x}_3) - f(\tilde{x}_1)}{h}$$

$$f'(\tilde{x}_4) = \frac{f(\tilde{x}_5) - f(\tilde{x}_3)}{h}.$$

- Men hva skjer hvis vi vil tilnærme den dobbeltderiverte? Vi bruker samme formel, dvs

$$f''(x_2) = \frac{f'(\tilde{x}_4) - f'(\tilde{x}_2)}{h}$$

Hvordan tilnærme den deriverte numerisk

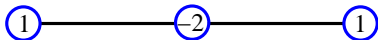
- Setter så inn uttrykkene for den deriverte.

$$\begin{aligned} f''(x_2) &= \frac{\left(\frac{f(\tilde{x}_3)-f(\tilde{x}_1)}{h}\right) - \left(\frac{f(\tilde{x}_5)-f(\tilde{x}_3)}{h}\right)}{h} \\ &= \frac{f(\tilde{x}_5) + f(\tilde{x}_1) - 2f(\tilde{x}_3)}{h^2} \end{aligned}$$

- Men punktene \tilde{x}_1 , \tilde{x}_3 og \tilde{x}_5 er nøyaktig de punktene som ligger på det virkelige gridet. Dette betyr at vi finner vår tilnærming til den andrederiverte som

$$f''(x_j) = \frac{f(x_{j+1}) + f(x_{j-1}) - 2f(x_j)}{h^2}.$$

- Slike differensialformler (derav navnet på metodene) representeres ofte som stensiler. Denne har stensil



Eksempel - 1D Poisson

- For å se hvordan dette virker i praksis skal vi betrakte den endimensjonale Poisson-ligningen

$$u_{xx} = \cos \frac{\pi x}{2} \quad \text{in } \Omega = (0, 1)$$

$$u(0) = 1$$

$$u(1) = 0.$$

- Vi innfører et grid, her med steglengde $h = 0.2$. Dette betyr at vi får seks gridpunkt hvor av to ligger på randen, og følgelig vet vi verdiene av disse.

Eksempel - 1D Poisson

- Vi går til verks som annonsert, det vi si vi erstatter de deriverte med numeriske tilnærminger og setter opp ligningen kun for gridpunktene. Dette gir

$$x = x_1 : \quad u_2 + u_0 - 2u_1 = h^2 \cos \frac{\pi h}{2}$$

$$x = x_2 : \quad u_3 + u_1 - 2u_2 = h^2 \cos \frac{\pi 2h}{2}$$

$$x = x_3 : \quad u_4 + u_2 - 2u_3 = h^2 \cos \frac{\pi 3h}{2}$$

$$x = x_4 : \quad u_5 + u_3 - 2u_4 = h^2 \cos \frac{\pi 4h}{2}$$

Eksempel - 1D Poisson

- Men vi vet at $u_0 = 1$ og at $u_5 = -1$ så vi kan sette inn dette:

$$x = x_1 : \quad u_2 - 2u_1 = h^2 \cos \frac{\pi h}{2} - 1$$

$$x = x_2 : \quad u_3 + u_1 - 2u_2 = h^2 \cos \frac{\pi 2h}{2}$$

$$x = x_2 : \quad u_4 + u_2 - 2u_3 = h^2 \cos \frac{\pi 3h}{2}$$

$$x = x_3 : \quad u_3 - 2u_4 = h^2 \cos \frac{\pi 4h}{2} - 0$$

Eksempel - 1D Poisson

- Vi kan nå skrive dette som et matrise-vektor system

$$\underline{A} \underline{u} = \underline{F}$$
$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & 1 & -2 & 1 & \\ & & 1 & -2 & \\ & & & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h^2 \cos \frac{\pi h}{2} - u_0 \\ h^2 \cos \frac{\pi 2h}{2} \\ h^2 \cos \frac{\pi 3h}{2} \\ h^2 \cos \frac{\pi 4h}{2} - u_5 \end{bmatrix}$$

- Vi legger merke til at matrisen \underline{A} blir tridiagonal. Grunnen til dette er selvfølgelig at en ligning kun kobler til de to punktene til hver side.
- Dette er struktur vi kan utnytte når vi skal løse systemet.

Fempunktsformelen

- Vi betrakter nå operatoren

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}.$$

- Som før innfører vi et grid med navngivning en *lokal* navngivning. Dette betyr at vi indekserer med to indekser, altså at

$$u_i^j = u(x_i, y_j)$$

For å lette notasjonen noe bruker vi samme steglengde h i både x og y retning.

Fempunktsformelen

- Vi tilnærmer de partiellderiverte ved differanser som før. Vi har altså

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

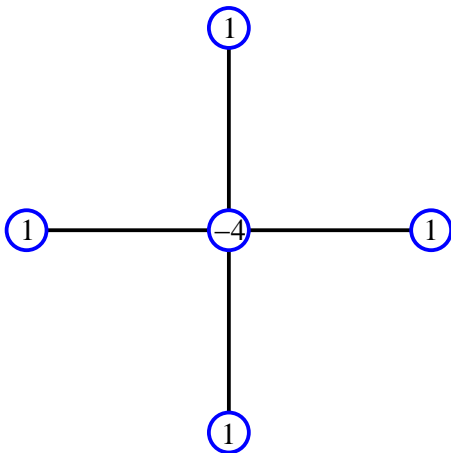
$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} u(x_i, y_j) \approx \frac{u_i^{j+1} - 2u_i^j + u_i^{j-1}}{h^2}$$

- Vi summerer disse og får den mye brukte *fempunktsformelen*

$$\nabla^2 u(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i+1}^j + u_{i-1}^j + u_i^{j+1} + u_i^{j-1} - 4u_i^j}{h^2}$$

Navnet har den fått fra det faktum at den bruker fem punkt til å tilnærme løsningen.

Fempunktsformelen



Dette er stensilen for fempunktsformelen.

Eksempel - 2D Poisson

- Vi betrakter nå ligningen

$$\nabla^2 u = f, \quad \text{in } \Omega = (0, 1) \times (0, 1)$$

$$u(x, 0) = g_1(x)$$

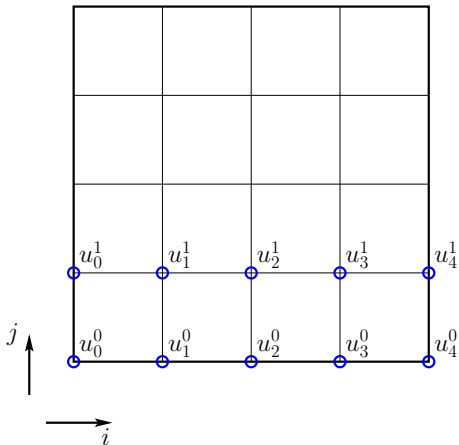
$$u(1, y) = g_2(y)$$

$$u(x, 1) = g_3(x)$$

$$u(0, y) = g_4(y)$$

- For å gjøre dette mest mulig oversiktlig anvender vi et grid med minimal størrelse for å få illustrert alle konseptene involvert. Dette betyr at vi må ha fem gridpunkt i hver retning som gir 9 ukjente totalt.

Eksempel - 2D Poisson

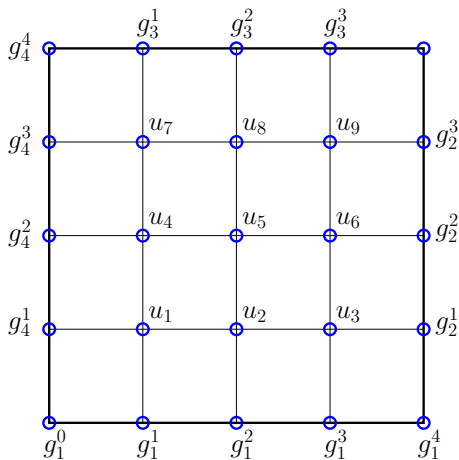


Vi nummererer hver node vha to indekser.

Eksempel - 2D Poisson

- Vi får tre klasser med noder
 - Noder som kobler til to randverdier - for eksempel node $(1, 1)$.
 - Noder som kobler til en randverdi - for eksempel node $(2, 1)$.
 - Noder som ikke kobler til noen randverdi - i dette tilfellet kun node $(2, 2)$.
- Vi vet at vi skal ende opp med et matrise-vektorsystem til slutt. Da er det fordelaktig å ha en annen nummerering som samsvarer med vektorkomponentene - en såkalt *global* navngivning.

Eksempel - 2D Poisson



Vi nummererer kun de faktisk ukjente suksessivt langs rader.

Eksempel - 2D Poisson

- Setter opp ligningen i node 1:

$$u_2 + g_4^1 + u_4 + g_1^1 - 4u_1 = h^2 f_1 \Rightarrow$$
$$-4u_1 + u_2 + u_4 = h^2 f_1 - g_4^1 - g_1^1 \quad \text{kobler 3 ukjente}$$

- Setter opp ligningen i node 2:

$$u_3 + u_1 + u_5 + g_1^2 - 4u_2 = h^2 f_2 \Rightarrow$$
$$u_1 - 4u_2 + u_3 + u_5 = h^2 f_2 - g_1^2 \quad \text{kobler 4 ukjente}$$

- Setter opp ligning i node 5:

$$u_2 + u_4 - 4u_5 + u_6 + u_8 = h^2 f_5 \quad \text{kobler 5 ukjente}$$

Eksempel - 2D Poisson

- Generelt betyr dette at
 - For den nederste og øverste raden har vi to noder av “type” 1.
 - Vi har en rad med noder av “type” 2 først og sist pga topp og bunnranden.
 - Med $N - 2$ noders mellomrom vil vi ha to noder av “type” 2 pga venstre og høyre rand. Unntaket her er første og siste rad siden disse elementene da er av “type” 1. Her er N antall noder i en retning.
 - Resten av nodene vil være av “type” 3.

Eksempel - 2D Poisson

$$\left[\begin{array}{ccc|cc}
 -4 & 1 & & 1 & & \\
 1 & -4 & 1 & & 1 & \\
 & 1 & -4 & & & 1 \\
 \hline
 1 & & & -4 & 1 & & 1 \\
 & 1 & & 1 & -4 & 1 & & 1 \\
 & & 1 & & 1 & -4 & & & 1 \\
 \hline
 & & & 1 & & & -4 & 1 & & \\
 & & & & 1 & & 1 & -4 & 1 & \\
 & & & & & 1 & & 1 & -4 &
 \end{array} \right] \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \\ u_7 \\ u_8 \\ u_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h^2 f_1 - g_4^1 - g_1^1 \\ h^2 f_2 - g_1^2 \\ h^2 f_3 - g_1^3 - g_2^1 \\ h^2 f_4 - g_2^2 \\ h^2 f_5 \\ h^2 f_6 - g_2^2 \\ h^2 f_7 - g_4^3 - g_3^1 \\ h^2 f_8 - g_3^2 \\ h^2 f_9 - g_2^3 - g_3^3 \end{bmatrix}$$

Forenklede Gauss-Seidel-iterasjoner - utnyttning av struktur

- Som vi husker kan Gauss-Seidel-iterasjoner på komponentform skrives som

$$x_j^{k+1} = \frac{1}{a_{jj}} \left(b - \sum_{i=1}^{j-1} a_{ji} x_i^{k+1} - \sum_{i=j+1}^n a_{ji} x_i^k \right).$$

- Her er nesten alle a_{ij} -verdier null. Dette kan vi utnytte. F.eks for node 5 har vi at

$$u_5^{k+1} = \frac{1}{-4} \left(h^2 f_5 - u_2^{k+1} - u_4^{k+1} - u_6^k - u_8^k \right)$$

- Vi har *ingen* summeformler siden vi har kontroll på strukturen til matrisen.
- Formelen utnytter altså glissenhet i matrisen.

Forenklede Gauss-Seidel-iterasjoner - utnyttning av struktur

- Hvis vi i tillegg bruker et glissent lagringsformat for matrisen A sparer vi mye, både regnetid og minnebruk.

Format	$N = 1000$	$N = 100000$
ikke glissen	8Mb	80Gb
glissen	60Kb	6Mb

- Viktig å huske på når vi anvender disse metodene - de resulterende operatorene blir nesten alltid glisne.

1D Varmeledningsligning

- Skal nå se på en parabolisk ligning, varmeledningsligningen

$$u_t = u_{xx}, \quad \text{i } \Omega = (0, 1)$$

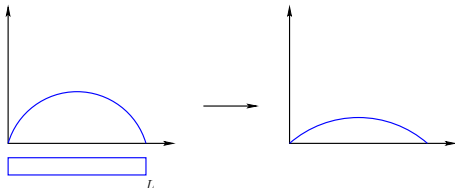
$$u(t_0) = u_0(x)$$

$$u(0, t) = g_0(t)$$

$$u(1, t) = g_1(t)$$

Dette er et rand-initialverdi-problem.

- Ligningen glatter ut alle initialdata.



- Her skrevet på skalert form, kan tenke på problemet som varmeledning i en stav med gitt temperatur på endene.

1D Varmeledningsligning - løsningsstrategi

- Vi *semidiskretiserer* ligningen. Dette betyr at ligningen er diskret i noen retninger og kontinuerlig i en eller flere. I dette tilfellet diskretiserer vi i rom og beholder ligningen kontinuerlig i tid.
- Dette betyr at vi må innføre et romlig grid - siden dette er i en dimensjon blir dette oppdeling i intervaller. Vi bruker symbolet h for å indikere romlig steglengde.

1D Varmeledningsligning

- Vi innfører som vanlig en vektor med ukjente, og vi finner at de semidiskretiserte ligningen kan skrives på formen

$$\frac{d\underline{u}}{dt} = \frac{1}{h^2} \underline{A} \underline{u}$$

$$u_i(0) = u_0(x_i) \quad \forall i = 1, \dots, N - 1$$

$$u_0(t) = g_0(t)$$

$$u_N(t) = g_1(t)$$

- Dette er på samme format som de ordinære differensialligningene vi har sett på før - vi kan bruke metoder utviklet for å løse system av ODL.

1D Varmeledningsligning - Eulers metode

- Vi bruker k for å indikere temporær steglengde.
- Eulers metode kan skrives på formen

$$\underline{u}^{n+1} = \underline{u}^n + kf(t^n, \underline{u}^n) = \underline{u}^n + \frac{k}{h^2} A \underline{u}^n \Rightarrow$$
$$\frac{\underline{u}^{n+1} - \underline{u}^n}{k} = \frac{1}{h^2} A \underline{u}^n.$$

- Innfører

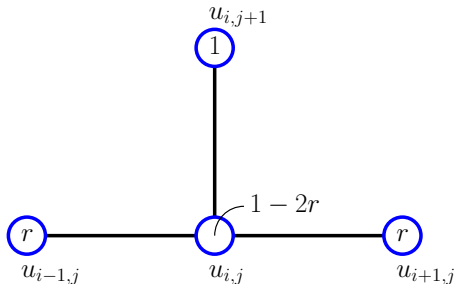
$$r = \frac{k}{h^2}$$

som lar oss skrive metoden komponentvis som

$$u_i^{n+1} = (1 - 2r)u_i^n + r(u_{i-1}^n + u_{i+1}^n).$$

1D Varmeledningsligning - Eulers metode

- Svarer til stensilen



- Eulers metode for varmeledningsligningen består altså av
 - sentraldifferanse i rom
 - eulers metode i tid.

1D Varmeledningsligning - Eulers metode - stabilitet

- Noen som husker stabilitetsanalysen for Eulers metode?
- Vi fikk stabilitetskravet

$$|1 + \lambda k| < 1.$$

- Ved hjelp av diagonalisering viste vi at dette ble et krav på egenverdiene til matrisen \underline{A} og at dette måtte være oppfylt for alle egenverdier. Dette gjaldt altså for alle system av ligninger på formen

$$\frac{d\underline{u}}{dt} = \underline{A}\underline{u}$$

som er akkurat det vi har her.

- Kan vise at for vår matrise \underline{A} har vi at

$$\lambda_{\max}(\underline{A}) \sim \mathcal{O}(1)$$

som gir totalt at

$$\lambda_{\max} \sim \frac{1}{h^2}.$$

1D Varmeledningsligning - Eulers metode - stabilitet

- Dette kan brukes til å vise at vi får stabilitetskravet

$$r \leq \frac{1}{2}.$$

- Forholdsvis strengt krav - hvis vi halverer steglengden i rom må vi gå ned med en faktor 4 i tidssteg for å holde løsningen stabil!
- Katastrofalt for simuleringer hvor materialene er veldig sentledende.
- Grunnen er den eksplisitte tidsintegreringen. Vet hva kuren er: bruk en implisitt metode.

1D Varmeledningsligning - Crank-Nicolsons metode

- Vi skifter nå ut tidsdiskretiseringen med en implisitt metode - Trapesmetoden:

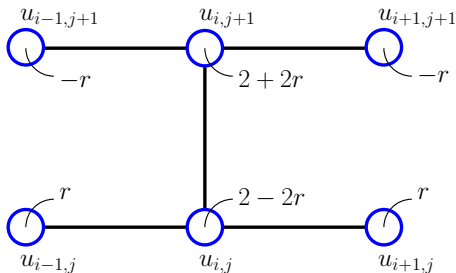
$$\begin{aligned}\underline{u}^{n+1} &= \underline{u}^n + \frac{k}{2} (\underline{f}(t^n, \underline{u}^n) + \underline{f}(t^{n+1}, \underline{u}^{n+1})) \\ &= \underline{u}^n + \frac{k}{2h^2} \underline{A} (\underline{u}^n + \underline{u}^{n+1}) \Rightarrow \\ \left(\underline{I} - \frac{r}{2} \underline{A}\right) \underline{u}^{n+1} &= \left(\underline{I} + \frac{r}{2} \underline{A}\right) \underline{u}^n\end{aligned}$$

- På komponentform kan dette skrives som

$$\begin{aligned}(2 + 2r) u_i^{n+1} - r (u_{i+1}^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}) \\ = (2 + 2r) u_i^n - r (u_{i+1}^n + u_{i-1}^n)\end{aligned}$$

1D Varmeledningsligning - Crank-Nicolsons metode

- Svarer til stensilen



- Crank-Nicolsons metode for varmeledningsligningen består altså av
 - sentraldifferanse i rom
 - trapesmetoden i tid.

1D Varmeledningsligning - Crank-Nicolsons metode - lineært system

- Anta at $r = 1$ for å forenkle ligningene litt.
- Innfører et grid med 5 punkt i rom hvorav 3 er ukjente.
- Setter opp ligningene i de tre ukjente punktene:

$$i = 1 : \quad 4u_1^{n+1} - u_2^{n+1} - u_0^{n+1} = u_2^n + u_0^n$$

$$i = 2 : \quad 4u_2^{n+1} - u_3^{n+1} - u_1^{n+1} = u_3^n + u_1^n$$

$$i = 3 : \quad 4u_3^{n+1} - u_4^{n+1} - u_2^{n+1} = u_4^n + u_2^n$$

- Her vil

$$u_0^n = g_0(kn)$$

$$u_4^n = g_1(kn).$$

1D Varmeledningss ligning - Crank-Nicolsons metode - lineært system

- Dette gir oss det lineære systemet

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & & \\ -1 & 4 & -1 & \\ & -1 & 4 & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ u_3^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_2^n + g_0(nk) \\ u_3^n + u_1^n \\ g_1(nk) + u_2^n \end{bmatrix}$$

- For vilkårlig N gir dette oss en tridiagonal matrise

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & & & & \\ -1 & 4 & -1 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & -1 & \\ & & & -1 & 4 & \end{bmatrix}$$

1D Varmeledningssligning - Crank-Nicolsons metode - lineært system

- Kalles for *Toeplitz*-matriser.
- Raskeste metode for å løse ligningssystemene er en $\underline{L}\underline{U}$ -faktorisering hvor vi tar den tridiagonale strukturen til etterretning.
- Til slutt: Jeg gjentar: Siden vi har brukt en implisitt tidsintegrasjonsmetode har vi *ikke* stabilitetskrav på verdien av r , kun nøyaktighet må tas i betraktning.