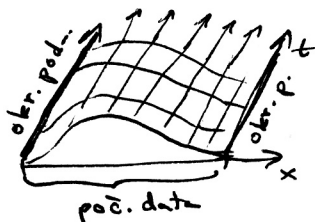


Numerické řešení parciálních diferenciálních rovnic

- základní dělení na eliptické, parabolické a hyperbolické rovnice vyhovuje pro numer. účely jen z části -

- lépe rozdělit na 1) počáteční úlohy (initial value problems)

př. vlnové rovnice, rce vedení tepla - většinou parabol., či hyperbol.



zadávají se počáteční data v jistém čase
+ okraj. podmínky na hranici oblasti v prostoru

2) okrajové úlohy (boundary value problems)

př. Laplaceova rovnice, Poissonova



zadávají se pouze okraj. podmínky
⇒ stacionární řešení nezávislé na čase

- základní numerické metody:

1) metoda konečných diferencí (finite-difference method - FDM)

- diskretizace spojitých veličin v prostoru a čase
⇒ aproximace derivací pomocí konečných diferencí
⇒ převedení na systém lineárních algebr. rovnic

2) metoda konečných prvků (finite-element method - FEM)

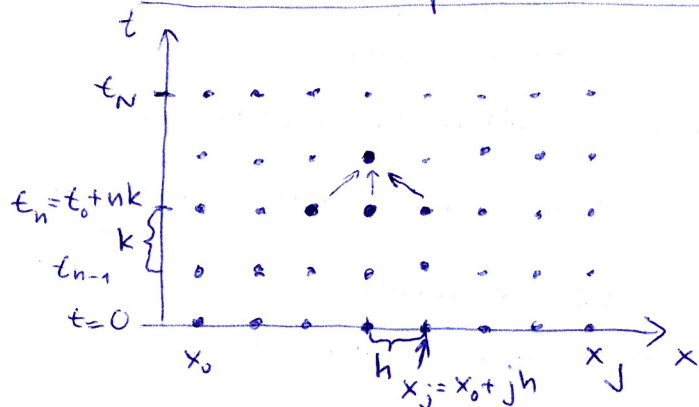
- rozvoj hledaných fci do báze s kompaktními nosiči založené na jistém rozdělení prostoru na konečné oblasti (prvky)
- slabší formulace úloh ⇒ řešení v této bázi
⇒ opět převedení na systém lineárních alg. rovnic

3) metoda konečných objemů (finite-volume method - FVM)

- rozdělení prostoru na buňky okolo bodů daných jistou diskretizací, průměrování veličin přes tyto buňky, integrály přes divergence nahrazeny povrchovémi integrály ⇒ vyrovnání toků mezi buňkami na rozhraní
⇒ konzervativní metoda - přímé užití zákonů zachování apod.

Metoda konečných diferencí pro lineární PDR

• diskretizace prostoru a času



- body (x_j, t_n) definují síť (grid, mesh),
na které aproximujeme funkci
 $u(x, t)$ (může být vektorová)
pomocí hodnot v_j^n (funkce na gridu)
 $v_j^n \approx u(x_j, t_n)$

kde $u(x, t)$ je řešením jisté PDR (nebo soustavy parc. dif. rovnic)

např. $\frac{\partial u}{\partial t} \equiv u_t = u_x \equiv \frac{\partial u}{\partial x}$, $u_t = u_{xx}$ atd.

s příslušnou počáteční ($t=0$, nebo obecně $t=t_0$) podmínkou

$$u(x, t=0) = u_0(x)$$

a okrajovou podmínkou v bodech x_0 a x_J (může být
např. konstantní na okraji, ale i jiné okraj. podmínky,
např. zadaná derivace a pod.)

- máme-li více prostorových proměnných $\rightarrow$ přeložme
zobecnění, jen obecně náročnější diskretizace pro
nepravidelné oblasti, kdy je náročné používat
především metody vyšších řádů

- cíl: převedení PDR na konečnou soustavu lineárních
rovnic a získat co nejlepší aproximaci $u(x, t)$
v bodech (x_j, t_n)

- pro explicitní metody (jediná neznámá v daném kroku)
je řešení přeložme

- pro implicitní metody je nutné v každém kroku
řešit soustavu lineárních rovnic

• Vzorce pro konečné difference

- obecně budeme mít s -krokové difference schéma, pomocí kterého na základě již známých hodnot

$$v_j^{n+1-s}, v_j^{n+1-s+1}, \dots, v_j^n \quad \text{pro všechna } j=0, \dots, J$$

určíme hodnoty v_j^{n+1} v čase t_{n+1}

- pokud vzorec obsahuje jedinou neznámou v_j^{n+1} v čase t_{n+1}

jde o explicitní vzorec (schéma)

a pokud několik v_j^{n+1} (pro různá j),

jde o implicitní vzorec (schéma)

- čím vyšší s (a zároveň vyšší počet vzájemně provázaných prostorových bodů), tím je obecně schéma přesnější ve smyslu lokální diskretizační chyby, ale

1) je početově náročnější (nutno pamatovat si hodnoty do času t_{n+1-s})

2) je obvykle méně stabilní (ve smyslu absolutní stability)

3) je nutno zadat počáteční podmínku pro s kroků (otázka nastartování)

- základní příklady vzorců pro rovnici $u_t = u_x$

1) Eulerova metoda (explicitní schéma) - nestabilní, 1. řádu

$$\underbrace{\frac{1}{k} (v_j^{n+1} - v_j^n)}_{\delta^+ v} = \underbrace{\frac{1}{2h} (v_{j+1}^n - v_{j-1}^n)}_{\delta_0 v}$$

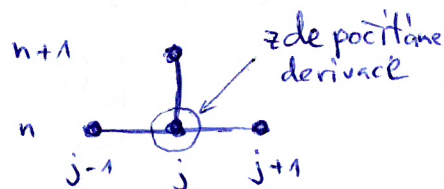
dopředná difference
v čase v bodě v_j^n

$$\approx \left. \frac{\partial v}{\partial t} \right|_{(x_j, t_n)}$$

centrována difference

v prostoru v bodě v_j^n

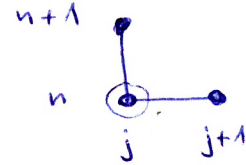
$$\approx \left. \frac{\partial v}{\partial x} \right|_{(x_j, t_n)}$$



2) Upwind metoda (explicitní) - stabilní pro $\lambda = \frac{k}{h} \leq 1$, 1. řádu

$$\underbrace{\frac{1}{k} (v_j^{n+1} - v_j^n)}_{\delta^+ v} = \underbrace{\frac{1}{h} (v_{j+1}^n - v_j^n)}_{\delta_+ v}$$

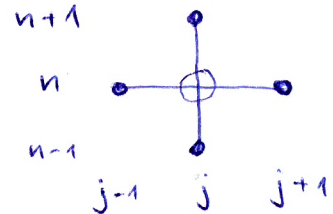
dopředná difference v čase dopředná difference v prostoru



3) leap-frog metoda (explicitní) - stabilní pro $\lambda < 1$, 2. řádu

$$\underbrace{\frac{1}{2k} (v_j^{n+1} - v_j^{n-1})}_{\delta^0 v} = \underbrace{\frac{1}{2h} (v_{j+1}^n - v_{j-1}^n)}_{\delta_0 v}$$

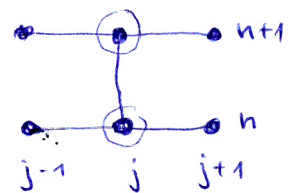
centrované difference



4) Crankova-Nicolsonova metoda (implicitní) - stabilní, 2. řádu

$$\underbrace{\frac{1}{k} (v_j^{n+1} - v_j^n)}_{\delta^+ v} = \underbrace{\frac{1}{2} \left[\frac{1}{2h} (v_{j+1}^n - v_{j-1}^n) + \frac{1}{2h} (v_{j+1}^{n+1} - v_{j-1}^{n+1}) \right]}_{M^+ \delta_0 v}$$

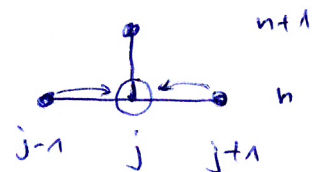
průměrování v čase prostorových centrovaných difference



5) Laxova-Friedrichsova metoda (explicitní) - stabilní pro $\lambda \leq 1$, 1. řádu
- stabilizace Eulerovy metody

$$\frac{1}{k} \left(v_j^{n+1} - \frac{1}{2} (v_{j+1}^n + v_{j-1}^n) \right) = \frac{1}{2h} (v_{j+1}^n - v_{j-1}^n)$$

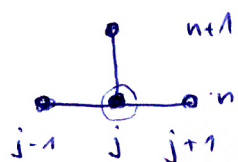
$\frac{1}{k} (2v - M_0 v)$ $\delta_0 v$
↑ ↙ ↘
posunutí v čase průměrování v prostoru



6) Laxova-Wendroffova metoda (explicitní) - stabilní pro $\lambda \leq 1$, 2. řádu

$$\underbrace{\frac{1}{k} (v_j^{n+1} - v_j^n)}_{\delta^+ v} = \underbrace{\frac{1}{2h} (v_{j+1}^n - v_{j-1}^n)}_{\delta_0 v} + \underbrace{\frac{k}{2h^2} (v_{j+1}^n - 2v_j^n + v_{j-1}^n)}_{\text{dissipativní člen kvůli stabilitě}}$$

$\frac{k}{2} \delta_x v$
centrovaná druhá difference
 $\approx \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$



• zápis pomocí operátorů

- posunutí v čase $z v_j^n = v_j^{n+1}$
- posunutí v prostoru $K v_j^n = v_{j+1}^n$
- identita $I v_j^n = v_j^n$
- operátory konečných diferencí v prostoru

$$\delta_+(h) v_j^n = \frac{1}{h} (K - I) v_j^n = \frac{1}{h} (v_{j+1}^n - v_j^n)$$

obdobně $\delta_-(h) = \frac{1}{h} (I - K^{-1})$, $\delta_0(h) = \frac{1}{2h} (K - K^{-1})$

kde $K^{-1} v_j^n = v_{j-1}^n$

- operátory průměrování v prostoru

$$\mu_+ = \frac{1}{2} (I + K), \quad \mu_- = \frac{1}{2} (K^{-1} + I), \quad \mu_0 = \frac{1}{2} (K^{-1} + K)$$

- zcela analogicky operátory v čase, jen indexy nahore a K se nahradí z : např. $\delta^+ = \frac{1}{k} (z - I)$

- operátory 2. řádu:

v prostoru $\delta_x(h) = \frac{1}{h^2} (K - 2I + K^{-1}) = \delta_+ \delta_- = \delta_- \delta_+$

v čase $\delta^x(k) = \frac{1}{k^2} (z - 2I + z^{-1})$

• řád přesnosti

- máme-li určité schéma, je řád přesnosti dán celkovou lokální diskretizační chybou, typicky vyjádřenou v časovém kroku k , přičemž předpokládáme, že $h = \frac{k}{\lambda}$, kde λ je konstanta, pro $u_x = u_t$ a obecně $h = h(k)$

- pokud je lokální diskretizační chyba řádu $O(k^{p+1})$, pak říkáme, že metoda je řádu p

- lokální diskretizační chybu určíme obdobně jako u numerických metod pro ODR, dosadíme za $v_j^n \approx u(x_j, t)$, $v_j^{n+1} \approx u(x_j, t+k)$ apod. a rozvineme do Taylora

- příklady určení řádu přesnosti

1) Eulerova metoda

$$V_j^{n+1} = V_j^n + \frac{k}{2h} (V_{j+1}^n - V_{j-1}^n)$$

neboli

$$u(x, t+k) - u(x, t) - \frac{k}{2h} (u(x+h, t) - u(x-h, t)) =$$

$$= u(x, t) + k u_t + \frac{k^2}{2} u_{tt} + O(k^3) - u(x, t) -$$

$$- \frac{k}{2h} \left(u + h u_x + \frac{h^2}{2} u_{xx} + O(h^3) - u + h u_x - \frac{h^2}{2} u_{xx} + O(h^3) \right) =$$

$$= k u_t + \frac{k^2}{2} u_{tt} + O(k^3) - k u_x + O(k^2) =$$

pro $u_x = u_t \rightarrow = \frac{k^2}{2} u_{tt} + O(k^3)$ (pokud $h = \frac{k}{\lambda}$)

$= O(k^2)$ takže $p=1$, metoda prvního řádu

2) Laxova - Wendroffova metoda

$$V_j^{n+1} = V_j^n + \frac{k}{2h} (V_{j+1}^n - V_{j-1}^n) + \frac{k^2}{2h^2} (V_{j+1}^n - 2V_j^n + V_{j-1}^n)$$

a tedy

$$u(x, t+k) - u(x, t) - \frac{k}{2h} (u(x+h, t) - u(x-h, t)) - \frac{k^2}{2h^2} (u(x+h, t) -$$

$$- 2u(x, t) + u(x-h, t)) =$$

$$= k u_t + \frac{k^2}{2} u_{tt} + \frac{k^3}{3!} u_{ttt} + O(k^4) - \frac{k}{2h} \left(2h u_x + 2 \frac{h^3}{3!} u_{xxx} + O(h^4) \right)$$

$$- \frac{k^2}{2h^2} \left(2 \frac{h^2}{2} u_{xx} + O(h^4) \right) =$$

$u_x = u_t$

$u_{xx} = u_{tt}$
atd.

$\rightarrow = \left(\frac{k^3}{3!} + \frac{k h^2}{3!} \right) u_{xxx} + O(k^4) = O(k^3)$ atedy $p=2$

3) Leap-frog metoda

$$V_j^{n+1} = V_j^{n-1} + \frac{k}{h} (V_{j+1}^n - V_{j-1}^n)$$

tedy $2k u_t + 2 \frac{k^3}{3!} u_{ttt} - \frac{k}{h} (2h u_x + 2 \frac{h^3}{3!} u_{xxx}) + O(k^5) =$

$= O(k^3)$ pro obecně $h = \frac{k}{\lambda}$

pro $h=k$ jde pro rovnici $u_x = u_t$ o „přesnou“ metodu.

• příklady vzorců pro rovnici $U_t = U_{xx}$

1) Eulerova metoda (explicitní) - nyní stabilní pro $\frac{k}{h^2} \leq \frac{1}{2}$, 1. řádu

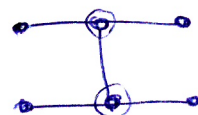
$$\underbrace{\frac{1}{k}(v_j^{n+1} - v_j^n)}_{\delta^+ v} = \underbrace{\frac{1}{h^2}(v_{j+1}^n - 2v_j^n + v_{j-1}^n)}_{\delta_x^2 v}$$



2) Crankova - Nicolsonova metoda (implicitní) - stabilní, 2. řádu

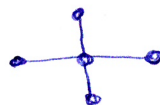
$$\delta^+ v = \mu^+ \delta_x^2 v$$

průměr druhých diferencí
v časech t_n a t_{n+1}



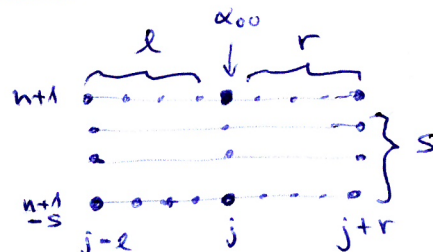
3) Leap-frog metoda (explicitní) - nestabilní, 2. řádu

$$\delta^0 v = \delta_x^2 v$$



• obecně s-krokové lineární schéma konečných diferencí

$$\sum_{\nu=0}^s \sum_{\mu=-l}^r \alpha_{\mu\nu} v_{j+\mu}^{n+1-\nu} = 0$$



kde $\alpha_{\mu\nu}$ jsou konstanty (pro rovnice $n+1-s$ konst. koef., obecně funkce x, t)

přičemž $\alpha_{00} \neq 0$, $\alpha_{-l, \nu_1} \neq 0$ pro nějaké ν_1 a $\alpha_{r, \nu_2} \neq 0$ pro nějaké ν_2

- pokud $\alpha_{\mu 0} = 0$ pro $\forall \mu \neq 0$, jde o explicitní metodu
jinak o implicitní

- pro vektorovou funkci $u(x, t)$ a tedy „vektorové“ v_j^n
budou obecně $\alpha_{\mu\nu}$ matice $M \times M$ (má-li M složek)
a podmínky typu $\det \alpha_{00} \neq 0$ apod.

- příklad: pro Crankova - Nicolsonovu metodu

máme $s=1$, $\mu=-1, 0, 1$ ($l=1, r=1$)

$$\alpha = \begin{pmatrix} -\frac{\sigma}{2} & -\frac{\sigma}{2} \\ 1+\sigma & -1+\sigma \\ -\frac{\sigma}{2} & \frac{\sigma}{2} \end{pmatrix} \quad \sigma = \frac{k}{h^2}$$

$$\frac{1}{k}(v_j^{n+1} - v_j^n) = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{h^2}(v_{j+1}^n - 2v_j^n + v_{j-1}^n) + \frac{1}{h^2}(v_{j+1}^{n+1} - 2v_j^{n+1} + v_{j-1}^{n+1}) \right]$$

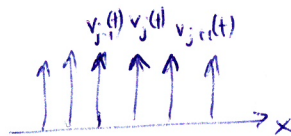
Prostorové konečné difference a metoda přílek (method of lines)

- velmi často se proces diskretizace prostor. a čas. proměnných dělá odděleně, nejprve diskretizujeme prostor $\rightarrow$ např. konečné difference, ale lze jinak (rozvojen do bte apod.) $\rightarrow$ a pak řešíme numericky soustavu vázaných obyč. dif. rovnic v čase

Pr. Eulerovo explicitní schéma je vlastně řešení soustavy
pro $U_t = U_{xx}$

$$\frac{\partial v_j(t)}{\partial t} = \delta_x v(t) = \frac{1}{h^2} (v_{j+1}(t) - 2v_j(t) + v_{j-1}(t))$$

řešíme tedy PDR na přílečkách



- výhoda tohoto přístupu je, že můžeme použít metody a kódy pro soustavy ODR

• tato ~~soustava ODR~~ se též nazývá se-idiskretizací aproximace PDR
a metoda se nazývá metoda přílek

- mnohé ze standardních metod jsou tohoto typu (Euler, Crank-Nicolson)
avšak jsou důležité případy, kdy tomu tak není, např.

Lax-Wendroff pro $U_x = U_t$

Vzorce pro centrální konečné difference na ekvidistantním gridu

Pro každé $p \geq 1$ existuje jediný diferenční operátor prvního řádu D_{2p}
a druhého řádu $D_{2p}^{(2)}$ s řádu přesnosti $2p$, který používá body $v_{j-p}, \dots, v_{j+p}$

a sice

$$D_{2p} = \sum_{k=1}^p \alpha_k \delta_0(kh), \quad D_{2p}^{(2)} = \sum_{k=1}^p \alpha_k \delta_x(kh)$$

$$\text{kde } \alpha_k = 2(-1)^{k+1} \frac{\binom{p}{p-k}}{\binom{p+k}{p}} = 2(-1)^{k+1} \frac{(p!)^2}{(p-k)!(p+k)!} \quad \alpha \quad \delta_0(kh) v_j = \frac{1}{2kh} (v_{j+k} - v_{j-k})$$

Pr. pro $p=2$ (5-bodový vzorec) máme

$$\delta_x(kh) v_j = \frac{1}{(kh)^2} (v_{j+k} - 2v_j + v_{j-k})$$

$$D_{2p}^{(2)} = \frac{4}{3} \delta_x(h) - \frac{1}{3} \delta_x(2h) \Rightarrow$$

$$D_{2p}^{(2)} v_j = -\frac{1}{12} v_{j+2} + \frac{4}{3} v_{j+1} - \frac{5}{2} v_j + \frac{4}{3} v_{j-1} - \frac{1}{12} v_{j-2}$$