Pokročilé numerické metody I
Matice při numerickém řešení DR

Jiří Zelinka

Obyčejné DR

Přibližné řešení hledáme v izolovaných bodech (uzlech) $x_0, \ldots, x_N$, zpravidla ekvidistantních, tj. $x_{i+1} = x_i + h$.

Náhrada derivací (a chyby formulí)

$$
\begin{aligned}
u'(x_i) &= \frac{1}{h}[u(x_{i+1}) - u(x_i)] + O(h) \\
u'(x_i) &= \frac{1}{h}[u(x_i) - u(x_{i-1})] + O(h) \\
u'(x_i) &= \frac{1}{2h}[u(x_{i+1}) - u(x_{i-1})] + O(h^2) \\
u''(x_i) &= \frac{1}{h^2}[u(x_{i-1}) - 2u(x_i) + u(x_{i+1})] + O(h^2)
\end{aligned}
$$

Odvození: z Taylorova rozvoje.

Okrajová úloha: lineární rovnice 2. řádu

$$p(x)u''(x) + q(x)u'(x) + r(x)u(x) = f(x), \quad x \in [a, b]$$

Okrajové podmínky: $u(a) = u_0$, $u(b) = u_N$.

Definice uzlů: $h = (b - a)/N$, $x_0 = a$, $x_N = b$, $x_i = x_0 + i\,h$.
Označení: $u_i \approx u(x_i)$, podobně pro p, q, r, f (přesné hodnoty).

Náhrada DR:

$$p_i \frac{1}{h^2}[u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}] + q_i \frac{1}{2h}[u_{i+1} - u_{i-1}] + r_i u_i = f_i, \text{ tj.}$$

$$(\frac{p_i}{h^2} - \frac{q_i}{2h})u_{i-1} + (r_i - \frac{2p_i}{h^2})u_i + (\frac{p_i}{h^2} + \frac{q_i}{2h})u_{i+1} = f_i$$

pro $i = 1, \ldots, N - 1$,
u_0 a u_N jsu dány okrajovými podmínkami.

Výsledkem je systém lineárních rovnic s třídiagonální maticí.

Příklad:

$$-u''(x) + u(x) = f(x), \quad x \in [a, b], \quad , u(a) = u_0, \ u(b) = u_N$$

Systém rovnic:

$$-\frac{1}{h^2}[u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}] + u_i = f_i$$

t.j.

$$-u_{i-1} + (2 + h^2)u_i - u_{i+1} = h^2 f_i, \quad i = 1, \ldots, N-1$$

Dostali jsme systém lineárních rovnic s třídiagonální diagonálně dominantní maticí.
Řešení: LU rozklad, Croutova metoda, pomocí inverze NE!

2. Parciální DR: Rovnice vedení tepla

$u = u(x,t)$, $f = f(x,t)$, $x \in [0,1]$, $t \geq 0$

$$\frac{\partial}{\partial t} u = \alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} u + f$$

Interpretace:
$u(x,t)$ je teplota tenké tyče v daném bodě a daném čase,
funkce f zahrnuje vnější zdroje tepla,
$\alpha \geq 0$ je zpravidla konstanta – materiálové vlastnosti.

Počáteční podmínka: $u(x,0) = u_0(x)$, $x \in [0,1]$

Okrajové podmínky: $u(i,t) = g_i(t)$, $t \geq 0$, $i \in \{0,1\}$

Přibližné řešení hledáme na $[0,1] \times [0,T]$, $T > 0$.

Definice uzlů:
$h = 1/N$, $x_0 = 0$, $x_N = 1$, $x_i = i\,h$,
$\tau = T/M$, $t_0 = 0$, $t_M = T$, $t_k = k\,\tau$.
Označení: $u_i^k \approx u(x_i, t_k)$.

Přibližné řešení počítáme postupně po časových vrstvách.

Diskretizaci rovnice lze provést různými způsoby.

A. Explicitní schema

Rovnici aproximujeme v bodě (x_i, t_k):

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{\tau}[u_i^{k+1} - u_i^k] &= \frac{\alpha}{h^2}[u_{i-1}^k - 2u_i^k + u_{i+1}^k] + f_i^k \\
u_i^{k+1} &= \frac{\alpha\tau}{h^2}[u_{i-1}^k - 2u_i^k + u_{i+1}^k] + u_i^k + \tau f_i^k \\
r &= \frac{\alpha\tau}{h^2} \\
u_i^{k+1} &= r\, u_{i-1}^k + (1-2r)u_i^k + r\, u_{i+1}^k + \tau f_i^k,
\end{aligned}
$$

pro $i = 1, \ldots, N-1$, chyba aproximace je $O(\tau + h^2)$.

$$U^k = \begin{pmatrix} u_1^k \\ u_2^k \\ \vdots \\ u_{N-2}^k \\ u_{N-1}^k \end{pmatrix}, \qquad F^k = \begin{pmatrix} \tau f_1^k + r u_0^k \\ \tau f_2^k \\ \vdots \\ \tau f_{N-2}^k \\ \tau f_{N-1}^k + r u_N^k \end{pmatrix}$$

$$U^{k+1} = A_r\, U^k + F^k$$

$$A_r = \begin{pmatrix} 1-2r & r & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ r & 1-2r & r & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & r & 1-2r & r & \cdots & 0 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & r & 1-2r & r \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & r & 1-2r \end{pmatrix}$$

Třídiagonální Toeplizovy matice

$$T_n = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & & & \\ \gamma & \alpha & \beta & 0 & & \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ & & 0 & \gamma & \alpha & \beta \\ & & & 0 & \gamma & \alpha \end{pmatrix}$$

Vlastní čísla T_n: $\lambda_j = \alpha - 2\sqrt{\beta\gamma}\cos\frac{j\pi}{n+1}$, $j = 1, \dots, n$

Pro matici A_r: $\lambda_j = 1 - 2r - 2r\cos\frac{j\pi}{n+1} = 1 - 2r(1 + \cos\frac{j\pi}{n+1})$

Aby $|\lambda_j| \leq 1$ musí být $r \leq \frac{1}{2}$.

Stabilita explicitního schematu

Schema je podmíněně stabilní. Spektrální poloměr A_r musí být menší nebo roven jedné, odtud

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

t.j.

$$\frac{\alpha\tau}{h^2} \leq \frac{1}{2}$$

Důsledek

Časový krok závisí na druhé mocnině h.

B. Implicitní schema

Rovnici aproximujeme v bodě (x_i, t_{k+1}):

$$\frac{1}{\tau}[u_i^{k+1} - u_i^k] = \frac{\alpha}{h^2}[u_{i-1}^{k+1} - 2u_i^{k+1} + u_{i+1}^{k+1}] + f_i^{k+1}$$

$$-r\, u_{i-1}^{k+1} + (1+2r)u_i^{k+1} - r\, u_{i+1}^{k+1} = u_i^k + \tau f_i^{k+1}$$

$$B_r U^{k+1} = U^k + F^{k+1}$$

$$B_r = \begin{pmatrix} 1+2r & -r & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -r & 1+2r & -r & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -r & 1+2r & -r & \cdots & 0 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -r & 1+2r & -r \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -r & 1+2r \end{pmatrix}$$

Schema je nepodmíněně stabilní, chyba je $O(\tau + h^2)$.

C. Crankovo–Nicolsonové schema

Rovnici aproximujeme v bodě $(x_i, t_k + \tau/2)$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau}[u_i^{k+1} - u_i^k] &= \frac{1}{2}\left\{\frac{\alpha}{h^2}[u_{i-1}^k - 2u_i^k + u_{i+1}^k] + \right. \\ &+ \left.\frac{\alpha}{h^2}[u_{i-1}^{k+1} - 2u_i^{k+1} + u_{i+1}^{k+1}]\right\} + f_i^{k+1/2} \end{aligned}$$

$$-\frac{r}{2}u_{i-1}^{k+1}+(1+r)u_i^{k+1}-\frac{r}{2}u_{i+1}^{k+1} = \frac{r}{2}u_{i-1}^k+(1-r)u_i^k+\frac{r}{2}u_{i+1}^k+\tau f_i^{k+1/2}$$

$$B_{r/2}U^{k+1} = A_{r/2}\,U^k + F^{k+1/2}$$

Schema je nepodmíněně stabilní, chyba je $O(\tau^2 + h^2)$.

3. Parciální DR: Eliptická rovnice

Poissonova rovnice na oblasti G v rovině:

$$\frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial y^2} = f(x,y)$$

spolu s okrajovými podmínkami na hranici G.

Oblast rozdělíme pravidelnou sítí bodů (x_i, y_j) s krokem h v obou směrech, $u_{i,j} \approx u(x_i, y_j)$.

Aproximace derivace:

$$\frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial y^2} = \frac{1}{h^2}[u(x+h,y) + u(x-h,y) +$$

$$+ u(x,y+h) + u(x,y-h) - 4u(x,y)] + O(h^2)$$

Rovnice pro obdélníkovou oblast:

$G = [a, b] \times [c, d]$, $b - a = N \cdot h$, $d - c = M \cdot h$, $a = x_0$, $c = y_0$

$$u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j} = h^2 f_{i,j}$$

$i = 1, \dots, N-1$, $j = 1, \dots, M-1$

Maticový zápis:

$$A \cdot U = F$$

$U = (u_{1,1}, \dots, u_{N-1,1}, u_{1,2}, \dots, u_{N-1,2}, \dots, u_{1,M-1}, \dots, u_{N-1,M-1})$,

podobně F s okrajovými podmínkami.

$$A = \begin{pmatrix} M & I & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ I & M & I & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & I & M & I & \cdots & 0 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & I & M & I \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & I & M \end{pmatrix},$$

I je jednotková matice řádu $N-1$,

$$M = \begin{pmatrix} -4 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -4 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -4 & 1 & \cdots & 0 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -4 \end{pmatrix},$$

řád matice A je $(N-1)\times(M-1)$.