Konkrét véges differencia sémák

Szépszó Gabriella

szepszo.g@met.hu

Előadások: http://nimbus.elte.hu/~numelo

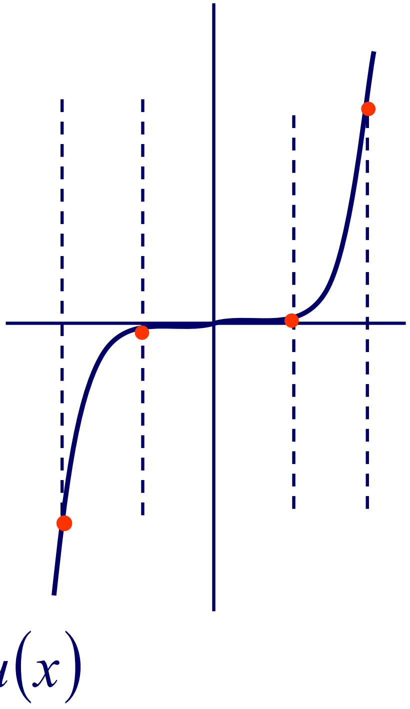
Térbeli véges differencia sémák

- Deriváltak formális helyettesítése
- Határozatlan együtthatók módszere

Deriváltak formális helyettesítése

Példa 1.) :

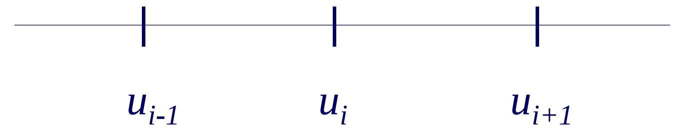
$$Lu = \frac{du}{dx} \longrightarrow \begin{array}{l} u : \Omega \to \Re^n \in B_1 \\ \Omega = \{a < x < b\} \\ B_1 = C_3(a,b) \end{array}$$



$$\Omega_h = \{x_i : x_i = a + i \cdot h, 0 < i < n, h = (b-a)/n\}$$

$$P_h u = u_h = u(x) \quad \forall x \in \Omega_h, \quad P_h : \Omega \to \Omega_h$$

$$Lu = \frac{du}{dx}$$



A derivált közelítése:

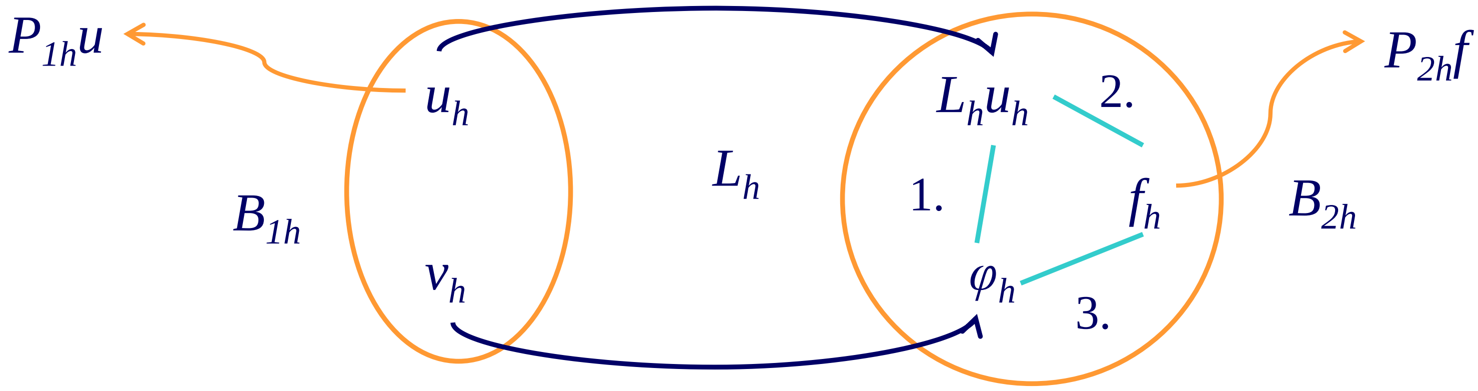
a.) $u_{x,i} = \dfrac{u_{i+1} - u_i}{h}$ → jobb oldali séma

b.) $u_{\bar{x},i} = \dfrac{u_i - u_{i-1}}{h}$ → bal oldali séma

c.) $u_{\sigma x,i} = \sigma \cdot u_{x,i} + (1-\sigma) \cdot u_{\bar{x},i}$

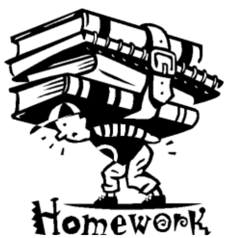
d.) $u^{o}_{x,i} = \dfrac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} \leftarrow \sigma = \dfrac{1}{2}$ → középponti séma

Approximációs rend vizsgálata Taylor-sorokkal:



Lokális approximációs rend (adott pontban) :

$$\Psi_h(x) = L_h u_h(x) - (Lu)_h(x).$$



A lokális approximációs rend a-c.) esetén 1, d.)-nél pedig 2.

Példa 2.) :

$$Lu = \Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \qquad u(x, y) \in C_4(\Omega),\, \Omega = \{a < x < b,\, c < y < d\}$$

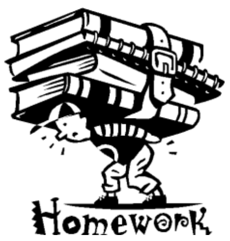
$$\Omega_h = \left\{ \left(a + i \cdot h_x,\, c + k \cdot h_y\right), h = \left(h_x, h_y\right), h_x = \frac{b-a}{n}, h_y = \frac{d-c}{m} \right\}$$

$$\Delta_h u_h = \Lambda_x u + \Lambda_y u$$

$$\Lambda_x u = u_{\bar{x}x} = \frac{u_{i+1,k} - 2u_{i,k} + u_{i-1,k}}{h_x^2}$$

$$\Lambda_y u = u_{\bar{y}y} = \frac{u_{i,k+1} - 2u_{i,k} + u_{i,k-1}}{h_y^2}$$

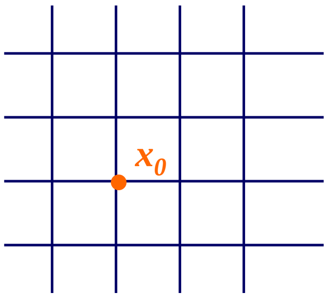
Lássuk be, hogy a séma másodrendű!



Határozatlan együtthatók módszere

$x_0 \in \Omega_h$, ebben a pontban

$$L_h u_h(x_0) = \sum_{k=0}^{q} a_k \cdot u(x_k)$$



együtthatók

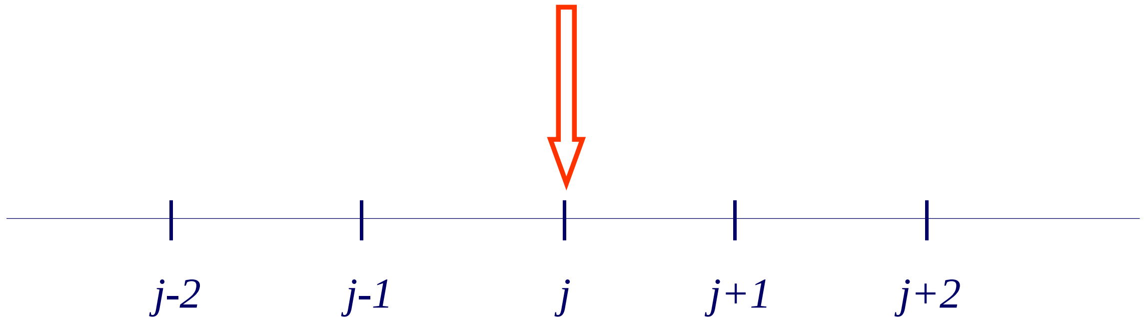
sémában szereplő rácspontok:

$$x_k = x_i + \alpha_k \cdot h \qquad k = 1 \ldots q$$

Együtthatók meghatározása → megköveteljük a lokális approximációs rendet (más feltételek is tehetők):

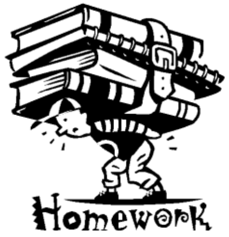
$$L_h u_h(x_0) - Lu(x_0) = \sum_{k=0}^{q} a_k \cdot u(x_k) - Lu(x_0) = o(|h|^m)$$

Példa: alkossunk negyedrendű közelítést $f'(x)$-re a j-edik rácspontban a környező pontok felhasználásával!



Kezdés:

$$\Delta'_x f_j = \mathrm{k}\cdot f_{j-2} + \mathrm{l}\cdot f_{j-1} + \mathrm{m}\cdot f_{j+1} + \mathrm{n}\cdot f_{j+2}$$



Időbeli deriváltak közelítése

$$\begin{cases} \dfrac{du}{dt} + f(u,t) = 0 \\ u(t_0) = u_0 \end{cases} \longrightarrow$$ kezdeti-érték probléma

$$u(t) = ? \;\rightarrow\; u_{n+1} = u_n - \int_{t_n}^{t_{n+!}} f(u,t)\,dt$$

ezt közelítjük

I. Euler-módszer:

$$u_{n+1} = u_n - f(u_n, t_n) \cdot \Delta t \qquad (1) \qquad \longrightarrow \quad \text{elsőrendű explicit séma}$$

$$\left(\frac{du}{dt} = \frac{u_{n+1} - u_n}{\Delta t} \right)$$

Stabilitás-vizsgálat:

Emlékeztető: stabilitás

Stabilitás: a véges differencia séma belső tulajdonsága.

A numerikus megoldás korlátosságát szokták megkövetelni – általánosan a folytonos feladat megoldása nem korlátos.

Definíció: a numerikus séma hibája rögzített Δt és Δx esetén korlátos marad az időben

ε_n : az n-edik időlépcsőben keletkező hiba

$$\varepsilon_{n+1} = g \cdot \varepsilon_n$$

g: áttérési együttható

Követelmény: $\left|\varepsilon_{n+1}\right| \leq \left|\varepsilon_n\right| \Rightarrow \left|g\right| \leq 1$ ⟶ 1 dimenzióban

Több dimenzióban g helyett egy mátrix áll és ennek sajátértékeinek kell (abszolútértékben) 1-nél nem nagyobbnak lenni: $\left|\mu_i\right| \leq 1,\ i = 1, N.$

$$g = 1 - \left.\frac{\partial f}{\partial u}\right|_n \cdot \Delta t \quad \leftrightarrow \quad |g| \le 1$$

1.) $\frac{\partial f}{\partial u} > 0 \xrightarrow{g<1}$ stabilitási feltétel : $\Delta t \le \frac{2}{\left.\frac{\partial f}{\partial u}\right|_n}$

2.) $\frac{\partial f}{\partial u} < 0 \xrightarrow{g>1}$ instabilitás

3.) u komplexértékű fgv. (2 csatolt egyenlet)

Példa: 1.) Radioaktív bomlás (de lehetne súrlódási feladat)

$$\begin{cases} \dfrac{du}{dt} + \dfrac{u}{\tau} = 0 \\ \quad u(0) = 1 \end{cases}$$

Megoldás : $u(t) = e^{-\frac{t}{\tau}} \rightarrow \left.\dfrac{\partial f}{\partial u}\right|_n = \dfrac{1}{\tau} \rightarrow$ stabilitási feltétel : $\Delta t \leq 2\tau$

2.) Harmonikus oszcillátor: $\dfrac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 \cdot x = 0$ $\quad x$: kitérés, ω sajátfrekv .

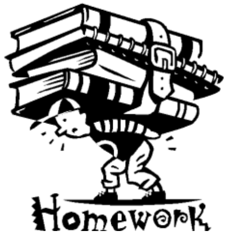
$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} - \omega \cdot v = 0 \\ \dfrac{dv}{dt} + \omega \cdot x = 0 \end{cases}$$

$u = x + iv \Rightarrow \dfrac{du}{dt} + iu\omega = 0 \rightarrow g = 1 - i\omega\Delta t \rightarrow |g| > 1$ Instabil séma

II. Euler backward séma:

$$u_{n+1} = u_n - f\left(u_{n+1}, t_{n+1}\right) \cdot \Delta t \longrightarrow$$

implicit, elsőrendű séma



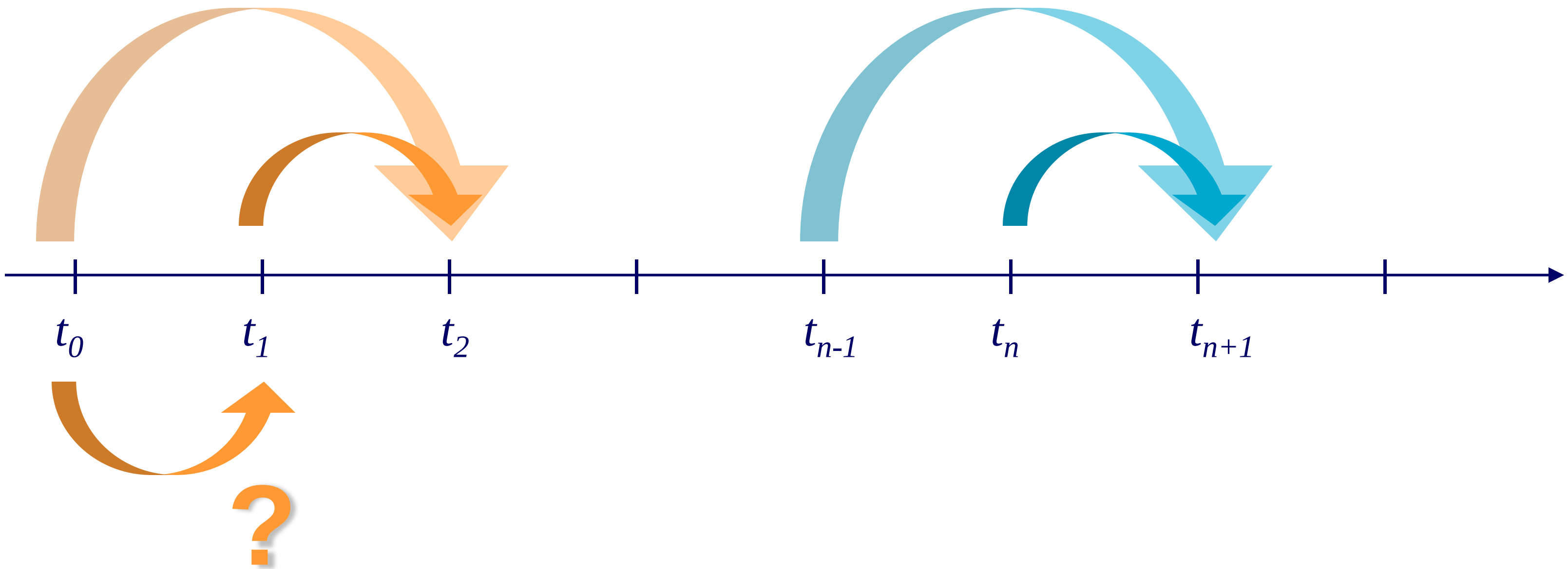
→ stabilitás

Az explicit és implicit Euler-módszer elsőrendben pontos sémák – cél: a pontosság növelése.

III. Leapfrog séma:

$$u_{n+1} = u_{n-1} - f(u_n, t_n) \cdot 2\Delta t \longrightarrow$$

időben centrált, explicit
másodrendű pontosság



A séma érzékeny az indulásra: u_0 adott, de $u_1 = u(\Delta t)$ megadásánál óvatosan kell eljárni.

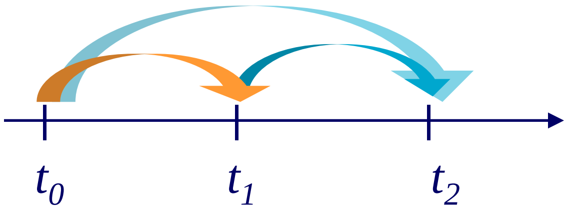
1. megoldandó probléma: a folytonos feladatnál szükség van-e két kezdeti feltételre?

Fizikai és számítási kezdeti feltétel – hogyan adjuk meg utóbbit?

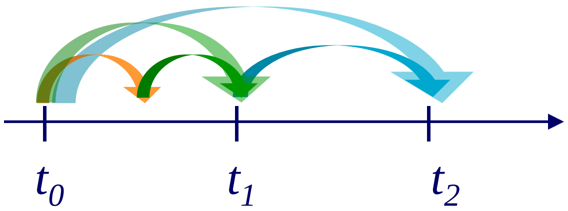
- Legyen $u_1 = u_0$ – ekkor a hiba nagyságrendje Δt, ugyanis

$$u_1 = u_0 + \frac{\partial u}{\partial t}\Delta t + \ldots = u_0 + o(\Delta t)$$

- Euler-séma (forward, backward) az első időlépcsőben – Δt rendű hiba, de csak Δt ideig járul hozzá a globális hibához – tehát Δt^2 nagyságrend



- Segédlépés az első időlépcsőben, majd forward, majd leapfrog – $\Delta t/2$ nagyságrendű hibát hoz be



Stabilitásvizsgálat

$$u_{n+1} = u_{n-1} - f(u_n, t_n)\cdot 2\Delta t$$

$$u_{n+1} + \varepsilon_{n+1} = u_{n-1} + \varepsilon_{n-1} - f(u_n + \varepsilon_n, t_n)\cdot 2\Delta t$$

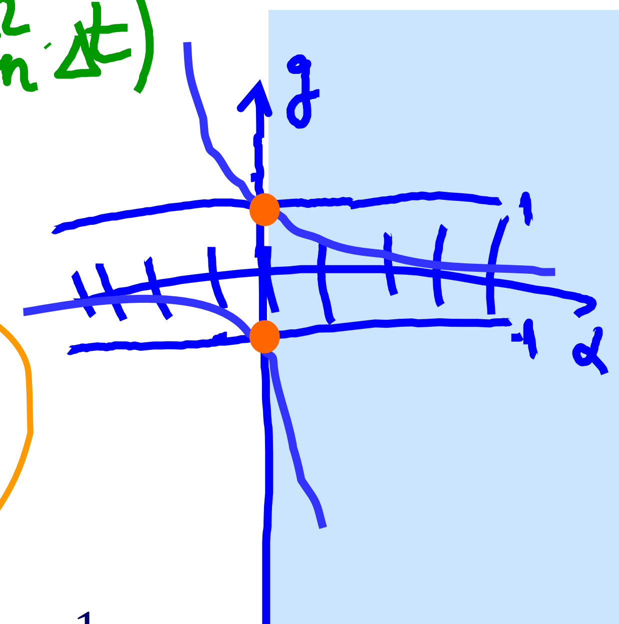
$$f(u_n + \varepsilon_n, t_n) = f(u_n, t_n) + \left.\frac{\partial f}{\partial u}\right|_n \cdot \varepsilon_n + O(\varepsilon^2)$$

$$\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_{n-1} - \left.\frac{\partial f}{\partial u}\right|_n \varepsilon_n 2\Delta t + O(\varepsilon_n^2 \cdot \Delta t)$$

$$g^2 - 1 + \underbrace{\frac{\partial f}{\partial u} 2 \Delta t}_{\alpha}\, g = 0$$

$$g^2 + 2\alpha g - 1 = 0$$

$$\boxed{g_{1,2} = -\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 1}}$$



<u>Példa</u>: $\frac{du}{dt} + i\cdot\omega\cdot u = 0 \rightarrow$ stabilitási kritérium: $\Delta t \le \frac{1}{\omega}$.

2. megoldandó probléma: a számítási módusz megjelenése – mi az?

Nézzük meg a $\frac{du}{dt} + \frac{u}{\tau} = 0$ egyenletet!

Jelölje λ a páros és μ a páratlan időlépcsőbeli értékeket:

$$\lambda^{2n} = \lambda^{2n-2} + \mu^{2n-1} \cdot 2\frac{\Delta t}{\tau} \quad (1)$$

$$\mu^{2n+1} = \mu^{2n-1} + \lambda^{2n} \cdot 2\frac{\Delta t}{\tau} \quad (2)$$

(Gyengén) csatolt egyenlet-rendszer:

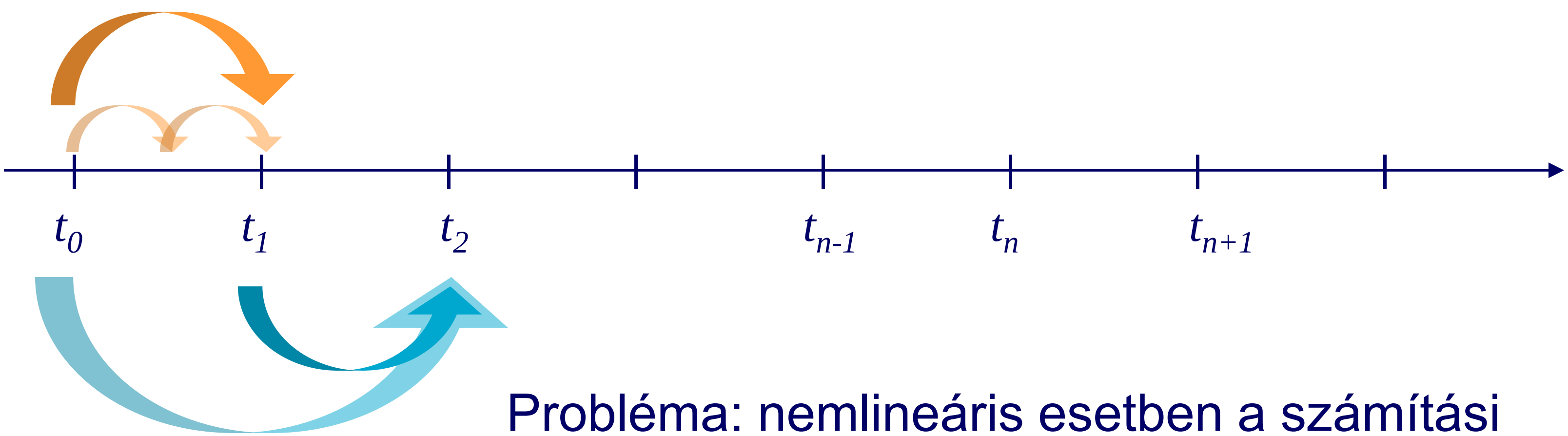
$$\begin{cases} \frac{d\lambda}{dt} + \frac{\mu}{\tau} = 0 & (1') \\ \frac{d\mu}{dt} + \frac{\lambda}{\tau} = 0 & (2') \end{cases}$$

$$(1'+2'):\quad \frac{d(\lambda+\mu)}{dt}+\frac{\lambda+\mu}{\tau}=0 \quad\Longrightarrow\quad \frac{du}{dt}+\frac{u}{\tau}=0$$

$$(1'-2'):\quad \frac{d(\lambda-\mu)}{dt}-\frac{\lambda-\mu}{\tau}=0$$

2 módusz:
1. A kiindulási differenciálegyenlethez tartozik
2. Fiktív, számítási módusz – időlépésenként előjelet vált

Megoldás: a kettő lineáris kombinációja – a számítási módusz eltorzíthatja a megoldást.



Probléma: nemlineáris esetben a számítási módusz amplitúdója az idővel nő – erről később

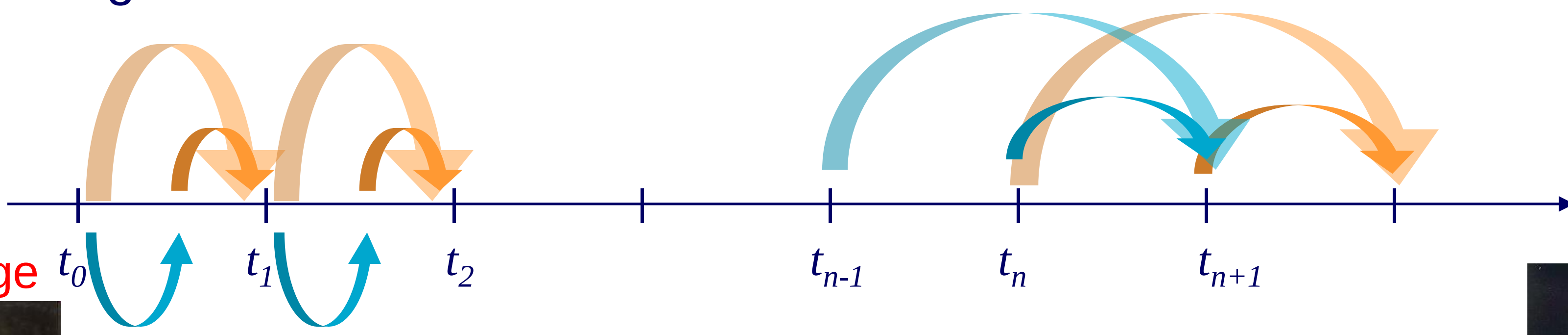
IV. Explicit kétlépéses másodrendű séma:

$$u_{n+1/2} = u_n - f(u_n, t_n) \cdot \frac{\Delta t}{2} \longrightarrow \text{Euler segédlépés}$$

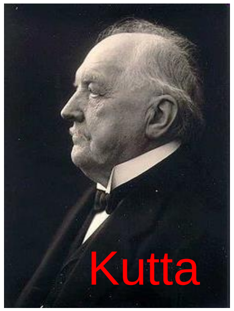
$$u_{n+1} = u_n - f(u_{n+1/2}, t_{n+1/2}) \cdot \Delta t$$

Abban különbözik a leapfrog sémától, hogy a segédlépés a következő időlépcsőben már nem kerül felhasználásra.

Runge-Kutta módszercsalád



Runge

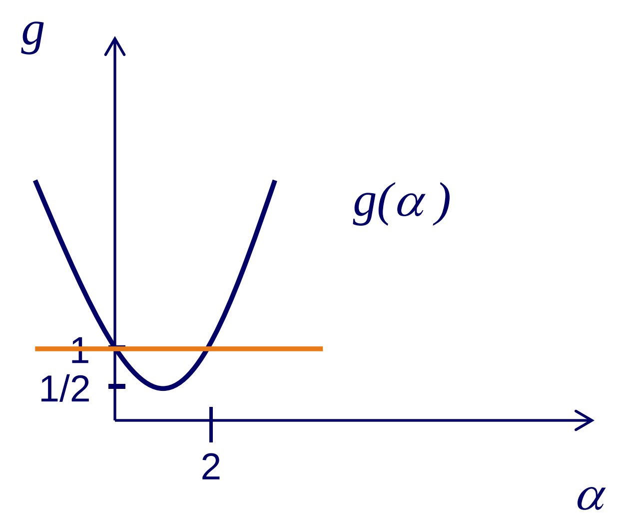


Stabilitási analízis:

$$\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n - \left.\frac{\partial f}{\partial u}\right|_n \cdot \Delta t \cdot \left(1 - \left.\frac{\partial f}{\partial u}\right|_n \cdot \frac{\Delta t}{2}\right) \cdot \varepsilon_n$$

$$\boxed{\alpha \;\rightarrow\; g = 1 - \alpha + \frac{\alpha^2}{2}}$$

$$\frac{\partial f}{\partial u} > 0 \rightarrow \Delta t \le \frac{2}{\left.\frac{\partial f}{\partial u}\right|_n}$$



V. Másodrendű implicit módszer:

$$u_{n+1} = u_n - \left[f\left(u_n, t_n\right) + f\left(u_{n+1}, t_{n+1}\right) \right] \cdot \frac{\Delta t}{2}$$

$$g = 1 - \left.\frac{\partial f}{\partial u}\right|_n \cdot \frac{\Delta t}{2} - \left.\frac{\partial f}{\partial u}\right|_{n+1} \cdot \frac{\Delta t}{2} \cdot g$$

$$g = \frac{1 - \frac{\alpha}{2}}{1 + \frac{\alpha}{2}} \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial u} > 0 \rightarrow g \leq 1$$

$\frac{\partial f}{\partial u}$ képzetes $\rightarrow$ $\left| g \right| = 1$

További időbeli véges differencia sémák

$$H: \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$P: \frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

(a) $\frac{U^{n+1}-U^{n-1}}{2\Delta t} = F(U^n)$	Leapfrog (good for hyperbolic equations, unstable for parabolic equations)
(a′) $\frac{U^{n+1}-\overline{U}^{n-1}}{2\Delta t} = F(U^n)$; $\overline{U}^n = U^n + \alpha(U^{n+1} - 2U^n + \overline{U}^{n-1})$	Leapfrog smoothed with the Robert–Asselin time filter; $\alpha \sim 1\%$
(b) $\frac{U^{n+1}-U^n}{\Delta t} = F(U^n)$	Euler (forward, good for diffusive terms, unstable for hyperbolic equations)
(c) $\frac{U^{n+1}-U^n}{\Delta t} = F\left(\frac{U^n+U^{n+1}}{2}\right)$	Crank–Nicholson or centered implicit
(c′) $\frac{U^{n+1}-U^n}{\Delta t} = F\left(\frac{\beta U^n+(1-\beta)U^{n+1}}{2}\right)$; $\beta < 0.5$	Implicit, slightly damping
(d) $\frac{U^{n+1}-U^n}{\Delta t} = F(U^{n+1})$	Fully implicit or backward

Kalnay, E., 2002: Atmospheric Modeling, Data Assimilation and Predictability

(e) $\frac{U^* - U^n}{\Delta t} = F(U^n)$; $\frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} = F(U^*)$ — Euler-backward or Matsuno: good for damping high frequency waves

(f) $\frac{U^* - U^n}{\Delta t} = F(U^n)$;

$\frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} = F\left(\frac{U^n + U^*}{2}\right)$ — Another predictor–corrector scheme (Heun)

(g) $\frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} = F\left(\frac{3}{2}U^n - \frac{1}{2}U^{n-1}\right)$ — Adams–Bashford (second order in time).

(h) $\frac{U^{n+1/2^*} - U^n}{\Delta t/2} = F(U^n)$;

$\frac{U^{n+1/2^{**}} - U^n}{\Delta t/2} = F(U^{n+1/2^*})$;

$\frac{U^{n+1^*} - U^n}{\Delta t} = F(U^{n+1/2^{**}})$

$$\frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} = \frac{1}{6}[F(U^n) + 2F(U^{n+1/2^*}) + 2F(U^{n+1/2^{**}}) + F(U^{n+1^*})]$$

Runge–Kutta (fourth order)

(i) $a = 0;\ b = 1/\Delta t$

$U^* \leftarrow (aU^* + F(U^n))/b$

$U^n \leftarrow U^n + U^*$

$a \leftarrow a - 1/(N\Delta t);\ b \leftarrow b - 1/(N\Delta t)$

N-times — Lorenz's N-cycle, $N =$ multiple of 4; Nth orde

;

(j) $\frac{U^{n+1} - U^{n-1}}{2\Delta t} = F_1(U^n) + F_2\left(\frac{U^{n+1} + U^{n-1}}{2}\right)$ — Semi-implicit

(k) $\frac{U^* - U^n}{\Delta t} = F_1(U^n)$; $\frac{U^{n+1} - U^*}{\Delta t} = F_2(U^*)$ — Fractional steps

Kalnay, E., 2002: Atmospheric Modeling, Data Assimilation and Predictability

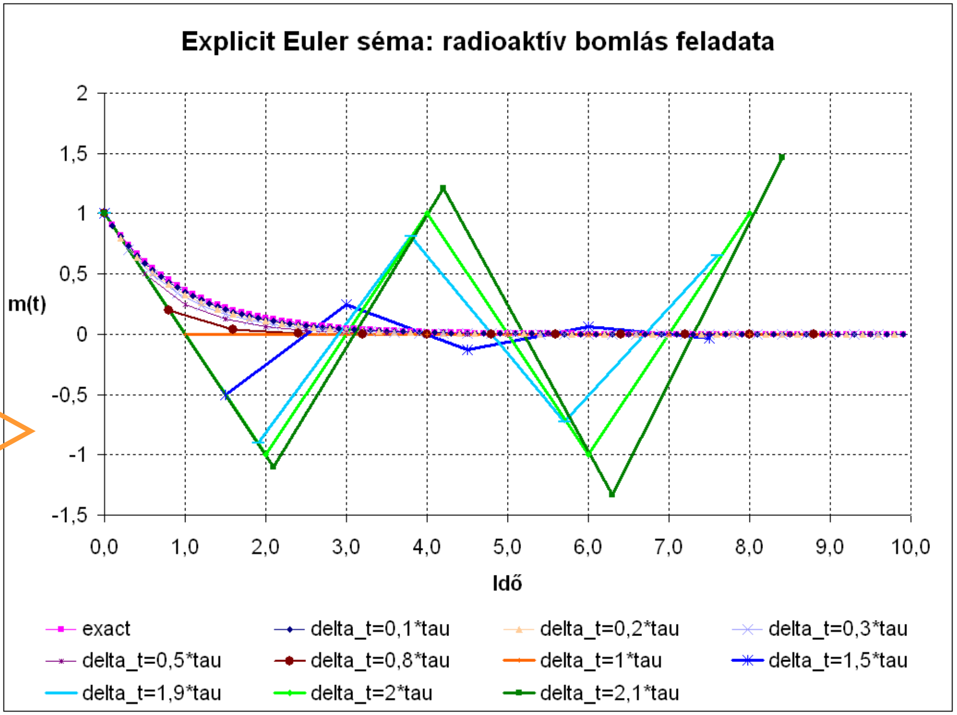
A puding próbája…

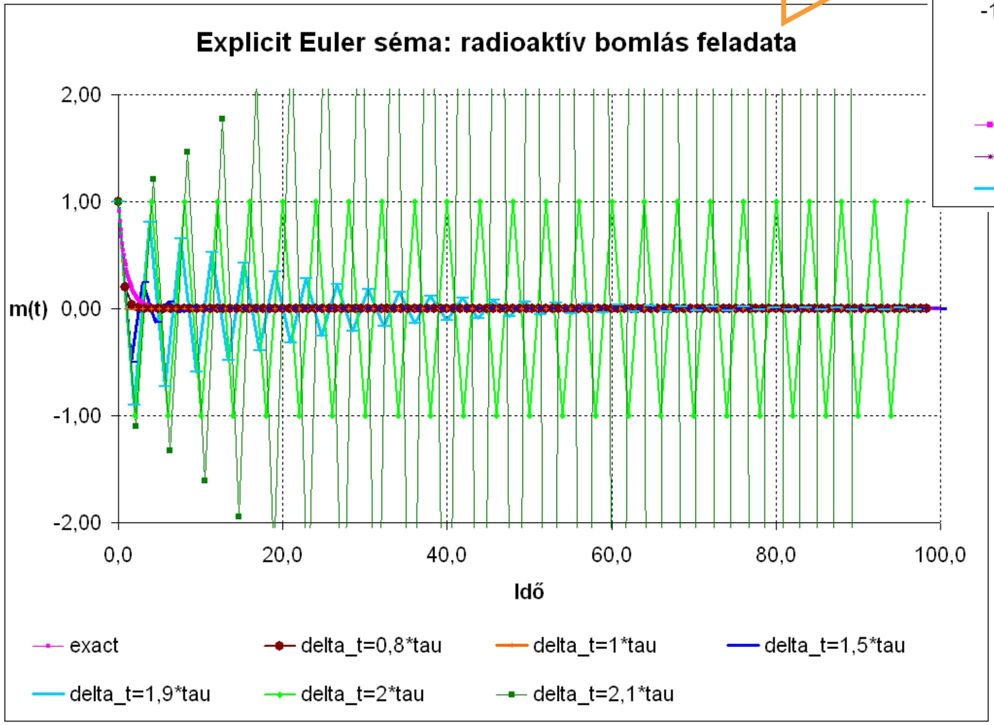
Radioaktív bomlás feladata

$$\begin{cases} \dfrac{dm}{dt} + \dfrac{m}{\tau} = 0 \\ m(0) = 1 \end{cases}$$

Megoldás : $m(t) = e^{-\frac{t}{\tau}}$

Stabilitás i feltétel : $\Delta t \leq 2\tau$

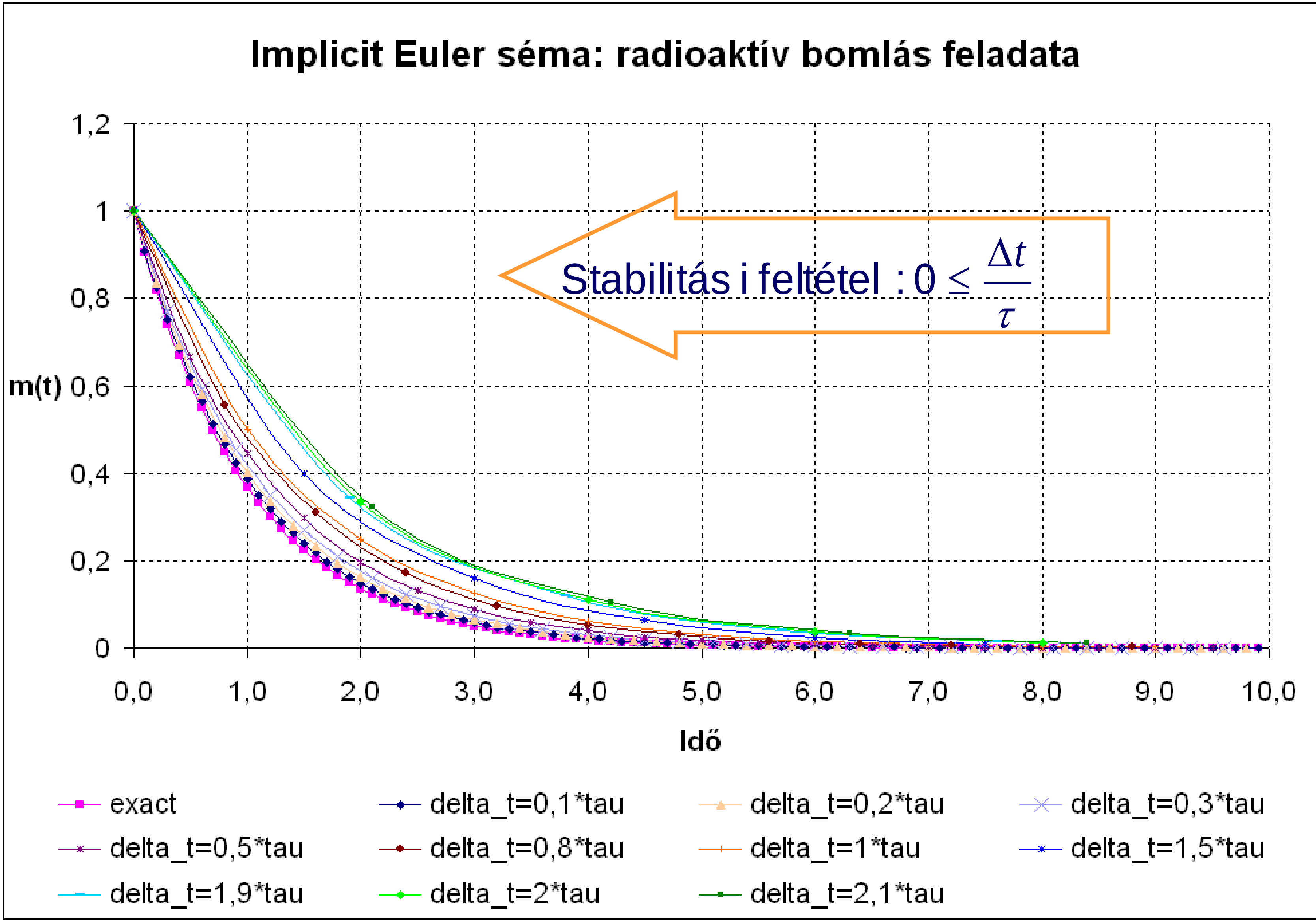




Tisztán látszik, hogy ennél nagyobb időlépcsőkre a hiba nem marad korlátos!

Stabilitás → fizikai értelem?

Implicit Euler séma

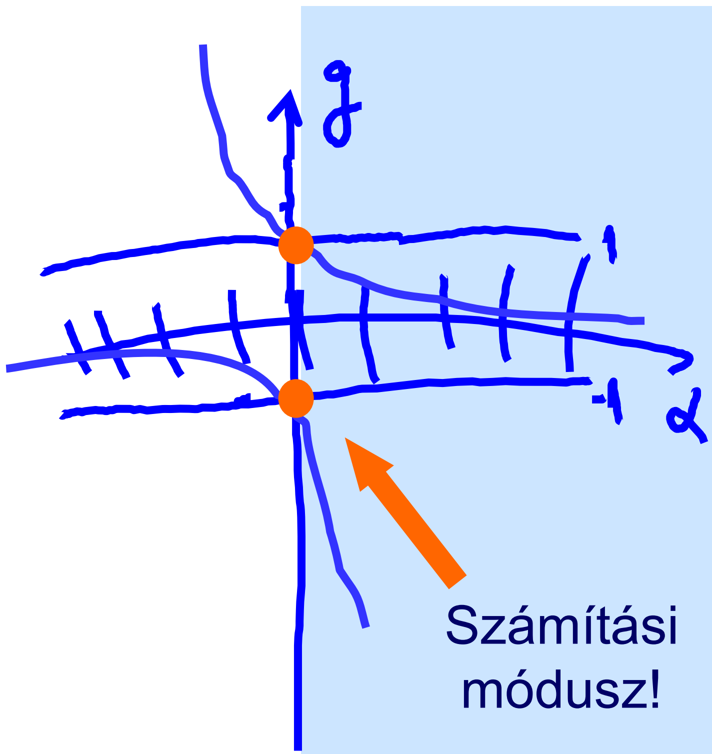


Leapfrog séma

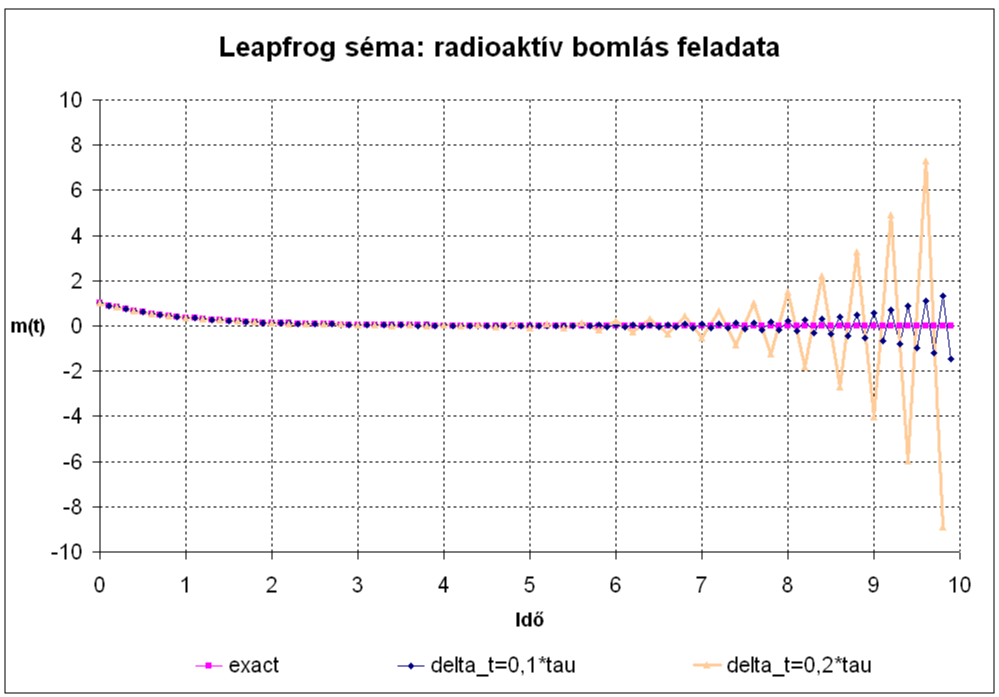
Stabilitási analízise:

$$g^2 + 2\alpha g - 1 = 0$$

Ha g tisztán valós, nincs képzetes rész (ahogyan itt is), akkor az egyik gyök mindig nagyobb 1-nél – instabilitás!



Számítási módusz!



Oszcilláló megoldás – számítási módusz szűrése