D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

Metoda konečných diferencí (Finite Differences, FD)

Podobně jako jiné numerické metody, metoda konečných diferencí (MKD, někdy též metoda sítí) přibližně převádí obtížně uchopitelné diferenciální rovnice na rovnice algebraické, v tomto případě prostřednictvím jednoduché diskretizace studované oblasti a aproximace derivací diferenčními vztahy. Jsou-li výchozí diferenicální rovnice lineární, obdržíme soustavu lineárních algebraických rovnic a obtížnost teoretickou tak nejčastěji nahrazujeme obtížností numerickou (pro věrné vystižení podložních funkcí musí být diskretizace jemná a získaná soustava rovnic má zpravidla značnou dimenzi).

značení:

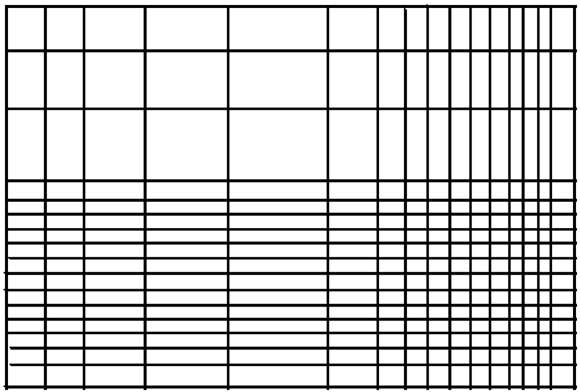
vektory $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ jsou sloupcové, řádkové jsou $\mathbf{a}^{\mathrm{T}}$, $\mathbf{b}^{\mathrm{T}}$
složky vektoru a_i

matice $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, dimenze $\dim\mathbf{A} = m \,\mathrm{x}\, n$, m je počet řádků, n je počet sloupců
prvky matice A_{ij}, první index je řádkový, druhý sloupcový

$\mathbf{x}[n]$, $\mathbf{y}(\mathbf{x}[n]) \equiv \mathbf{y}[n]$

D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

Diskretizace úlohy



Geometrie diskretizační sítě je prakticky výhradně dána zvoleným typem souřadnic. Ve 2D tak vhodnými transformacemi mohou základními elementy kromě čtverce být také obdélníky, rovnoběžníky, nebo například výseče mezikruží v případě polárních souřadnic.

Otázka řešitelnosti vzniklé algebraické soustavy je obecně dosti komplikovaná, v jednoduchém lineárním případě stačí spočítat neznámé a nezávislé rovnice. Je-li soustava nedourčená, máme volnost definovat další doplňující podmínky, kterými ji stabilizujeme (hovoří se o numerickém ukotvení úlohy) - například při hledání vlastních vektorů není z principiálních důvodů dána jejich velikost, kterou si tedy můžeme dodatečně zvolit. Je-li soustava přeurčená, nezbývá, než řešit ji přibližně.

D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

Řešení přeurčené lineární soustavy

Uvažujme přeurčenou soustavu lineárních rovnic, $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ ($\dim\mathbf{A} = m \times n$, $m > n$). Takovou soustavu nelze obecně řešit, můžeme však požadovat její co nejlepší splnění ve smyslu nejmenších čtverců. Zavedeme-li vektor rezidua jako $\mathbf{r} \equiv \mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}$, můžeme minimalizovat jeho normu $\mathbf{r}^{\mathrm{T}}\mathbf{r}$,

$$(\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b})^{\mathrm{T}}(\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}) \rightarrow \min.$$

Roznásobením a derivací např. podle $\mathbf{x}^{\mathrm{T}}$ získáme podmínku $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{b} = 0$, čili jsme přešli k soustavě

$$\tilde{\mathbf{A}}\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{b}}$$

se čtvercovou pozitivně definitní maticí $\tilde{\mathbf{A}} \equiv \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}$ ($\dim\tilde{\mathbf{A}} = n \times n$), kde $\tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{b}$.

Jinými slovy, ve smyslu nejmenších čtverců je přeurčená soustava řešitelná vždy.

D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

Cauchyova úloha pro Laplasián v metodě konečných diferencí

Nejčastěji užívaná centrální diference pro derivaci druhého řádu v 1D má tvar

$$u''[i] = \frac{u[i-1] - 2u[i] + u[i+1]}{\varepsilon^2} + O(\varepsilon).$$

Výhodou kartézských souřadnic je oddělenost derivací v jednotlivých směrech:

$$\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \ldots$$

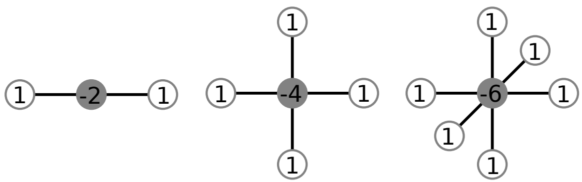
takže například ve 2D

$$\Delta u[i,j] = \frac{u[i-1,j] - 2u[i,j] + u[i+1,j]}{\varepsilon^2} + \frac{u[i,j-1] - 2u[i,j] + u[i,j+1]}{\varepsilon^2} + O(\varepsilon),$$

což dává známé pravidlo anulování Laplasiánu při průměru sousedních hodnot

$$\Delta u[i,j] = \frac{u[i-1,j] + u[i,j-1] - 4u[i,j] + u[i+1,j] + u[i,j+1]}{\varepsilon^2} + O(\varepsilon).$$

$\varepsilon^2 \Delta u$:



D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

K plnému určení dvoubodové aproximace gradientu tedy potřebujeme jeden uzel na každou stranu od vyhodnocovaného, do problému se tedy dostaneme u okrajů zkoumané oblasti. Formálně Cauchyův problém tedy vyžaduje doplnění kompatibilních okrajových podmínek, jejich diskretizovanou podobu musíme zavést i my.

Budeme se zabývat dvěma typy okrajových podmínek:

Dirichletova podmínka specifikuje hodnoty proměnné v některých bodech $\partial\Omega$

> Jelikož je taková hodnota fixní ve smyslu neovlivnitelnosti vnitřním děním systému, lze ji například v termodynamice považovat za kontakt s termostatem (neznámá veličina je teplota systému).

Neumannova podmínka specifikuje hodnoty normálové derivace proměnné v některých bodech $\partial\Omega$

> Tato hodnota vlastně specifikuje tok neznámé veličiny hranicí, takže nejběžnější podmínka $u_n \equiv \nabla u \cdot \mathbf{n} = 0$ vlastně představuje podmínku izolace okraje (například tepelné).

Dirichletova podmínka se zavádí přímo, Neumannova prostřednictvím metody zrcadlení.

D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

Metodu zrcadlení je také třeba využít, pokud jsme provedli symetrickou redukci Ω – jí vznikají uměle nové hranice, které se doplňují podmínkou Neumannova typu – na obou stranách hranice symetrie musí mít uzly (právě ze symetrie) stejné hodnoty.

Na každé části $\partial\Omega$ musí být předepsán jen jeden typ okrajové podmínky, na množině míry nula ovšem mohou být předepsány oba. Podobně, při styku dvou hraničních ploch s různými Dirichletovými podmínkami zpravdidla na jejich průsečíku zavádíme Dirichletovu podmínku o velikosti průměru výše jmenovaných.

D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

Příklad - zavedení okrajových podmínek v 1D Poissonově rovnici

Uvažujme rovnici $\phi''(x) = f(x)$ na intervalu $x \in \langle 0, a \rangle$ a diskretizaci

$$\phi'' \to \frac{1}{\xi^2}(\phi[i-1] - 2\phi[i] + \phi[i+1])$$

jejího operátoru na ekvidistantní síti s $N+1$ uzly; potom $\xi[i] \equiv x[i+1] - x[i] = a/N$. Prvoplánové sestavení rovnic vede na soustavu

$$\frac{1}{\xi^2}\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & & \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi[0] \\ \phi[1] \\ \vdots \\ \phi[N-1] \\ \phi[N] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f[0] \\ f[1] \\ \vdots \\ f[N-1] \\ f[N] \end{pmatrix}.$$

Tato soustava má problém v okrajových uzlech - aby diskretizace platila beze zbytku, musí být $\phi[0] = \phi[N+1] = 0$. Jedná se vlastně o podmínku Dirichletova typu a vzhledem ke způsobu, kterým podmínka vznikla, se označuje za *implicitní*.

D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

Pokud bychom chtěli předepsat *explicitní* Dirichletovu podmínku, například $\phi[0] = T$, museli bychom rovnici pro nultý uzel vynechat (hodnota v tomto uzlu je známa), a pro první uzel bychom psali

$$\frac{1}{\xi^2}(T - 2\phi[1] + \phi[2]) = f[1]$$

což by vedlo na soustavu

$$\frac{1}{\xi^2}\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & & \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi[1] \\ \phi[2] \\ \vdots \\ \phi[N-1] \\ \phi[N] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f[1] - T/\xi^2 \\ f[2] \\ \vdots \\ f[N-1] \\ f[N] \end{pmatrix}.$$

Podobně, pokud bychom navíc předepsali Neumannovu podmínku $\phi'[N] = b$, v posledním uzlu bychom rovnici sestavovali (jeho hodnota není explicitně dána):

$$\frac{1}{\xi^2}(\phi[N-1] - 2\phi[N] + \phi[N+1]) = f[N],$$

avšak s omezením na hodnoty přípustné okrajovou podmínkou (volíme diskretizaci stejné přesnosti jako pro samotnou rovnici),

$$\frac{1}{2\xi}(\phi[N+1] - \phi[N-1]) = b.$$

D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

Z posledních dvou rovnic je možné eliminovat $\phi[N+1]$, dostáváme

$$2\phi[N-1] + 2\phi[N] = \xi^2 f[N] - 2\xi b,$$

a celkově soustavu

$$\frac{1}{\xi^2}\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & & \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 2 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi[1] \\ \phi[2] \\ \vdots \\ \phi[N-1] \\ \phi[N] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f[1] - T/\xi^2 \\ f[2] \\ \vdots \\ f[N-1] \\ f[N] - 2b/\xi \end{pmatrix}$$

přičemž pro $b = 0$ rozeznáváme v hlavní matici příspěvek od zrcadlení okraje.

Stojí za povšimnutí, že uvedený postup automaticky monitoruje konzistenci okrajové podmínky s rovnicí.

D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

Příklad - zavedení okrajových podmínek v 2D rovnici vedení tepla

Rovnice vedení tepla má tvar

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + q,$$

kde ρ[kg.m^{-3}] je hustota vzorku, c_p[J.kg^{-1}K^{-1}] jeho tepelná kapacita a λ koeficient jeho tepelné vodivosti; všechny veličiny mohou být časově i prostorově závislé. Z jednotkové analýzy levé strany vyplývá, že q je tepelný výkon ve Wattech, absorbovaný na jednotku objemu. Ze stejného důvodu musí mít tepelná vodivost jednotku Wm^{-1}K^{-1}; čím vyšší tepelná vodivost, tím více tepla proudí vzorkem, pokud jeho dva vzdálené konce udržujeme na odlišných teplotách.

Za předpokladu ustáleného stavu se rovnice vedení tepla redukje na

$$\nabla \cdot (\lambda \nabla T) + q = 0,$$

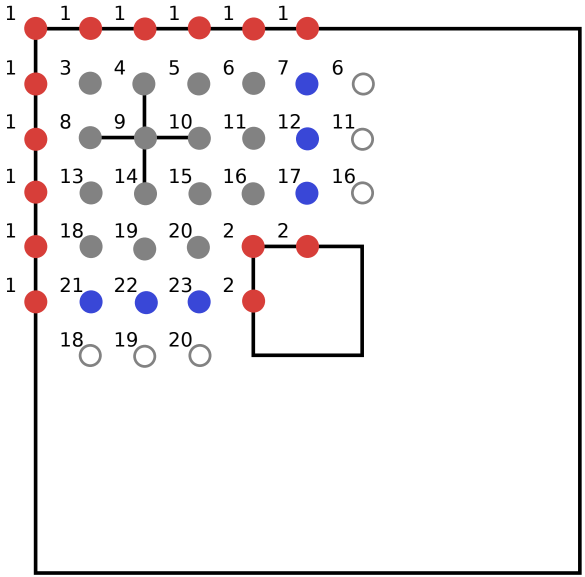
v homogenním vzorku, nepodrobenému dodávce tepla potom až na

$$\Delta T = 0.$$

Na zvolené geometrii tuto rovnici doplníme fixními okrajovými podmínkami, pak můžeme úlohu rozřešit.

D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

T_1, T_2 konstantní



$$3: \quad 2T[1] + T[4] + T[8] - 4T[3] = 0$$

$$4: \quad T[3] + T[5] + T[9] + T[1] - 4T[4] = 0$$

$$5: \quad T[4] + T[6] + T[10] + T[1] - 4T[5] = 0$$

$$6: \quad T[5] + T[7] + T[11] + T[1] - 4T[6] = 0$$

$$7: \quad 2T[6] + T[12] + T[1] - 4T[7] = 0$$

$$\vdots$$

$$21: \quad T[1] + T[22] + 2T[18] - 4T[21] = 0$$

$$22: \quad T[21] + T[23] + 2T[19] - 4T[22] = 0$$

$$23: \quad T[22] + T[2] + 2T[20] - 4T[23] = 0$$

D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

Solvery pro MKD

MatrixMarket format
- pro zápis řídkých matic

matrixFile	rhsFile
22 22 62	**3**
1 3 1.0 0.0	1 1 10.0 0.0
1 1 -2.0 0.0	2 1 10.0 0.0
2 4 1.0 0.0	⋮
2 2 -2.0 0.0	
⋮	

superLU (zlinsol_print_new)
matrixFile, rhsFile $\rightarrow$ resultFile

D. Hemzal, F. Münz
hemzal@physics.muni.cz

Shrňme si hlavní výhody a nevýhody MKD:

výhody: přehlednost metody
není potřeba speciálních generátorů dělení
přesnost se dá regulovat volbou derivačních aproximací (k-bodové)

nevýhody: složité tvary Ω vyžadují jemné dělení – velká náročnost na úložiště

Obecně překonáno metodou konečných prvků (FEM), v konkrétních aplikacích ale použití FD s proměnným krokem může být velmi efektivní. I při použití FEM, řešení nestacionárních úloh používá v časové ose FD (časové projekce Ω nemívají složité tvary) – vzniká FDTD.

Každopádně je ke snížení počtu uzlů potřeba vždy maximálně využít symetrie úlohy.