Równania różniczkowe cząstkowe
Metody Numeryczne II A

Paweł Jankowski

16.05.2001 r.

1 Równania różniczkowe cząstkowe

1.1 Problem

Rozwiązywanie równań różniczkowych cząstkowych *metodami różnicowymi* (MRS) przedstawimy na przykładzie równania dyfuzji:

$$\frac{\partial T}{\partial t} - D\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0, \tag{1}$$

gdzie $T(x,t)$ jest szukaną funkcją (spełniającą powyższe równanie), D jest współczynnikiem dyfuzji, $0 \leq x \leq 1$ to położenie, a $t \geq 0$ to czas. Oczywiście równanie takie ma wiele rozwiązań. Możemy je rozwiązać jednoznacznie mając zadane warunki

- początkowe: $T(x,0) = g(x)$
- brzegowe, np.: $T(0,t) = \psi_0(t)$ oraz $T(1,t) = \psi_1(t)$.

1.2 Przybliżenie na siatce

Ponieważ nie jesteśmy w stanie podać analitycznego rozwiązania $T(x,t)$ rozwiązujemy nasz problem w przybliżeniu dyskretnym, na siatce. To znaczy:

- wyliczamy jedynie dyskretne wartości $T_j^n = T(x_j, t_n)$
- $x_j = x_0 + j\Delta x$, gdzie Δx dane, $j = 0, 1, 2, \cdots, j_{\max}$
- $t_n = t_0 + n\Delta t$, gdzie Δt dane, $n = 0, 1, 2, \cdots, \infty$

1.3 Przybliżenie pochodnych

Nie znamy również analitycznej postaci pochodnych $\dfrac{\partial T}{\partial t}$ oraz $\dfrac{\partial^2 T}{\partial x^2}$. Musimy je przybliżyć, np. poprzez ilorazy różnicowe. Można to zrobić na wiele sposobów (istnieje wiele schematów różnicowych): patrz tabele 1 i 2.

Jako przykład przedstawimy w jaki sposób otrzymuje się przybliżenie $\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{T_{j+1} - T_{j-1}}{2\Delta x}$. Możemy skorzystać z rozwiniecia funkcji T w szereg Taylora

$$T_{j+1}^n = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Delta x^m}{m!} \left[\frac{\partial^m T}{\partial x^m}\right]_j^n. \tag{2}$$

Oczywiście zawsze gdzieś ucinamy szereg

$$T_{j+1}^n = T_j^n + \Delta x \left[\frac{\partial T}{\partial x}\right]_j^n + \frac{\Delta x^2}{2}\left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right]_j^n + O(\Delta x^3). \tag{3}$$

Stąd otrzymujemy przybliżenie na pochodną

$$\left[\frac{\partial T}{\partial x}\right]_j^n = \frac{T_{j+1}^n - T_j^n}{\Delta x} - \frac{1}{2}\Delta x \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right]_j^n + O(\Delta x^2), \tag{4}$$

N pt	uwaga	przybliżenie	błąd
3 pt	symetr.	$\frac{T_{j+1}-T_{j-1}}{2\Delta x}$	$\frac{\Delta x^2}{6}T^{(3)}$
2 pt	w przód	$\frac{T_{j+1}-T_j}{\Delta x}$	$\frac{\Delta x}{2}T^{(2)}$
2 pt	wstecz	$\frac{T_j-T_{j-1}}{\Delta x}$	$\frac{\Delta x}{2}T^{(2)}$
3 pt	w przód	$\frac{-3T_j+4T_{j+1}-T_{j+2}}{\Delta x}$	$\frac{\Delta x^2}{3}T^{(3)}$
5 pt	symetr.	$\frac{T_{j-2}-8T_{j-1}+8T_{j+1}-T_{j+2}}{12\Delta x}$	$\frac{\Delta x^4}{30}T^{(5)}$

Table 1: Przybliżenia pierwszej pochodnej czasowej $\frac{\partial T}{\partial x}$

N pt	uwaga	przybliżenie	błąd
3 pt	symetr.	$\frac{T_{j-1}-2T_j+T_{j+1}}{\Delta x^2}$	$\frac{\Delta x^2}{12}T^{(4)}$
3 pt	w przód	$\frac{T_j-2T_{j+1}+T_{j+2}}{\Delta x^2}$	$\Delta x T^{(3)}$
3 pt	wstecz	$\frac{T_{j-2}-2T_{j-1}+T_j}{\Delta x^2}$	$\Delta x T^{(3)}$
5 pt	symetr.	$\frac{-T_{j-2}+16T_{j-1}-30T_j+16T_{j+1}-T_{j+2}}{12\Delta x^2}$	$\frac{\Delta x^4}{90}T^{(6)}$

Table 2: Przybliżenia drugiej pochodnej przestrzennej $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$

czyli z dokladnościa do $\mathcal{O}(\Delta x)$ otrzymujemy

$$\left[\frac{\partial T}{\partial x}\right]_j^n \approx \frac{T_{j+1}^n - T_j^n}{\Delta x}. \tag{5}$$

Niestety w tak prosty sposób nie dostaniemy bardziej skomplikowanych przybliżeń pochodnej. Stosuje się wówczas następujący schemat: zakładamy interesująca nas postać

$$\left[\frac{\partial T}{\partial x}\right]_j^n = aT_j^n + bT_{j+1}^n + O(\Delta x^m) \tag{6}$$

i korzystając z rozwiniecia Taylora znajdujemy a, b i m, minimalizujące błąd przybliżenia (ilorazu różnicowego).

Podstawiamy rozwinięcie Taylora pod T_{j+1}

$$\left[\frac{\partial T}{\partial x}\right]_j^n = aT_j^n + b(T_j^n + \Delta x\left[\frac{\partial T}{\partial x}\right]_j^n + \frac{\Delta x^2}{2}\left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right]_j^n + \cdots), \tag{7}$$

czyli

$$\left[\frac{\partial T}{\partial x}\right]_j^n = (a+b)T_j^n + b\Delta x\left[\frac{\partial T}{\partial x}\right]_j^n + b\frac{\Delta x^2}{2}\left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right]_j^n + \cdots . \tag{8}$$

Aby uzyskać zgodność musi być spełnione

$$\begin{aligned} b\,\Delta x &= 1, \\ a+b &= 0, \end{aligned} \tag{9}$$

czyli

$$
\begin{aligned}
b &= \frac{1}{\Delta x}, \\
a &= -\frac{1}{\Delta x}
\end{aligned} \tag{10}
$$

i otrzymujemy to samo wyrażenie co wcześniej.

1.4 Konkretne schematy rozwiązania naszego problemu

Poszczególne schematy rozwiązania równania dyfuzji polegaja na przyjęciu rożnych przyblizen pochodnych $\frac{\partial T}{\partial t}$ oraz $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$. Metody te dzielą się na *jawne* (explicite) i *niejawne* (implicite). Pierwsze wyliczają kolejna wartość T_j^n wykorzystując wyłącznie znane juz wartosci w innych punktach. Drugie wyliczają kolejne wartosci poprzez rozwiązanie układu równań dla calego rzędu punktów.

Jako warunek startowy znamy $T(x, t = 0)$ (T_j^0). Zaczynamy wiec wyliczanie T_j^n (indeks n odpowiada czasowi t, j — x) od wartości dla $n = 1$ i poruszamy się kolejnymi rzędami $n = \mathrm{const}$ (od $j = 1$ do $j = j_{\max}$) do coraz wiekszych wartosci n.

1.4.1 FTCS (Euler)

Metoda FTCS (Forward Time Central Scheme) wylicza wartość T_j^{n+1} z wzoru

$$
\frac{T_j^{n+1} - T_j^n}{\Delta t} = D\frac{T_{j-1}^n - 2T_j^n + T_{j+1}^n}{\Delta x^2} \tag{11}
$$

(czyli bierzemy dla pochodnej czasowej różnicę w przód), co można inaczej zapisać wprowadzając oznaczenie $r = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$, i przenosząc wielkości nieznane na lewą stronę

$$
T_j^{n+1} = rT_{j-1}^n + (1 - 2r)T_j^n + rT_{j+1}^n. \tag{12}
$$

Jak było wykazywane w czasie wykładu, metoda ta jest najdokładniejsza jeżeli przyjmie się $r = 1/6$: błąd wynosi $\mathcal{O}(\Delta t^2, \Delta x^4)$, w porównaniu do $\mathcal{O}(\Delta t, \Delta x^2)$ gdy r jest dowolne.

1.4.2 Metoda ekstrapolacji Richardsona

Ogólnie metoda ekstrapolacji Richardsona polega na konstrukcji rozwiązania dla kilku (zazwyczaj dwu) wartości kroku, i ekstrapolacji wyników (np. zakładając, że błąd zależy potęgowo od kroku, ze znanym wykładnikiem) do kroku równego 0. W tym przypadku konstruujemy dwa rozwiązania daną metodą (np. metodą Eulera): jedno z krokiem Δx_a, drugie z krokiem Δx_b, np. dwa razy mniejszym (ale przy tym samym stosunku $r = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$). Następnie bierzemy ich średnią ważoną (czyli stosujemy interpolację liniową) dobierając wagi tak, by uzyskać jak najlepsze oszacowanie błędu.

Dla metody Eulera dostajemy następujący wzór:

$$
\frac{T_j^{n+1} - T_j^{n-1}}{2\Delta t} = D\frac{T_{j-1}^n - 2T_j^n + T_{j+1}^n}{\Delta x^2}, \tag{13}
$$

co można inaczej zapisać jako

$$
T_j^{n+1} = T_j^{n-1} + 2r(T_{j-1}^n - 2T_j^n + T_{j+1}^n). \tag{14}
$$

W metodzie tej pojawia się problem ze startem. Pierwszy krok powinno się brać z Eulera (w ćwiczeniu można wziąć rozwiązanie dokładne). Inaczej metoda może się okazać niestabilna.

1.4.3 BTCS (O'Brien)

Metoda BTCS (Backward Time Central Scheme) korzysta z wzoru

$$
\frac{T_j^{n+1} - T_j^n}{\Delta t} = D\frac{T_{j-1}^{n+1} - 2T_j^{n+1} + T_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2}. \tag{15}
$$

Jest to metoda niejawna. Startujemy przecież od $n = 1$ i idziemy z n w górę, nie znamy więc wartości T_j^{n+1}! Problem rozwiązuje się poprzez ułożenie układu równań na wszystkie punkty T_j^n w rzędzie n. W układzie pojawia się jako niewiadome wszystkie punkty T_j^{n+1} z rzędu $n + 1$. Liczba równań odpowiada liczbie niewiadomych. Dodatkowo układ ma prostą do rozwiązania postać trójdiagonalną.

1.4.4 DuFort–Frankel

Tym razem korzysta się z wzoru

$$\frac{T_j^{n+1} - T_j^{n-1}}{2\Delta t} = D\frac{T_{j-1}^n - (T_j^{n+1} + T_j^{n-1}) + T_{j+1}^n}{\Delta x^2} \tag{16}$$

(zamiast $2T_j^n$ bierzemy we wzorze na pochodną przestrzenną $T_j^{n+1} + T_j^{n-1}$, zaś do pochodnej czasowej bierzemy różnicę symetryczną).

Jest to metoda jawna, ale wymaga dwóch rządków (n i $n-1$), również przy starcie.

Można ja zapisać w jawnej postaci

$$T_j^{n+1} = \frac{1}{1+2r}T_j^{n-1} + \frac{2r}{1+2r}(T_{j-1}^n - T_j^{n-1} + T_{j+1}^n). \tag{17}$$

Jest to metoda jawna, ale nie samostartująca. Patrz uwagi dotyczące tej metody na wykładzie.

1.4.5 Crank–Nicolson

Jest to druga metoda niejawna. Wykorzystuje wzór

$$\frac{T_j^{n+1} - T_j^n}{\Delta t} = \frac{D}{\Delta x^2}\frac{1}{2}[(T_{j-1}^n - 2T_j^n + T_{j+1}^n) + (T_{j-1}^{n+1} - 2T_j^{n+1} + T_{j+1}^{n+1})] \tag{18}$$

Rozwiązuje się analogicznie jak w przypadku schematu BTCS.

2 Zadanie do rozwiązania

Rozwiazac rownanie dyfuzji z $D = 1$:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \tag{19}$$

$$0 \leq x \leq 1; \quad t \geq 0$$

z warunkami brzegowymi

$$\begin{aligned} T(x,0) &= g(x) = \sin\frac{\pi x}{2} + \frac{1}{2}\sin(2\pi x) \\ T(0,t) &= \psi_0(t) = 0 \qquad (20) \\ T(1,t) &= \psi_1(t) = \exp(-\frac{\pi^2}{4}t) \end{aligned}$$

(21)

Rozwiazanie teoretyczne (do porownania wynikow)

$$T(x,t) = \exp(-\frac{\pi^2}{4}t)\sin(\frac{\pi x}{2}) + \frac{1}{2}\exp(-4\pi^2 t)\sin(2\pi x) \tag{22}$$

...

Paweł Jankowski, Jakub Narębski