Kapitola 2

Řešení okrajové úlohy metodou konečných diferencí a relaxační metody

SLADIT ZNAMÉNKA ZDROJOVÝCH ČLENŮ V LAPLACEOVÝCH ROVNICÍCH.

S okrajovými úlohami pro eliptické parciální diferenciální operátory se setkáváme v řadě fyzikálních i matematických problémů. Typickými příklady jsou Poissonova rovnice pro elektrostatický potenciál zadaného nábojového rozložení, rovníce pro stacionární proudění ideální kapaliny nebo úlohy pro statickou deformaci zatíženého pružného prostředí.

V minulé kapitole jsme vyšetřovali počáteční úlohy pro rovnice následujících typů (rovnice Schrödingerova, difůzní a vlnová)

$$\begin{aligned} -i\partial_t u &= \hat{L}u + S, \\ -\partial_t u &= \hat{L}u + S, \\ \partial_{tt} u &= \hat{L}u + S. \end{aligned}$$

Všechny tyto úlohy úzce souvisí s okrajovou úlohou pro rovnici

$$\hat{L}u(\vec{x},t) = -S(\vec{x},t). \tag{2.1}$$

Tato souvislost je dvojí. Za prvé rovnici 2.1 můžeme chápat jako rovnici pro stacionární stav, kterékoli z výše uvedených rovnic, přičemž stacionárním stavem máme na mysli řešení $u(\vec{x},t)$ nezávislé na čase. Typické chování fyzikálních systému je takové, že do stacionárního stavu dostpějeme v po uplynutí dostatečně dlouhé doby (tj. v limitě $t \to \infty$). Tohoto chování se dá dokonce využít k řešení okrajové úlohy, tak že integrujeme vhodnou počáteční úlohu na dostatečně dlouhém časovém intervalu.

Druhou souvislost nahlédneme, když si napíšeme jeden krok pro řešení počáteční úlohy pomocí implicitní Eulerovy metody v čase[1]

$$(1+\Delta t\hat{L})u^{n+1} = u^n - \Delta t S,$$

kde jsme podobně jako v minulé kapitole zavedli časový index n, ale zatím nepředpokládáme žádnou diskretizaci prostorové proměnné. Tuto rovnici můžeme interpretovat jako okrajovou úlohu typu 2.1 pro funkci $u^{n+1}(\vec{x})$ s pozměněným diferenciálním operátorem $\hat{L} \to 1 - \Delta t\hat{L}$ a

[1] Pro příklad jsme si vybrali počáteční úlohu pro rovnici vedení tepla, ale podobně se dá argumentovat i v ostatních případech.

s pravou stranou $S \to u^n - \Delta t S$. Provedení jednoho kroku implicitní metody lze tedy vlastně chápat jakou řešení jisté okrajové úlohy. Podobně se dají formulovat i jiné implicitní metody jako například metoda Cranka a Nicholsonové.

Stejně jako v předchozí kapitole se budeme zabývat řešením uvedené úlohy metodou konečných diferencí, v níž je hledaná funkce reprezentovaná pomocí svých hodnot v bodech předem zvolené sítě. Působení diferenciálního operátoru $\hat{L}$ na hledanou funkci u se potom aproximuje pomocí diferencí na bodech sítě. Než budeme diskutovat různé metody řešení výsledné soustavy rovnic pro hodnoty u v bodech sítě, připomeňme, že pro úplné zadání okrajové úlohy musíme specifikovat rovněž oblast na níž chceme rovnici řešit a okrajové podmínky, které má hledaná funkce splňovat na hranici této oblasti. Spíše než na obecný výklad se soustředíme na jednoduchý příklad, na němž si nejdříve vysvětlíme některé přístupy k řešení okrajové úlohy:

Úloha 1: (Poissonova rovnice v 1D)
Nalezněte funkci $u(x)$ definovanou na intervalu $x \in \Omega \equiv \langle 0,1\rangle$, která splňuje Poissonovu rovnici

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}u(x) = -S(x), \tag{2.2}$$

a dále vyhovuje okrajovým podmínkám

$$u(0) = A, \quad u(1) = B. \tag{2.3}$$

Přitom A a B jsou zadané konstanty a $S(x)$ je předem zadaná funkce (zdroj).

Stejně jako v předchozí kapitole reprezentujeme hledanou funkci $u(x)$ pomocí jejich hodnot $v_j \simeq u(x_j)$ na síti $x_j = hj$, kde $h = 1/N$ je diskretizační krok. A nyní konkrétně k jednotlivým přístupům k řešení takového úlohy na síti[2].

1) Metoda střelby je přímočarou aplikací metod na řešení počáteční úlohy pro obyčejné diferenciální rovnice. Tentokrát je nezávislou proměnnou $x \in \langle 0,1\rangle$. Protože jde o rovnici druhého řádu potřebujeme dvě počáteční podmínky. Jednu podmínku generuje okrajová podmínka $v_0 = u(0) = A$. Druhou podmínku si zvolíme libovolně a označíme ji C. Jako tuto podmínku můžeme například použít přímo $v_1 = C$ a další hodnoty řešení $v_2, u_3, \ldots$ konstruovat pomocí vhodné dvoukrokové metody (pro náš příklad můžeme s výhodou použít Numerovovu metodu uvedenou na konci kapitoly ..., která je přímo navržená pro řešení rovnic druhého řádu a odpadá tudíž krok převedení rovnice na soustavu dvou rovnic prvního řádu). Tímto postupem dostaneme hodnotu řešení $v_N(C)$ v koncovém bodě intervalu $\Omega = \langle 0,1\rangle$. Druhou fází řešení okrajové úlohy pak je nalezení konstanty C, tak aby byla splněna druhá okrajová podmínka

$$v_N(C) = B. \tag{2.4}$$

Vhodnou strategií pro řešení této rovnice je například metoda bisekce nebo sečen, kterými jsme se zabývali na začátku tohoto textu. Při řešení 2.4 vlastně zkusmo nastřelujeme a poté zpřesňujeme různé hodnoty konstanty C tak, abychom trefili podmínku 2.4. Odtud pochází název metody.

Metoda má různé varianty [odkaz na NumRec] (někdy je kvůli stabilitě výhodné střílet z obou okrajů a cílem je, aby se obě řešení potkala uprostřed), a s výhodou můžeme využít výsledků odvozených pro obyčejné diferenciální rovnice, použití metod vysokého řádu přesnosti, ale je obtížné ji zobecnit do více dimenzí.

[2] V dalších kapitolách si povíme ještě o jiných přístupech, ale hledanou funkci $u(\vec{x})$ již nebudeme reprezentovat body na síti

OBRÁZEK - PŘÍKLAD ŘEŠENÍ ÚLOHY 1 METODOU STŘELBY

2) Diskretizace a přímé řešení soustavy rovnic. Nahrazením druhé derivace druhou diferencí, můžeme Poissonovu rovnici 2.2 napsat pomocí řešení na bodech sítě

$$-v_{j+1} + 2v_j - v_{j-1} = h^2[S_j + O(h^2)], \tag{2.5}$$

kde jsme explicitně vypsali velikost diskretizační chyby.[3] Tato rovnice pro $j = 1, 2, ..., N-1$ (všechny vnitřní body sítě) představuje soustavu $N-1$ lineárních rovnic pro neznámé funkce v_j. Hodnoty v_j v krajních bodech sítě $j = 0, N$ jsou rovnou definovány okrajovými podmínkami. Tuto rovnici můžeme zapsat v maticové formě

$$Av = b,$$

kde vektor řešení $v = (v_1, v_2, ..., v_{N-1})^T$ a

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & & & \\ 1 & 2 & 1 & & \\ & 1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 2 & 1 \\ & & & 1 & 2 \end{pmatrix}, \qquad b = \begin{pmatrix} h^2 S_1 + A \\ h^2 S_2 \\ \vdots \\ h^2 S_{N-2} \\ h^2 S_{N-1} + B \end{pmatrix}. \tag{2.6}$$

Soustavu lze řešit přímo například LU rozkladem, to je však zbytečně časově náročné, neboť z kapitoly ... víme, že na to potřebujeme $O(N^3)$ FLOP. Na druhé straně matice A obsahuje jen málo nenulových prvků. Konkrétně v našem případě jde o matici tridiagonální a řešení je možné pomocí $O(N)$ operací pomocí speciálních metod pro tridiagonální matice. Pokud bychom podobně řešili okrajovou úlohu ve více dimenzích, příslušná matice A by stále měla většinu prvků nulových, ale její struktura už by byla složitější a vypracování efektivních specializovaných metod se stává komplikovaným. Přitom vzhledem k diskretizační chybě nás ve skutečnosti zajímá limita $N \to \infty$.

3) Relaxační metody Relaxační metody jsou založené na opačné filosofii než metoda střelby. V metodě střelby hledáme vlastně přesné řešení rovnice (2.5) s nesprávnou okrajovou podmínkou a postupně nacházíme nové iterace řešení splňující čím dál tím přesněji okrajovou podmínku. V relaxačních metodách začneme špatnou aproximací řešení $\{v_j^{(0)}\}$, která však splňuje přesně okrajové podmínky. Z ní postuně konstruujeme lepší aproximace $\{v_j^{(n)}\}$, tak že v limitě $n \to \infty$ dostaneme přesné řešení (2.5).

Jedna z možných cest k odvození relaxační metody využívá toho, že řešení okrajové úlohy lze získat jako limitu pro dlouhé časy příbuzné počáteční úlohy. Uvažujme rovnici

$$-\partial_t u = \hat{L}u + S, \tag{2.7}$$

kde $\hat{L}$ je pozitivně definitní operátor. Například pro řešení úlohy 1 bychom volili $\hat{L} = -\mathrm{d}^2/\mathrm{d}x^2$. Vzhledem k linearitě rovnice lze řešení nehomogenní časové úlohy napsat jakou součet $u(x,t) = u^{(S)}(x) + u^{(H)}(x,t)$, kde jednotlivé členy rozkladu splňují

$$\hat{L}u^{(S)} + S = 0, \tag{2.8}$$
$$-\partial_t u^{(H)} = \hat{L}u^{(H)}. \tag{2.9}$$

[3] Použitím vyjádření řešení rovnice jako konvoluci zdrojů s Greenovou funkcí se dá argumentovat, že výsledná chyba přibližného řešení v_j se bude škálovat jako $O(h^2)$.

Funkce $u^{(S)}(x)$ je hledané (časově nezávislé) řešení okrajové úlohy a $u^{(H)}(x,t)$ je řešení počáteční úlohy pro homogenní rovnici. Homogenní rovnici můžeme formálně vyřešit

$$u^{(H)}(x,t) = \exp(-\hat{L}t)u^{(H)}(x,0).$$

Vzhledem k tomu, že $\hat{L}$ je pozitivně definitní operátor musí toto řešení v limitě $t \to \infty$ vymizet a tedy platí, že řešení rovnice (2.7) v čase $t \to \infty$ konverguje k řešení zkoumané okrajové úlohy $u = u^S(x)$. Abychom toto řešení nalezli numericky zvolíme vhodnou počáteční podmínku v čase $t = 0$ jako počáteční nástřel řešení u^0 a řešení u^n v dalších časech $t_n = n\Delta t$ budeme hledat pomocí explicitní Eulerovy metody pro rovnici (2.7), přičemž operátor $\hat{L} = -\mathrm{d}^2/\mathrm{d}x^2$ opět diskretizujeme pomocí druhé diference. Máme tedy schéma

$$v_j^{n+1} = v_j^n + \frac{\Delta t}{h^2}(v_{j+1}^n - 2v_j^n + v_{j-1}^n) - \Delta t S_j.$$

To co nás tedy ve skutečnosti zajímá je limita této posloupnosti u_j^n pro velké časy. Do té to limity se nejrychleji dostaneme s velkým krokem Δt, ale z minulé kapitoly víme, že stabilita řešení vyžaduje, aby krok $\Delta t \leq \frac{1}{2}h^2$. Zvolíme-li největší povolenou hodnotu Δt dostáváme jednu iteraci *Jacobiho metody*

$$v_j^{n+1} = \tfrac{1}{2}(v_{j-1}^n + v_{j+1}^n) - \tfrac{1}{2}h^2 S_j. \tag{2.10}$$

Všiměte si, že tato rovnice je iterace (viz kapitola ...) ve formě

$$v^{n+1} = \phi(v^n)$$

pro vektorovou veličinu $v = v_j$ a jejím pevným bodem je rovnice (2.5). Rovnici pro Jacobiho iterace bychom mohli odvodit rovnou z (2.5) tak, že převedeme v_j na levou stranu a všechny ostatní členy na pravou. Levou stranu pak interpretujeme jako $j-$tou komponentu nové aproximace řešení v^{n+1} vyjádřenou pomocí pomocí komponent předchozí aproximace v^n. Výše uvedené odvození z počáteční úlohy ovšem podává zdůvodnění toho, že tyto iterace konvergují. Jiný důkaz konvergence uvidíme níže.

Právě odvozená relaxační Jacobiho metoda má několik výhod. Jednou z nich je, že se dá snadno zobecnit do vyšších dimenzí a přirozeně využívá řídké struktury matice diskretizované úlohy A. Snadno se rovněž dají implementovat složitější okrajové podmínky. Tyto aspekty metody si ukážeme v dalším odstavci na dvourozměrném příkladě. Na druhé straně zatím neznáme rychlost konvergence Jacobiho metody a ukáže se, že je dosti pomalá. Tomuto tématu a možným vylepšením se pak budeme věnovat v dalších odstavcích.

OBRÁZEK - PŘÍKLAD ŘEŠENÍ ÚLOHY 1 RELAXAČNÍ METODOU

2.1 Příklad: Poissonova rovnice ve 2D

Než se pustíme do obecného výkladu relaxačních metod uvedeme slíbeny příklad okrajové úlohy ve dvou dimenzích. Úlohu lze chápat jako hledání elektrostatického pole v kondenzátoru s elektrodami ve tvaru nekonečných hranolů čtvercového průřezu.

Úloha 2: (Poissonova rovnice ve 2D)
Nalezněte funkci $u(x, y)$ definovanou na oblasti

$$\Omega = \left\{(x, y); x \in (0, 1), y \in (0, 1); |x - \tfrac{1}{2}| + |y - \tfrac{1}{2}| > \tfrac{1}{4}\right\},$$

která splňuje Poissonovu rovnici

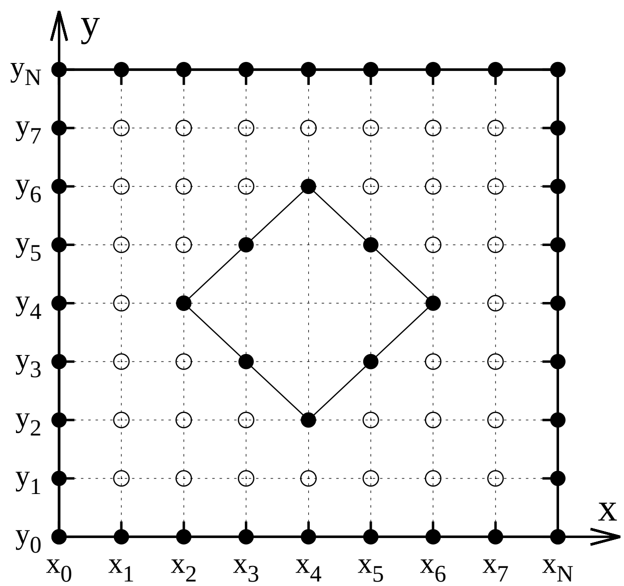
$$\Delta u(x, y) = -S(x, y), \tag{2.11}$$

a dále vyhovuje okrajové podmínce

$$u(x, y) = f(x, y), \tag{2.12}$$

a na hranici oblasti Ω. Přitom $f(x, y)$ a $S(x, y)$ jsou předem zadané funkce (okrajová podmínka a zdroj).

Poissonovu rovnici tentokrát řešíme na čtverci o straně 1, z nějž je vyříznut další čtverec s úhlopříčkou $\frac{1}{2}$, pootočený o $\pi/4$ viz obrázek 2.1.



Obrázek 2.1: Schéma sítě pro diskretizaci Poissonovy rovnice v úloze 2. Plné tečky ukazují body sítě na hranici a prázdná kolečka body sítě uvnitř oblasti Ω.

V obrázku je rovněž naznačena diskretizační síť $x_{j_1} = j_1 h$, $y_{j_2} = j_2 h$ a rozdělení bodů sítě (x_{j_1}, y_{j_2}) na vnitřní a hraniční. Občas budeme používat sdruženého idexu $\vec{J} = (j_1, j_2)$ a vnitřní body sítě budeme značit symbolem $\vec{J} \in \Omega$ a hraniční body jako $\vec{J} \in \partial\Omega$. Diskretizací rovnice (2.11) pomocí druhých diferencí dostaneme

$$-v_{j_1-1,j_2} - v_{j_1,j_2-1} + 4v_{j_1,j_2} - v_{j_1+1,j_2} - v_{j_1,j_2+1} = h^2[S_{j_1,j_2} + O(h^2)]. \tag{2.13}$$

Nyní si můžeme uvědomit, že tato rovnice je vlastně soustavou rovnic pro neznámé hodnoty řešení $v_{j_1,j2}$. Protože pro naši dirichletovu úlohu jsou hodnoty na hranicích oblasti dány, hledáme jen neznáme hodnoty ve vnitřních bodech sítě (pro diskretizaci na obrazku 2.1 máme 36 neznámých) a stený je i počet rovnic, které rovněž píšeme pro každý vnitřní bod sítě $\vec{J} \in \Omega$. Podobně jako v jednorozměrném případě lze rovnici (2.13) přepsat do tvaru vhodného pro relaxační iterační metodu

$$v_{j_1,j_2}^{(n+1)} = \tfrac{1}{4}(v_{j_1-1,j_2}^{(n)} + v_{j_1,j_2-1}^{(n)} + v_{j_1+1,j_2}^{(n)} + v_{j_1,j_2+1}^{(n)}) + \tfrac{1}{4}h^2 S_{j_1,j_2}. \tag{2.14}$$

Také toto iterační schéma lze chápat jako časový vývoj do ustáleného stavu pro $n \to \infty$ nebo jako hledání pevného bodu zobrazení pomocí iterací. Tento itarační přístup má oproti přímému řešení soustavy rovnic (2.13) několik výhod:

1. Implementace metody je velice snadná.
2. Při implementaci se snadno zahrne i složitý tvar oblasti, prostě stačí procházet všechny body sítě a pokud vyhodnotíme, že jde o vnitřní bod oblasti provedeme iteraci podle rovnice (2.14).
3. Využijeme přirozeným způsobem faktu, že matice soustavy (2.13) je řídká.

Nevýhodou je, že konvergence metody je poměrně pomalá. V následující sekci budeme rychlost konvergence podrobně charakterizovat a dále Jakobiho metodu zobecníme na širší třídu relaxačních metod, přičemž se nám podaří rychlost konvergence vylepšit.

2.2 Úvod do teorie relaxačních metod

Přístup, který jsme použili v minulém odstavci … zobecnění Řešíme soustavu rovnic

$$Au = b$$

Obecná myšlenka spočívá v postupném zpřesňování odhadu řešení $u^{(0)}$ pomocí iterací

$$u^{(n+1)} = Ru^{(n)} + c, \tag{2.15}$$

kde R a c jsou vhodná matice a vektor. Klíčovými pojmy jsou

Konzistence metody: rovnici $u = Ru + c$ řeší právě jen vektor $u = A^{-1}b$.

Konvergence metody: poslopnost $u^{(n)}$ konverguje k $u = A^{-1}b$ pro $n \to \infty$.

Příklad: Určitou třídu iteračních metod můžeme konstruovat následujícím postupem: Matici A napíšeme jakou rozdíl dvou matic $A = M - K$, kde M je regulární matice. Rovnici

$$Au = (M - K)u = b$$

vynásobíme zleva maticí M^{-1} takže

$$u = M^{-1}Ku + M^{-1}b \equiv Ru + c. \tag{2.16}$$

Vidíme tedy, že konzistence iterační metody je zaručena pro $R = M^{-1}K$ a $c = M^{-1}b$.

V dalším výkladu budeme studovat různé iterační metody odpovídající různým volbám rozkladu $A = M - K$. Obecně je vhodné, aby rozklad měl strukturu umožňující rychlý výpočet M^{-1} a zaručoval rychlou konvergenci iterací.

2.2.1 Jacobiho metoda

Jakobiho metodu kterou jsme prezentovali pro speciální případ řešení Poissovnovy rovnice v kartézských souřadnicích můžeme obecně formulovat ve výše uvedeném schématu (2.16). Nejdříve rozdělíme matici soustavy A na dolní trojúhelníkovou, diagonální a horní trojúhelníkovou matici.

$$A = L + D + U \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \times & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \times & \times & 0 & 0 & 0 \\ \times & \times & \times & 0 & 0 \\ \times & \times & \times & \times & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \times & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \times & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \times & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \times & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \times \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \times \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Pokud tento rozklad použijeme obecném schématu (2.16), přičemž zvolíme $M = D$, $K = -(L + U)$ dostaneme obecnou Jakobiho metodu

$$u^{(n+1)} = -D^{-1}(L + U)u^{(n)} + D^{-1}b \equiv R_{\mathrm{J}}u^{(n)} + c_{\mathrm{J}}.$$

V případě *Úlohy 1* je matice A dána rovnicí (2.6) a matice Jakobiho metody vyjde

$$R_J = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & & \\ 1 & 0 & 1 & \\ & & \ddots & 1 \\ & & 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{2.17}$$

takže obecné schéma (2.15) odpovídá právě iteracím (2.10). Podobně se dá ukázat, že pro matici plynoucí z *Úlohy 2* má iterace (2.15) s maticí R_J tvar rovnice (2.14).

Rychlost konvergence Jacobiho metody budeme nejdříve vyšetřovat na příkladu *Úlohy 1*. Iterační metoda s maticí (2.17) bude konvergovat, pokud násobení maticí R_J bude kontrahující, tj. pokud největší vlastní číslo této matice bude menší než jedna. Vlastní vektory Toeplitzovské matice můžeme hledat ve tvaru harmonických funkcí:

2.2.2 Gaussova-Sidelova metoda

Důkazy z Demmela pro checkerboard ordering. - zkusit.

2.2.3 Metoda SOR a optimalní volba relaxace

2.3 Princip a příklad použití multigridové metody