Studijní materiál k přednášce

Numerické řešení parciálních diferenciálních rovnic

Petr Knobloch

1 Úvod

V mnoha vědeckých a technických oblastech se setkáváme s matematickými modely sestávajícími z parciálních diferenciálních rovnic (PDR). Obvykle tyto modely nelze vyřešit analyticky a jejich řešení je potřeba aproximovat pomocí numerických metod. Za tím účelem bylo vyvinuto velké množství různých postupů. Cílem přednášky *Numerické řešení parciálních diferenciálních rovnic* je seznámit studenty s metodou konečných diferencí, k jejíž analýze postačují základní vědomosti z přednášek věnovaných matematické analýze. Budou vysvětleny hlavní myšlenky a prostředky analýzy metody konečných diferencí a studovány vlastnosti různých diskretizací pro základní příklady PDR (transportní rovnice, rovnice vedení tepla, rovnice difúze). Získané znalosti budou užitečné i pro získání představy o tom, s jakými problémy je nutno se vypořádávat při vývoji a aplikaci jiných numerických metod pro řešení PDR. Navíc je metoda konečných diferencí stále běžným prostředkem pro aproximaci časových derivací v PDR, zatímco diskretizace vzhledem k prostorovým proměnným je často získávána jinými přístupy (např. metodou konečných prvků). Jelikož však každá numerická metoda vede na soustavu algebraických rovnic, lze některé poznatky z této přednášky využít i při studiu vlastností diskretizací získaných jinými postupy.

1.1 Diferenční kvocienty

Metoda konečných diferencí je založena na tom, že se diferenciální rovnice uvažuje pouze v izolovaných bodech a derivace v těchto bodech se nahradí diferenčními kvocienty. Zmíněné body se získají jako uzly sítě pokrývající výpočetní oblast, a proto jiný název této numerické metody je metoda sítí.

Mějme funkci $v : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$. Pak její první derivace v bodě $x \in \mathbb{R}$ je definována vztahem

$$v'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{v(x+h) - v(x)}{h} \,. \tag{1}$$

Zvolíme-li $h > 0$, pak můžeme derivaci $v'(x)$ aproximovat vztahem

$$v'(x) \approx \frac{v(x+h) - v(x)}{h} \,. \tag{2}$$

Je-li funkce v dostatečně hladká, lze očekávat, že diferenční kvocient v (2) aproximuje $v'(x)$ tím lépe, čím je h menší. Zanedlouho uvidíme, že toto očekávání je správné.

Místo (1) můžeme též psát

$$v'(x) = \lim_{h\to 0} \frac{v(x) - v(x-h)}{h}\,, \tag{3}$$

a tedy i (zprůměrujeme-li (1) a (3))

$$v'(x) = \lim_{h\to 0} \frac{v(x+h) - v(x-h)}{2\,h}\,.$$

Tomu odpovídají aproximace

$$v'(x) \approx \frac{v(x) - v(x-h)}{h}\,, \qquad \text{resp.} \qquad v'(x) \approx \frac{v(x+h) - v(x-h)}{2\,h}\,,$$

popř.

$$v'(x) \approx \frac{v(x+\frac{h}{2}) - v(x-\frac{h}{2})}{h}\,.$$

Abychom zápis uvažovaných aproximací zpřehlednili, zavádíme pro diference následující označení (vždy předpokládáme, že $h > 0$):

dopředná diference:	$\Delta_+\, v(x) = v(x+h) - v(x)$,
zpětná diference:	$\Delta_-\, v(x) = v(x) - v(x-h)$,
centrální diference s dvojnásobnou délkou intervalu:	$\Delta_0\, v(x) = \frac{1}{2}\,[v(x{+}h){-}v(x{-}h)]$,
centrální diference:	$\delta\, v(x) = v(x+\frac{h}{2}) - v(x-\frac{h}{2})$.

Pak uvedené aproximace můžeme psát ve tvaru

$$v' \approx \frac{\Delta_+\, v}{h}\,, \qquad \text{resp.} \qquad v' \approx \frac{\Delta_-\, v}{h}\,, \qquad \text{resp.} \qquad v' \approx \frac{\Delta_0\, v}{h}\,, \qquad \text{resp.} \qquad v' \approx \frac{\delta\, v}{h}\,.$$

Je-li $v \in C^2(\mathbb{R})$, zjišťujeme pomocí Taylorova vzorce, že všechny tyto aproximace vedou k chybě $O(h)$ (tj. velikost chyby lze v každém bodě x omezit hodnotou Ch s konstantou C nezávislou na h). Je-li $v \in C^3(\mathbb{R})$, dostáváme navíc

$$\frac{\Delta_0\, v}{h} = v' + O(h^2)\,, \qquad \frac{\delta\, v}{h} = v' + O(h^2)\,.$$

Chceme-li aproximovat $v''(x)$, pak můžeme postupovat následovně:

$$v''(x) \approx \frac{\delta\, v'(x)}{h} \approx \frac{\delta^2\, v(x)}{h^2}\,.$$

Platí

$$\delta^2\, v(x) = v(x+h) - 2\,v(x) + v(x-h)$$

a tento výraz se nazývá centrální diference druhého řádu. Snadno ověříme, že

$$\delta^2 = \Delta_+\,\Delta_- = \Delta_-\,\Delta_+\,.$$

Použitím Taylorova vzorce dostaneme pro $v \in C^4(\mathbb{R})$

$$\frac{\delta^2 v}{h^2} = v'' + O(h^2)\,.$$

Podobně pro $v \in C^6(\mathbb{R})$ je

$$\frac{\delta^4 v}{h^4} = v^{(4)} + O(h^2)\,.$$

Přitom

$$\delta^4 v(x) = v(x+2\,h) - 4\,v(x+h) + 6\,v(x) - 4\,v(x-h) + v(x-2\,h)\,.$$

1.2 Příklady diskretizací Cauchyovy úlohy pro rovnici konvekce–difúze v jedné prostorové dimenzi

Ukažme si nyní, jak pomocí metody konečných diferencí lze získat diskretizaci Cauchyovy úlohy pro danou parciální diferenciální rovnici. Jako příklad budeme uvažovat rovnici konvekce–difúze v jedné prostorové dimenzi. Hledáme tedy funkci $u = u(x,t)$ závisející na prostorové proměnné $x \in \mathbb{R}$ a časové proměnné $t \in \mathbb{R}_0^+$ splňující parciální diferenciální rovnici

$$u_t = b\,u_{xx} - a\,u_x \qquad \text{v } \mathbb{R}\times\mathbb{R}^+ \tag{4}$$

s počáteční podmínkou

$$u(x,0) = u^0(x) \qquad \forall\, x \in \mathbb{R}\,, \tag{5}$$

kde u^0 je daná funkce. Parametr b představuje koeficient difúze, a proto předpokládáme, že $b > 0$. Parametr a určuje rychlost šíření veličiny u vlivem konvekce (unášení). Pro jednoduchost předpokládáme, že a a b jsou konstanty.

Jak již bylo zmíněno výše, základem diskretizace metodou konečných diferencí je síť pokrývající výpočetní oblast, v jejíchž uzlech aproximujeme parciální diferenciální rovnici rovnicemi algebraickými. Pro jednoduchost budeme nyní uvažovat rovnoměrnou síť s konstantním prostorovým krokem $h > 0$ a konstantním časovým krokem $\tau > 0$. Definujeme prostorové uzly $x_j = j\,h$, $j \in \mathbb{Z}$, a časové hladiny $t_n = n\,\tau$, $n \in \mathbb{N}_0$. Rovnoběžky se souřadnými osami protínající tyto osy v bodech x_j a t_n jsou takzvané síťové přímky, které vytvářejí síť pokrývající výpočetní oblast $\mathbb{R}\times\mathbb{R}_0^+$. Průsečíky síťových přímek (x_j,t_n), kde $j \in \mathbb{Z}$ a $n \in \mathbb{N}_0$, nazveme uzly sítě. Řešení u Cauchyovy úlohy (4), (5) aproximujeme v uzlech (x_j,t_n) hodnotami U_j^n. Síťová funkce $\{U_j^n\}$ je pak přibližným řešením uvažované Cauchyovy úlohy. Pro přehlednost zavádíme též označení $u_j^n := u(x_j,t_n)$.

Přibližné řešení $\{U_j^n\}$ získáme tak, že parciální diferenciální rovnici v uzlech sítě nahradíme diferenčním schématem. Uvažujme libovolný uzel (x_j,t_n) s $j \in \mathbb{Z}$ a $n \in \mathbb{N}_0$. Pak rovnici (4) můžeme s využitím vztahů z předešlého oddílu aproximovat například následovně:

$$\begin{aligned}
0 &= (u_t - b\, u_{xx} + a\, u_x)(x_j, t_n) \\
&\approx \frac{u(x_j, t_n + \tau) - u(x_j, t_n)}{\tau} - b\, \frac{u(x_j + h, t_n) - 2\, u(x_j, t_n) + u(x_j - h, t_n)}{h^2} \\
&\quad + a\, \frac{u(x_j + h, t_n) - u(x_j - h, t_n)}{2\, h} \\
&= \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} - b\, \frac{u_{j+1}^n - 2\, u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + a\, \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\, h} \\
&\approx \frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\tau} - b\, \frac{U_{j+1}^n - 2\, U_j^n + U_{j-1}^n}{h^2} + a\, \frac{U_{j+1}^n - U_{j-1}^n}{2\, h}\,.
\end{aligned}$$

Použijeme-li symboly pro diference, můžeme uvedené aproximace zapsat v přehlednějším tvaru:

$$\begin{aligned}
0 = (u_t - b\, u_{xx} + a\, u_x)(x_j, t_n) &\approx \frac{\Delta_{+t}\, u_j^n}{\tau} - b\, \frac{\delta_x^2\, u_j^n}{h^2} + a\, \frac{\Delta_{0x}\, u_j^n}{h} \\
&\approx \frac{\Delta_{+t}\, U_j^n}{\tau} - b\, \frac{\delta_x^2\, U_j^n}{h^2} + a\, \frac{\Delta_{0x}\, U_j^n}{h}\,.
\end{aligned}$$

Nyní u symbolů pro diference vyznačujeme indexem x či t, vzhledem ke které proměnné je diference definována. Např.

$$\Delta_{+t}\, u(x,t) = u(x, t+\tau) - u(x,t)\,, \qquad \Delta_{+x}\, u(x,t) = u(x+h, t) - u(x,t)\,.$$

Rovnici (4) tedy aproximujeme numerickým schématem

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\tau} = b\, \frac{U_{j+1}^n - 2\, U_j^n + U_{j-1}^n}{h^2} - a\, \frac{U_{j+1}^n - U_{j-1}^n}{2\, h} \qquad \forall\ j \in \mathbb{Z},\ n \in \mathbb{N}_0\,, \tag{6}$$

které je nutno doplnit počáteční podmínkou

$$U_j^0 = u^0(x_j) \qquad \forall\ j \in \mathbb{Z}\,. \tag{7}$$

Jedná se o příklad tzv. explicitního schématu, neboť hodnotu přibližného řešení v libovolném uzlu (x_j, t_n) s $j \in \mathbb{Z}$ a $n \in \mathbb{N}$ lze ze schématu vyjářit pomocí hodnot přibližného řešení na předcházející časové vrstvě t_{n-1}. Přibližné řešení tedy existuje a je určeno jednoznačně. Označíme-li

$$\mu = \frac{\tau}{h^2}\, b\,, \qquad \nu = \frac{\tau}{h}\, a\,, \tag{8}$$

můžeme schéma (6) psát ve tvaru

$$U_j^{n+1} = U_j^n + \mu\, (U_{j+1}^n - 2\, U_j^n + U_{j-1}^n) - \frac{\nu}{2}\, (U_{j+1}^n - U_{j-1}^n)\,, \tag{9}$$

který je v některých případech vhodnější pro analýzu.

Jelikož existuje řada způsobů, jak pomocí diferenčních kvocientů aproximovat derivace, získáme různými kombinacemi diferenčních kvocientů mnoho rozličných numerických schémat pro aproximaci dané parciální diferenciální rovnice. Jak uvidíme později, takto získaná schémata mohou mít velmi odlišné vlastnosti. Ukažme si ještě dvě schémata, která lze definovat pro rovnici (4). Uvažujeme-li tuto rovnici v uzlu (x_j, t_{n+1}) s $j \in \mathbb{Z}$ a $n \in \mathbb{N}_0$, můžeme provést následující aproximace:

$$\begin{aligned} 0 = (u_t - b\,u_{xx} + a\,u_x)(x_j, t_{n+1}) &\approx \frac{\Delta_{-t}\,u_j^{n+1}}{\tau} - b\,\frac{\delta_x^2\,u_j^{n+1}}{h^2} + a\,\frac{\Delta_{0x}\,u_j^{n+1}}{h} \\ &\approx \frac{\Delta_{-t}\,U_j^{n+1}}{\tau} - b\,\frac{\delta_x^2\,U_j^{n+1}}{h^2} + a\,\frac{\Delta_{0x}\,U_j^{n+1}}{h}\,, \end{aligned}$$

což vede ke schématu

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\tau} = b\,\frac{U_{j+1}^{n+1} - 2\,U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1}}{h^2} - a\,\frac{U_{j+1}^{n+1} - U_{j-1}^{n+1}}{2\,h} \qquad \forall\ j \in \mathbb{Z},\ n \in \mathbb{N}_0\,, \tag{10}$$

k němuž opět musíme přidat počáteční podmínku (7). Nyní již v daném uzlu není možné jednoduchým způsobem vyjádřit hodnotu přibližného řešení pomocí hodnot z předchozí časové hladiny a hodnoty přibližného řešení na nové časové hladině je nutno získat vyřešením soustavy lineárních rovnic. Jedná se o příklad tzv. implicitního schématu.

Sečteme-li schémata (6) a (10), získáme po vydělení dvěma schéma

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\tau} = b\,\frac{\delta_x^2\,U_j^{n+1} + \delta_x^2\,U_j^n}{2\,h^2} - a\,\frac{U_{j+1}^{n+1} - U_{j-1}^{n+1} + U_{j+1}^n - U_{j-1}^n}{4\,h} \qquad \forall\ j \in \mathbb{Z},\ n \in \mathbb{N}_0\,.$$

Toto schéma je opět implicitní a nazývá se schéma Crankovo–Nicolsonové. Jelikož hodnoty přibližného řešení, které toto schéma kombinuje, vykazují symetrické uspořádání nejen vzhledem k x_j, ale i vzhledem k $t_{n+1/2} := t_n + \tau/2$, aproximuje toto schéma parciální diferenciální rovnici (4) při $h, \tau \to 0$ s menší chybou než předchozí dvě schémata.

1.3 Chyba diskretizace

Chyba diskretizace je chyba, které se dopouštíme, když derivace v diferenciální rovnici nahradíme diferenčními kvocienty. Získáme ji dosazením přesného řešení do numerického schématu ve tvaru odpovídajícím nahrazení derivací diferenčními kvocienty a odečtením pravé strany od levé.

Jako příklad uvažujme schéma (6) pro numerické řešení rovnice (4). Pro definici chyby diskretizace použijeme tvar schématu s diferenčními kvocienty (tj. (6)), nikoli ekvivalentní tvar (9). Chyba diskretizace je pak dána vztahem

$$\varepsilon_j^n = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} - b\,\frac{u_{j+1}^n - 2\,u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + a\,\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\,h}\,,$$

kde $u_j^n = u(x_j, t_n)$. Tento vztah můžeme též psát ve tvaru

$$\varepsilon_j^n = \frac{\Delta_{+t}\,u_j^n}{\tau} - b\,\frac{\delta_x^2\,u_j^n}{h^2} + a\,\frac{\Delta_{0x}\,u_j^n}{h}\,.$$