Tomáš Oberhuber

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering
Czech Technical University in Prague

# Samoadjungovaná úloha

Budeme řešit rovnici tvaru:

$$
\begin{aligned}
-(p(x)u'(x))' + q(x)u(x) &= f(x) \text{ na } (0,1) \\
u(0) &= \gamma_1 \\
u(1) &= \gamma_2
\end{aligned}
$$

- úlohu bychom mohli pomocí **metodou střelby převést na řešení ODR**
- tento postup ale nelze zobecnit na úlohy s více prostorovými proměnnými, tj. na **eliptické parciální diferenciální rovnice**
- druhá možnost je převedení úlohy na systém **algebraických rovnic pomocí diskretizace diferenciálního operátoru**

# Samoadjungovaná úloha - diskretizace

Interval $(0, 1)$ pokryjeme ekvidistantní sítí uzlů

$$\omega_h = \{x_i = ih \mid i = 0, \ldots N\},$$

kde $h = 1/N$ a budeme používat značení $u_i = u(x_i), f_i = f(x_i)$ apod.

# Samoadjungovaná úloha - diskretizace

Pak lze psát:

$$
\begin{aligned}
-\left(p(x)\,u'(x)\right)'\,|_{x_i} &\approx -\frac{p(x)u'(x)\,|_{x_{i+1}} - p(x)u'(x)\,|_{x_i}}{h}, \\
p(x)u'(x)\,|_{x_{i+1}} &\approx p_{i+1}\frac{u_{i+1}-u_i}{h} \\
p(x)u'(x)\,|_{x_i} &\approx p_i\frac{u_i-u_{i-1}}{h}
\end{aligned}
$$

a tedy

$$
-\left(p(x)\,u'(x)\right)'\,|_{x_i} \approx -\frac{p_i u_{i-1} - (p_i + p_{i+1})u_i + p_{i+1}u_{i+1}}{h^2}
$$

# Samoadjungovaná úloha - diskretizace

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

pro $i = 1, \ldots N - 1$. Např. pro $q(x) \equiv 0$ dostáváme:

$$\begin{aligned}
u_0 &= \gamma_1 \\
-p_1 u_0 + (p_1 + p_2) u_1 - p_2 u_2 &= f_1 h^2 \\
-p_2 u_1 + (p_2 + p_3) u_2 - p_3 u_3 &= f_2 h^2 \\
-p_3 u_2 + (p_3 + p_4) u_3 - p_4 u_4 &= f_3 h^2 \\
&\vdots \\
-p_{N-1} u_{N-2} + (p_{N-1} + p_N) u_{N-1} - p_N u_N &= f_{N-1} h^2 \\
u_N &= \gamma_2
\end{aligned}$$

# Samoadjungovaná úloha - diskretizace

To lze přepsat do maticového tvaru jako:

$$\mathbb{A}\mathbf{u} = \mathbf{b},$$

kde

$$\mathbb{A} = \left( \begin{array}{cccccccc}
1 & & & & & & & \\
-p_1 & p_1 + p_2 & -p_2 & & & & & \\
 & -p_2 & p_2 + p_3 & -p_4 & & & & \\
 & & -p_3 & p_4 + p_5 & -p_5 & & & \\
 & & & \ddots & \ddots & & \ddots & \\
 & & & & & -p_{N-1} & p_{N-1} + p_N & -p_N \\
 & & & & & & & 1
\end{array} \right),$$

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_{n-1} \\ u_n \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ h^2 f_1 \\ \vdots \\ h^2 f_{N-1} \\ \gamma_2 \end{pmatrix}$$

Řešení **u** lze tak získat řešením soustavy lineárních rovnic.

# Poissonova rovnice

A je-li $p(x) \equiv 1$, dostáváme aproximaci tzv. **Poissonovy rovnice**:

$$-u''(x) = f(x) \text{ na } (0,1)$$

ve tvaru:

$$\begin{aligned}
u_0 &= \gamma_1 \\
-u_0 + 2u_1 - u_2 &= f_1 h^2 \\
-u_1 + 2u_2 - u_3 &= f_2 h^2 \\
-u_2 + 2u_3 - u_4 &= f_3 h^2 \\
&\vdots \\
-u_{N-2} + 2u_{N-1} - u_N &= f_{N-1} h^2 \\
u_N &= \gamma_2
\end{aligned}$$

# Poissonova rovnice

Matice soustavy pak má tvar:

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & & \\ & -1 & 2 & -1 & & & \\ & & -1 & 2 & -1 & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix}.$$

Jde pak tedy o tridiagonální soustavu lineárních rovnic, kterou lze dobře řešit pomocí **Thomasova algoritmu**. Úloha je implementována v `pde/poisson-1d.cpp`.

# Eliptické PDR ve 2D

Budeme řešit úlohu:

$$
\begin{aligned}
-\frac{\partial}{\partial x}\left(p(x,y)\frac{\partial u(x,y)}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(p(x,y)\frac{\partial u(x,y)}{\partial y}\right) &= f(x,y) \text{ na } \Omega,\\
u(x,y) &= g(x,y) \text{ na } \partial\Omega,
\end{aligned}
$$

kde

- $\Omega \equiv (0,1) \times (0,1)$
- $u : \langle 0,1 \rangle \times \langle 0,1 \rangle \to \mathbb{R}$
- $p : \langle 0,1 \rangle \times \langle 0,1 \rangle \to \mathbb{R}$
- $g : \langle 0,1 \rangle \times \langle 0,1 \rangle \to \mathbb{R}$

První rovnici lze také zapsat takto:

$$
-\nabla \cdot (p(x,y)\nabla u(x,y)) = f(x,y) \text{ na } (0,1) \times (0,1).
$$

# Eliptické PDR ve 2D

Uzávěr oblasti $\overline{\Omega}$ nyní diskretizujeme takto

$$\omega_h \equiv \{(ih_x, jh_y) \mid i = 0, \ldots, N_x \wedge j = 0, \ldots, N_y\},$$

kde

- $N_x$ a $N_y$ udává rozlišení diskretizace podle jednotlivých os
- $h_x = 1/N_x$
- $h_y = 1/N_y$
- pro jednoduchost budeme předpokládat $N_x = N_y = N$ a $h_x = h_y = h$, tj.

$$\omega_h \equiv \{(ih, jh) \mid i = 0, \ldots, N \wedge j = 0, \ldots, N\}.$$

# Eliptické PDR ve 2D

Pro libovolný vnitřní uzel $ij$, tj. $i > 0 \wedge j > 0 \wedge i < N \wedge j < N$ lze použitím dopředné diference na vnější derivaci a zpětné diference na vnitřní derivaci psát:

$$
\begin{aligned}
&-\frac{\partial}{\partial x}\left(p(x,y)\frac{\partial u(x,y)}{\partial x}\right)\Big|_{ij} \approx \\
&-\frac{p(x,y)\frac{\partial u(x,y)}{\partial x}\ |_{i+1,j} - p(x,y)\frac{\partial u(x,y)}{\partial x}\ |_{i,j}}{h} \approx \\
&-\frac{1}{h}\left(p_{i+1,j}\frac{u_{i+1,j}-u_{ij}}{h} - p_{i,j}\frac{u_{i,j}-u_{i-1,j}}{h}\right) = \\
&-\frac{p_{i+1,j}u_{i+1,j} - (p_{i+1,j}+p_{ij})u_{ij} + p_{ij}u_{i-1,j}}{h^2}.
\end{aligned}
$$

A podobně lze odvodit

$$
\begin{aligned}
&-\frac{\partial}{\partial y}\left(p(x,y)\frac{\partial u(x,y)}{\partial y}\right)\Big|_{ij} \approx \\
&-\frac{p_{i,j+1}u_{i,j+1} - (p_{i,j+1}+p_{ij})u_{ij} + p_{ij}u_{i,j-1}}{h^2}.
\end{aligned}
$$

# Poissonova rovnice ve 2D

Předpokládejme opět, že $p(x,y) \equiv 1$. Pak dostáváme:

$$
\begin{aligned}
& -\nabla \cdot \left(p\left(x,y\right)\nabla u\left(x,y\right)\right) \approx \\
& -\frac{u_{i+1,j} - 2u_{ij} + u_{i-1,j}}{h^2} - \frac{u_{i,j+1} - 2u_{ij} + u_{i,j-1}}{h^2} = \\
& \frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{ij}}{h^2}
\end{aligned}
$$

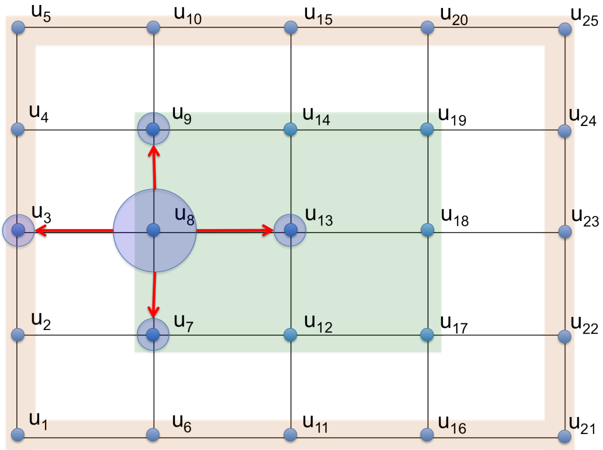
Dostáváme tak soustavu lineárních algebraických rovnic:

$$
\begin{aligned}
u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{ij} &= h^2 f_{ij} \\
\text{pro } i,j = 1,\ldots,N-1, & \\
u_{ij} &= g_{ij} \\
\text{pro } i = 0 \vee j = 0 \vee i = N \vee j = N. &
\end{aligned}
$$

# Poissonova rovnice ve 2D

- předchozí soustava není vhodná pro přepis do maticového tvaru, neboť neznámé $u_{ij}$ závisí na dvojici indexů $i, j$
- provedeme transformaci $(i, j) \rightarrow I$ očíslováním uzlů sítě $\omega_h$ po řádcích
$$I(i, j) = jN + i.$$

# Poissonova rovnice ve 2D



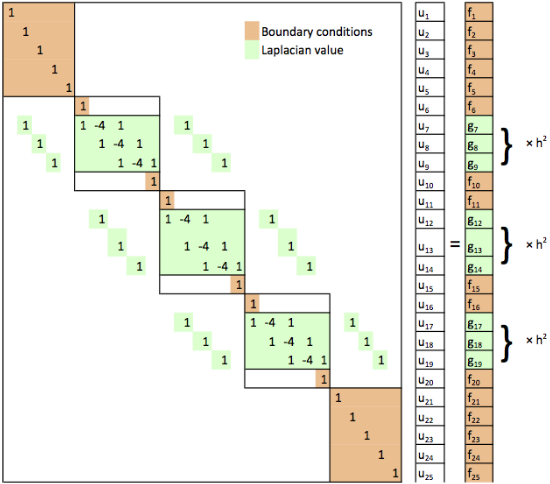

Příklad s indexováním po sloupcích od 1 do $N^2$.

# Poissonova rovnice ve 2D

Pak dostáváme rovnice tvaru:

$$
\begin{aligned}
u_1 &= g_1 \\
u_2 &= g_2 \\
u_3 &= g_3 \\
u_4 &= g_4 \\
u_5 &= g_5 \\
u_6 &= g_6 \\
u_2 + u_6 + u_8 + u_{12} - 4u_7 &= f_7 \\
u_3 + u_7 + u_9 + u_{13} - 4u_8 &= f_8 \\
u_4 + u_8 + u_{10} + u_{14} - 4u_9 &= f_9 \\
u_{10} &= g_{10} \\
u_{11} &= g_{11} \\
u_7 + u_{11} + u_{13} + u_{17} - 4u_{12} &= f_{12} \\
&\vdots \\
u_{14} + u_{18} + u_{20} + u_{24} - 4u_{19} &= f_{19} \\
u_{20} &= g_{20} \\
&\vdots \\
u_{25} &= g_{25}
\end{aligned}
$$

# Poissonova rovnice ve 2D




Pozn.: Na obrázku je prohozen význam funkcí $f$ a $g$.

# Ellpack formát

- výsledná matice je řídká, ale ne tridiagonální
- k jejímu uložení použijeme **Ellpack formát**

| | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 5 | | 2 | | | | | |
| | | 1 | | | | | |
| | 3 | | | | | | |
| 5 | | | | | | | |
| 4 | | | | | | | |
| | 2 | | | | | 9 | |
| | | 2 | | | 5 | | 3 |
| | | | | 1 | | | 7 |

| `values[]` | | |
|---|---|---|
| 5 | 2 | 0 |
| 1 | 0 | 0 |
| 3 | 0 | 0 |
| 5 | 0 | 0 |
| 4 | 0 | 0 |
| 2 | 9 | 0 |
| 2 | 5 | 3 |
| 1 | 7 | 0 |

| `columns[]` | | |
|---|---|---|
| 0 | 2 | * |
| 2 | * | * |
| 1 | * | * |
| 0 | * | * |
| 0 | * | * |
| 1 | 6 | * |
| 2 | 5 | 7 |
| 5 | 7 | * |

# Ellpack formát

Formát Ellpack lze použít vložením souboru `matrices/EllpackMatrix.h`

- nejprve je potřeba nastavit rozměry matice voláním `setDimensions( rows, columns)` nebo pomocí konstruktoru
- dále je potřeba zadat maximální počet nenulových prvků v řádku (pro všechny řádky je stejný) voláním `setRowLength(nonzeros)`
- následně je možné nastavovat jednotlivé prvky matice voláním `setElement(row,column,value)`

# Poissonova rovnice ve 2D

**Domácí úkol:**

- do souboru `pde/poisson-2d.cpp` doplňte potřebný kód pro vyřešení Poissonovy úlohy ve 2D
- proveďte výpočetní studii pro různé okrajové podmínky a pravé strany $f$
- porovnejte rychlost konvergence různých stacionárních metod
- najděte nejvhodnější parametr $\omega$ pro SOR metodu
- zmenšujte $h$ a sledujte počet iterací nutných pro vyřešení lineární soustavy rovnic
- napište report a odevzdejte spolu se zdrojovým kódem

# Poissonova rovnice ve 2D

- přesnost aproximace je dána použitými konečnými diferencemi
- bude-li řešení $u$ dostatečně hladké, tj. $u \in C^4(\Omega)$ a tudíž $f \in C^2(\Omega)$, pak jde o náhrady druhé derivace s přesností druhého řádu
- zmenšení $h \to h/2$ způsobí 4x menší chybu aproximace
- zmenšení $h \to h/2$ způsobí 4x více uzlů sítě $\omega_h$
- podmíněnost matice soustavy je úměrná $1/h$, tj. roste počet iterací nutných k vyřešení lineární soustavy
- schémata s vyšším řádem přesnosti tak mohou vést na přesnější řešení s menším počtem uzlů sítě a tedy kratším výpočetním časem

# Nelineární úlohy

Mějme úlohu tvaru:

$$
\begin{aligned}
-\nabla \cdot \left( p\left(x, y, u(x,y)\right) \nabla u\left(x,y\right)\right) &= f(x,y) \text{ na } \Omega, \\
u(x,y) &= g(x,y) \text{ na } \partial\Omega.
\end{aligned}
$$

Čím se bude lišit diskretizace této úlohy?

# Nelineární úlohy

$$
-\frac{\partial}{\partial x}\left(p(x,y,u)\frac{\partial u(x,y)}{\partial x}\right)\Big|_{ij} \approx
$$

$$
-\frac{p(x,y,u)\frac{\partial u(x,y)}{\partial x}\ |_{i+1,j} - p(x,y,u)\frac{\partial u(x,y)}{\partial x}\ |_{i,j}}{h} \approx
$$

$$
-\frac{1}{h}\left(p(u)_{i+1,j}\frac{u_{i+1,j}-u_{ij}}{h} - p(u)_{i,j}\frac{u_{i,j}-u_{i-1.j}}{h}\right) =
$$

$$
-\frac{p(u)_{i+1,j}u_{i+1,j} - (p(u)_{i+1,j} + p(u)_{ij})u_{ij} + p(u)_{ij}u_{i-1,j}}{h^2}.
$$

# Nelineární úlohy

$$
-\frac{\partial}{\partial x}\left(p(x,y,u)\frac{\partial u(x,y)}{\partial x}\right)\Big|_{ij} \approx
$$

$$
-\frac{p(x,y,u)\frac{\partial u(x,y)}{\partial x}\,|_{i+1,j} - p(x,y,u)\frac{\partial u(x,y)}{\partial x}\,|_{i,j}}{h} \approx
$$

$$
-\frac{1}{h}\left(p(u)_{i+1,j}\frac{u_{i+1,j}-u_{ij}}{h} - p(u)_{i,j}\frac{u_{i,j}-u_{i-1.j}}{h}\right) =
$$

$$
-\frac{p(u)_{i+1,j}u_{i+1,j} - (p(u)_{i+1,j} + p(u)_{ij})u_{ij} + p(u)_{ij}u_{i-1,j}}{h^2}.
$$

- závislost na $u$ už není lineární, ale nelineární
- ve výsledku tak dostaneme soustavu nelineárních algebraických rovnic
- na jejich řešení lze použít Newtonovu metodu