

Numeričko rješavanje parcijalnih diferencijalnih jednačbi:

- Numeričko rješavanje paraboličke jednačbe - difuzijske jednačbe
 - Eksplicitna metoda konačnih razlika
 - Potpuna implicitna metoda konačnih razlika
 - Crank-Nicolsonova metoda
- Numeričko rješavanje eliptičke jednačbe - Poissonove jednačbe

Linearna PDJ drugog reda

Linearna PDJ drugog reda

$$Au_{xx} + 2Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + Fu = f,$$

sa A, B, C, D, E, F, f (po dijelovima) neprekidne u $\Omega \subset \mathbb{R}^2$

Klasifikacija: PDJ s $A^2 + B^2 + C^2 \neq 0$ u Ω

- parabolička, ako je $AC - B^2 = 0$ za sve $(x, y) \in \Omega$
- eliptička, ako je $AC - B^2 > 0$ za sve $(x, y) \in \Omega$
- hiperbolička, ako je $AC - B^2 < 0$ za sve $(x, y) \in \Omega$

Plan: svladati osnovne tehnike metode konačnih diferencija za sva tri tipa jednačbi i na svakom tipu posebno detaljnije upoznati neke ključne detalje. Važno nam je da su prethodne dvije teme svladane (IP-ODJ, RP-ODJ).

Numeričko rješavanje difuzijske jednačbe

Difuzijska jednačba opisuje razne procese u praksi:

- u fizici: distribuciju topline po vremenu u nekom objektu
- u financijama: ponašanje vrijednosti opcija (financijski instrument koji dozvoljava “klađenje” da li će vrijednost te imovine rasti ili padati)

Opći oblik difuzijske (paraboličke parcijalne diferencijalne) jednačbe je

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} - \nabla \cdot (a(x) \nabla u(x, t)) = f(x, t), \quad t \in [0, T], \quad x \in \Omega$$

pri čemu je potrebno još zadati

- inicijalni uvjet za $t = 0$, i
- rubne uvjete za $x \in \partial\Omega$.

Primjere jedne 1D parabolické PDJ

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - a(x, t) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) - b(x, t) \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) - c(x, t) u(x, t) = f(x, t)$$

s početnim uvjetom

$$u(x, 0) = g(x), \quad x \in [0, 1],$$

te rubnim uvjetima

$$\left. \begin{aligned} \alpha_0(t) \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) + \beta_0(t) u(0, t) &= \rho_0(t) \\ \alpha_1(t) \frac{\partial u}{\partial x}(1, t) + \beta_1(t) u(1, t) &= \rho_1(t) \end{aligned} \right\} t \geq 0.$$

Varijable su x i t koje interpretiramo kao prostor i vrijeme.

Mi ćemo zbog jednostavnosti promatrati jednostavniji oblik jednačbe

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t), \quad x \in [a, b], \quad t \in [0, T],$$

s Dirichletovim rubnim uvjetima.

Standardna metoda za dobivanje aproksimacija rješenja parcijalne diferencijalne jednačbe, kao što je difuzijska, je diskretizacija pomoću konačnih diferencija.

- U toj metodi iz danog područja $[a, b] \times [0, T]$ izabran je skup točaka koji čini mrežu.
- U svakoj točki mreže derivacije u diferencijalnoj jednačbi zamjenjuju se sa kvocijentima koji se približavaju derivaciji kada mreža postaje sve finija.

Konačne razlike

Parcijalnu derivaciju $\partial u / \partial t$ možemo definirati kao

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{u(x, t + \delta t) - u(x, t)}{\delta t}.$$

Umjesto računanja limesa kada $\delta t \rightarrow 0$, uzet ćemo $\delta t > 0$ koji je vrlo mali, i budući da vrijedi

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \frac{u(x, t + \delta t) - y(x, t)}{\delta t} + \mathcal{O}(\delta t)$$

definirat ćemo aproksimaciju

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) \approx \frac{u(x, t + \delta t) - y(x, t)}{\delta t}.$$

Ovime smo dobili konačnu razliku od $\partial y / \partial t$, a konačnu razliku ovoga oblika posebno ćemo još zvati i **konačna razlika unaprijed**.

Alternativno možemo definirati

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{u(x, t) - u(x, t - \delta t)}{\delta t},$$

tako da je na sličan način aproksimacija dana sa

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) \approx \frac{u(x, t) - u(x, t - \delta t)}{\delta t}.$$

Konačnu razliku ovoga oblika zovemo **konačna razlika unazad**.

Također možemo primijetiti da je

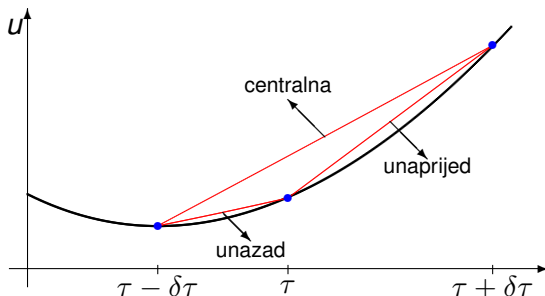
$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{u(x, t + \delta t) - u(x, t - \delta t)}{2\delta t}, \text{ i}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \frac{u(x, t + \delta t) - u(x, t - \delta t)}{2\delta t} + \mathcal{O}\left((\delta t)^2\right),$$

pa možemo definirati centralnu konačnu razliku

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) \approx \frac{u(x, t + \delta t) - u(x, t - \delta t)}{2\delta t}.$$

Vidimo da je centralna konačna razlika točnija.



Konačna razlika unazad, unaprijed, i centralna.

Konačne razlike u difuzijskoj jednačbi

- Kada se primijenjuju na difuzijsku jednačbu, konačne razlike unaprijed i unazad koje aproksimiraju $\partial u / \partial t$ vode do eksplicitne odnosno implicitne metode konačnih razlika.
- Centralna konačna razlika gornjeg oblika po varijabli t se ne koriste u praksi jer daje nestabilne metode.
- Centralna konačna razlika oblika

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) \approx \frac{u(x, t + \delta t/2) - u(x, t - \delta t/2)}{\delta t}$$

pojavljuje se u Crank–Nicolsonovoj shemi za konačne razlike.

Parcijalne derivacije po varijabli x možemo definirati na analogan način:

- konačna razlika unaprijed

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \approx \frac{u(x + \delta x, t) - u(x, t)}{\delta x}$$

- konačna razlika unazad

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \approx \frac{u(x, t) - u(x - \delta x, t)}{\delta x}$$

- centralna konačna razlika

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \approx \frac{u(x + \delta x, t) - u(x - \delta x, t)}{2\delta x}$$

Za drugu parcijalnu derivaciju $\partial^2 u / \partial x^2$ možemo definirati simetričnu centralnu konačnu razliku kao

- konačnu razliku unaprijed od konačnih razlika unazad
- konačnu razliku unazad od konačnih razlika unaprijed

U oba slučaja dobivamo

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) &= \frac{\frac{u(x+\delta x, t) - u(x, t)}{\delta x} - \frac{u(x, t) - u(x-\delta x, t)}{\delta x}}{\delta x} + \mathcal{O}\left((\delta x)^2\right) \\ &\approx \frac{u(x + \delta x, t) - 2u(x, t) + u(x - \delta x, t)}{(\delta x)^2}.\end{aligned}$$

Mreža za difuzijsku jednačbu

Kako bismo mogli primijeniti metodu konačnih razlika na difuzijsku jednačbu moramo podijeliti

- x os na ekvidistantne čvorove sa razmakom od δx
- t os na ekvidistantne čvorove sa razmakom od δt

pri čemu uzimamo

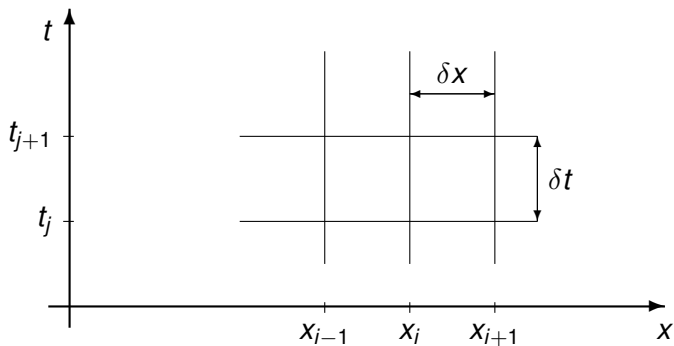
$$\delta x = \frac{b-a}{n}, \quad \delta t = \frac{T}{m}.$$

Ovime na (x, t) ravnini, unutar domene $[a, b] \times [0, T]$, definiramo mrežu, pri čemu čvorovi mreže imaju oblik

$$(x_i, t_j) = (a + i\delta x, j\delta t), \quad i = 0, \dots, n, \quad j = 0, \dots, m.$$

U tom slučaju računat ćemo aproksimativno rješenje samo u čvorovima mreže, i pišemo

$$u_{i,j} \approx u(i\delta x, j\delta t).$$



Oznake na mreži.

Eksplicitna metoda konačnih razlika

Razmatramo difuzijsku jednažbu

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

sa rubnim i inicijalnim uvjetima

$$u(a, t) = u_a(t),$$

$$u(b, t) = u_b(t),$$

$$u(x, 0) = u_0(x).$$

Želimo naći aproksimaciju rješenja u čvorovima mreže koristeći

- konačnu razliku unaprijed za $\partial u / \partial t$,
- simetričnu centralnu konačnu razliku za $\partial^2 u / \partial x^2$.

Pri tome se difuzijska jednačba transformira u

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\delta t} + \mathcal{O}(\delta t) = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\delta x)^2} + \mathcal{O}\left((\delta x)^2\right).$$

Zanemarujući izraze $\mathcal{O}(\delta t)$ i $\mathcal{O}\left((\delta x)^2\right)$ dobivamo diferencijsku jednačbu

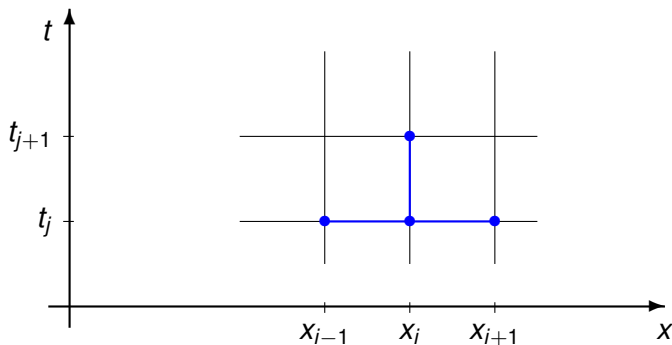
$$u_{i,j+1} = \lambda u_{i-1,j} + (1 - 2\lambda)u_{i,j} + \lambda u_{i+1,j},$$

gdje je

$$\lambda = \frac{\delta t}{(\delta x)^2}, \quad \text{Courantov broj.}$$

Ako u vremenskom koraku j znamo $u_{i,j}$ za sve vrijednosti od i , tada $u_{i,j+1}$ možemo izračunati eksplicitno.

Eksplisitna metoda konačnih razlika



$u_{i,j+1}$ ovisi samo o $u_{i-1,j}$, $u_{i,j}$ i $u_{i+1,j}$.

Sada možemo riješiti diferencijsku jednačbu za

$$0 < i < n, \quad 0 < j \leq m.$$

Rubne uvjete koristimo za određivanje $u_{0,j}$ i $u_{n,j}$:

$$u_{0,j} = u_a(j\delta t), \quad 0 < j \leq m,$$

$$u_{n,j} = u_b(j\delta t), \quad 0 < j \leq m.$$

Za pokretanje ove iterativne metode koristimo inicijalni uvjet

$$u_{i,0} = u_0(a + i\delta x), \quad 0 \leq i \leq n.$$

Iterativna metoda završava za $j = m$ i rješenjem

$$u_{i,m}, \quad 0 \leq i \leq n,$$

što predstavlja aproksimaciju rješenja za $u(a + i\delta x, T)$, $0 \leq i \leq n$.

Algoritam eksplicitne metode konačnih razlika

```
 $\lambda = \frac{\delta t}{(\delta x)^2};$   
for  $i = 0 : n$   
     $u_{stari}(i) = u_0(a + i \cdot \delta x);$   
end  
for  $j = 1 : m$   
     $u_{novi}(0) = u_a(j \cdot \delta t);$   
     $u_{novi}(n) = u_b(j \cdot \delta t);$   
    for  $i = 1 : (n - 1)$   
         $u_{novi}(i) = \lambda \cdot u_{stari}(i - 1) + (1 - 2 \cdot \lambda) \cdot u_{stari}(i) +$   
             $+\lambda \cdot u_{stari}(i + 1);$   
    end  
     $u_{stari} = u_{novi};$   
end  
 $u = u_{stari};$ 
```

Stabilnost eksplicitne metode konačnih razlika

- Stabilnost numeričke metode je u bliskoj vezi sa numeričkom greškom.
- Metoda konačnih razlika je stabilna ako greška učinjena u jednom koraku metode ne utječe na povećanje greške u koracima koji slijede.
- Kod neutralno stabilne metode greška ostaje konstantna u svim koracima.
- Ako greške opadaju i po mogućnosti se prigušuju, kažemo da je numerička metoda stabilna.
- Ako, s druge strane, greška raste sa povećanjem broja koraka, aproksimativno rješenje divergira, i kažemo da je numerička metoda nestabilna.

Za daljnju analizu korisno je sve vrijednosti $u_{i,j}$ za fiksni vremenski korak j organizirati u vektor

$$u^{(j)} = [u_{1,j} \quad \cdots \quad u_{n-1,j}]^T.$$

Za matični oblik diferencijske jednačbe definiramo $(n-1) \times (n-1)$ matricu A

$$A = \begin{bmatrix} 1-2\lambda & \lambda & 0 & \cdots & 0 \\ \lambda & 1-2\lambda & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \lambda \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda & 1-2\lambda \end{bmatrix}.$$

Tada eksplisitnu metodu možemo zapisati kao

$$u^{(j+1)} = Au^{(j)} + u_r^{(j)},$$

gdje je

$$u_r^{(j)} = \lambda [u_{0,j} \quad 0 \quad \cdots \quad 0 \quad u_{n,j}]^T.$$

Stabilnost metode se odnosi na ponašanje širenja pogreške napravljene u j -tom koraku.

Neka je $\tilde{u}^{(j)} = u(t_j)$ vektor s točnim rješenjem u $t = t_j$.

Za ovaj vektor, iteracije će generirati niz $\tilde{u}^{(j+k)}$.

Ukupna pogreška u j -tom koraku

$$\tilde{u}^{(j)} - u^{(j)} = \varepsilon_j.$$

$$\begin{aligned} \tilde{u}^{(j+1)} - u^{(j+1)} &= A\tilde{u}^{(j)} + u_r^{(j)} - Au^{(j)} - u_r^{(j)} \\ &= A[\tilde{u}^{(j)} - u^{(j)}] = A\varepsilon_j. \end{aligned}$$

Nakon k koraka

$$\tilde{u}^{(j+k)} - u^{(j+k)} = A^k \varepsilon_j.$$

Da bi metoda bila stabilna, greška mora biti prigušena, a za to treba biti

$$\lim_{k \rightarrow \infty} A^k \varepsilon_j = 0,$$

Ovo će vrijediti ako i samo ako je

$$\rho(A) < 1,$$

gdje je $\rho(A)$ spektralni radijus matrice A .

Dakle, da bi metoda bila stabilna zahtijevamo da za sve svojstvene vrijednosti $\mu_1(A), \dots, \mu_{n-1}(A)$ od A vrijedi

$$|\mu_k(A)| < 1, \quad k = 1, \dots, n-1.$$

Slijedeći korak je računanje svojstvenih vrijednosti od A .
U tu svrhu, matricu pišemo kao

$$A = I + \lambda \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} -2 & 1 & & & 0 \\ 1 & -2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & & & 1 & -2 \end{bmatrix}}_{=G}.$$

Preostaje nam sada samo naći svojstvene vrijednosti $\mu_k(G)$ od matrice G , jer su tada

$$\mu_k(A) = 1 + \lambda \cdot \mu_k(G), \quad k = 1, \dots, n-1.$$

Svojstvene vrijednosti matrice G su nultočke ortogonalnog polinoma p_{n-1} definiranog tročlanom rekurzijom:

$$p_{n+1}(x) + p_{n-1}(x) = (x + 2)p_n(x).$$

Ovo je slično rekurziji za Čebiševljeve polinome.

Uz supstituciju

$$2y = x + 2$$

dobivamo rekurziju

$$U_{n+1}(y) + U_{n-1}(y) = 2yU_n(y).$$

Rekurzija za Čebiševljeve polinome!

Jer je

$$p_{-1}(x) = 0 \quad \text{i} \quad p_0(x) = 1$$

(početne vrijednosti za rekurziju iz teorema) slijedi da je

$$U_{-1}(x) = 0 \quad \text{i} \quad U_0(x) = 1.$$

Iz rekurzije slijedi da je

$$U_1(y) = 2yU_0(y) - U_{-1}(y) = 2y.$$

Radi se o Čebiševljevim polinomima 2. vrste.

(Za Čebiševljeve polinome 1. vrste je $U_1(y) = 2y - 1$.)

Eksplicitna formula za Čebiševljeve polinome 2. vrste:

$$U_n(y) = \frac{\sin((n+1) \arccos y)}{\sin(\arccos y)}.$$

Nultočke polinoma U_{n-1} :

$$y_k = \cos \frac{k\pi}{n}, \quad k = 1, \dots, n-1$$

Dakle, svojstvene vrijednosti matrice G su nultočke polinoma p_{n-1}

$$\begin{aligned}\mu_k(G) = x_k &= 2y - 2_k = 2 \cos\left(\frac{k\pi}{n}\right) - 2 \\ &= -4 \sin^2\left(\frac{k\pi}{2n}\right), \quad k = 1, \dots, n-1.\end{aligned}$$

Dalje vrijedi

$$\mu_k(A) = 1 - 4\lambda \sin^2\left(\frac{k\pi}{2n}\right), \quad k = 1, \dots, n-1.$$

Da bi uvjet stabilnosti $|\mu_k(A)| < 1$ bio zadovoljen, mora vrijediti

$$\left| 1 - 4\lambda \sin^2\left(\frac{k\pi}{2n}\right) \right| < 1, \quad k = 1, \dots, n-1.$$

Budući da je $\lambda > 0$ po definiciji slijedi da je uvijek

$$1 - 4\lambda \sin^2 \left(\frac{k\pi}{2n} \right) < 1.$$

S druge strane, uvjet

$$-1 < 1 - 4\lambda \sin^2 \left(\frac{k\pi}{2n} \right)$$

se može pojednostavniti na

$$\lambda \sin^2 \left(\frac{k\pi}{2n} \right) < \frac{1}{2}.$$

Dakle, gornji uvjet stabilnosti ekvivalentan je dvijema jednačbama

$$\begin{aligned} \lambda &> 0 \\ \lambda \sin^2 \left(\frac{k\pi}{2n} \right) &< \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Najveći izraz sa sinusom je

$$\sin\left(\frac{(n-1)\pi}{2n}\right) < 1,$$

a ako povećavamo dimenziju matrice A tada vrijedi

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sin\left(\frac{(n-1)\pi}{2n}\right) = 1.$$

Ovime smo dobili konačan uvjet.

Teorem

Za

$$0 < \lambda \leq \frac{1}{2}$$

eksplicitna metoda konačnih razlika za difuzijsku jednažbu je stabilna.

- Ovaj kriterij stabilnosti daje uvjet na veličinu koraka:

$$0 < \delta t \leq \frac{(\delta x)^2}{2}.$$

- Kao posljedica uvjeta stabilnosti, parametri m i n ne mogu biti izabrani nezavisno jedan od drugoga.
- Ako moramo izračunati rješenje sa velikom točnošću, tada δx mora biti malen, što daje kvadratnu ogradu za δt koji mora biti još manji.
- Zato nam je praktičnije naći numeričku metodu koja je bezuvjetno stabilna.

Konvergencija eksplisitne metode konačnih razlika

Da bi numerička metoda bila uopće korisna u primjenama, mora biti konvergentna:

- aproksimacije moraju težiti tačnom rješenju kada δx i δt teže ka nuli

Prvo nas zanima lokalna pogreška diskretizacije, to je ostatak koji dobijemo kada u relaciju koja definira metodu uvrstimo tačno rješenje:

$$\epsilon_{i,j+1} = u(x_i, t_{j+1}) - \lambda u(x_{i-1}, t_j) - (1 - 2\lambda)u(x_i, t_j) - \lambda u(x_{i+1}, t_j).$$

Izraze u lokalnoj pogrešci diskretizacije razvijamo u Taylorov red i dobivamo

$$\epsilon_{i,j+1} =$$

$$\begin{aligned} &= u(x_i, t_j) + \delta t \frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_j) + \frac{1}{2}(\delta t)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, t_j) + \mathcal{O}((\delta t)^3) - \\ &\quad - \lambda \left[u(x_i, t_j) - \delta x \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t_j) + \frac{1}{2}(\delta x)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_j) - \frac{1}{6}(\delta x)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x_i, t_j) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{24}(\delta x)^4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_i, t_j) + \mathcal{O}((\delta x)^5) \right] - (1 - 2\lambda)u(x_i, t_j) - \\ &\quad - \lambda \left[u(x_i, t_j) + \delta x \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t_j) + \frac{1}{2}(\delta x)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_j) + \frac{1}{6}(\delta x)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x_i, t_j) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{24}(\delta x)^4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_i, t_j) + \mathcal{O}((\delta x)^5) \right] \end{aligned}$$

Ako uvrstimo da je $\delta t = \lambda(\delta x)^2$, sređivanjem prethodnog izraza dobivamo

$$\begin{aligned}\epsilon_{i,j+1} &= \delta t \left(\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_j) - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_j) \right) + \\ &\quad + \frac{(\delta t)^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, t_j) - \lambda \frac{(\delta x)^4}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_i, t_j) + \mathcal{O}((\delta t)^3) + \mathcal{O}((\delta x)^5) \\ &= \frac{(\delta t)^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, t_j) - \lambda \frac{(\delta x)^4}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_i, t_j) + \mathcal{O}((\delta t)^3) + \mathcal{O}((\delta x)^5)\end{aligned}$$

jer je u rješenje difuzijske jednačine. Dakle, vrijedi

$$\begin{aligned}u(x_i, t_{j+1}) &= \lambda u(x_{i-1}, t_j) + (1 - 2\lambda)u(x_i, t_j) + \lambda u(x_{i+1}, t_j) + \\ &\quad + \mathcal{O}((\delta t)^2) + \mathcal{O}((\delta x)^4) (\approx \mathcal{O}((\delta x)^4)).\end{aligned}$$

Drugim riječima, ako bismo u vremenskom koraku j metodi dali egzaktnu vrijednost rješenja u svim čvorovima, pogreška u $(j + 1)$ -vom koraku bi bila reda veličine $\mathcal{O}(\delta t(\delta x)^2)$.

Ako definiramo

$$u_{egz}^{(j)} = [u(x_1, t_j) \quad \cdots \quad u(x_{n-1}, t_j)]^T$$

$$\epsilon^{(j+1)} = [\epsilon_{1,j+1} \quad \cdots \quad \epsilon_{n-1,j+1}]^T$$

tada izraz sa lokalnom pogreškom diskretizacije možemo napisati i u matričnom obliku kao

$$u_{egz}^{(j+1)} = A u_{egz}^{(j)} + u_r^{(j)} + \epsilon^{(j+1)}, \quad j = 0, \dots, m-1.$$

Pri tome je za svaki indeks j

$$\|\epsilon^{(j)}\|_{\infty} \leq K \delta t (\delta x)^2.$$

Teorem

Promatramo eksplicitnu metodu konačnih razlika za difuzijsku jednačbu u kojoj je Courantov broj λ konstantan kada $\delta t \rightarrow 0$ i $\delta x \rightarrow 0$, i još je $\lambda \leq 1/2$. Neka je rješenje aproksimirano na vremenskom intervalu $[0, T]$, s korakom $\delta t = \lambda(\delta x)^2$, te neka je $m = \lfloor T/\delta t \rfloor$. Tada metoda konvergira, tj. za $e^{(j)} = u^{(j)} - u_{egz}^{(j)}$ vrijedi

$$\lim_{\delta x \rightarrow 0} \max_{j=0, \dots, m} \|e^{(j)}\|_{\infty} = 0.$$

Dokaz. Prvo primijetimo da je inicijalna vrijednost rješenja zadana, pa je (u egzaktnoj aritmetici) $e^{(0)} = 0$. Drugo, za $\lambda \leq 1/2$ je

$$\|A\|_{\infty} = \lambda + 1 - 2\lambda + \lambda = 1.$$

Oduzimanjem matričnih oblika iteracije metode i izraza za lokalnu pogrešku diskretizacije dobivamo

$$e^{(j+1)} = A e^{(j)} - \epsilon^{(j+1)},$$

pa onda induktivno možemo zaključiti da je za svaki j

$$e^{(j)} = A^j e^{(0)} - \sum_{i=0}^{j-1} A^i \epsilon^{(j-i)} = - \sum_{i=0}^{j-1} A^i \epsilon^{(j-i)}.$$

Sada uzimanjem norme dobivamo

$$\begin{aligned} \|e^{(j)}\|_{\infty} &\leq \sum_{i=0}^{j-1} \|A\|_{\infty}^i \|\epsilon^{(j-i)}\|_{\infty} \leq j K \delta t (\delta x)^2 \\ &\leq m K \delta t (\delta x)^2 \leq T K (\delta x)^2, \end{aligned}$$

jer je $m \delta t \leq T$.

Iz dokaza prethodnog teorema jasno je vidljivo da

- Konzistentnost: lokalna pogreška diskretizacije zadovoljava $\|e^{(j)}\|/\delta t \rightarrow 0$ kada $\delta x \rightarrow 0$.
- Stabilnost: Courantov broj zadovoljava $\lambda \leq 1/2$

osiguravaju konvergenciju metode.

Potpuna implicitna metoda konačnih razlika

- Implicitne metode se koriste kako bi se izbjegla ograničenja vezana uz stabilnost eksplcitne metode.
- Ove metode nam omogućuju da koristimo mreže u x koordinati sa velikim brojem čvorova, bez da moramo uzeti jako mali δt .
- Jedna od implicitnih metoda je i potpuna implicitna metoda konačnih razlika, koja računa aproksimaciju rješenja difuzijske jednačbe u čvorovima mreže koristeći
 - konačnu razliku unazad za $\partial u / \partial t$,
 - simetričnu centralnu konačnu razliku za $\partial^2 u / \partial x^2$.

Pri tome se difuzijska jednačba transformira u

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\delta t} + \mathcal{O}(\delta t) = \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{(\delta x)^2} + \mathcal{O}((\delta x)^2).$$

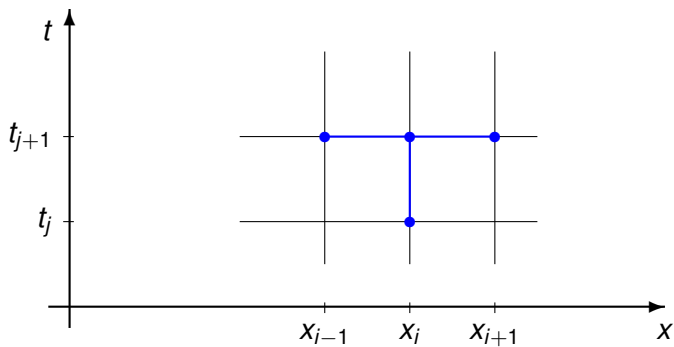
Zanemarujući izraze $\mathcal{O}(\delta t)$ i $\mathcal{O}((\delta x)^2)$ dobivamo diferencijsku jednačbu

$$-\lambda u_{i-1,j+1} + (1 + 2\lambda)u_{i,j+1} - \lambda u_{i+1,j+1} = u_{i,j},$$

gdje je opet

$$\lambda = \frac{\delta \tau}{(\delta x)^2}.$$

U potpunoj implicitnoj metodi $u_{i-1,j+1}$, $u_{i,j+1}$ i $u_{i+1,j+1}$ implicitno ovise o $u_{i,j}$.



$u_{i-1,j+1}$, $u_{i,j+1}$ i $u_{i+1,j+1}$ ovise o $u_{i,j}$.

- nove vrijednosti se ne mogu razdvojiti i eksplicitno izračunati iz starih vrijednosti.
- Radi se o simultanom rješavanju jednačbi, odnosno o rješavanju sustava linearnih jednačbi.

Sada možemo riješiti diferencijsku jednačbu za

$$0 < i < n, \quad 0 < j \leq m.$$

Rubne uvjete koristimo za određivanje $u_{0,j}$ i $u_{n,j}$:

$$u_{0,j} = u_a(j\delta t), \quad 0 < j \leq m,$$

$$u_{n,j} = u_b(j\delta t), \quad 0 < j \leq m.$$

Za pokretanje ove iterativne metode koristimo inicijalni uvjet

$$u_{i,0} = u_0(a + i\delta x), \quad 0 \leq i \leq n.$$

Iterativna metoda završava za $j = m$ i rješenjem

$$u_{i,m}, \quad 0 \leq i \leq n,$$

što predstavlja aproksimaciju rješenja za $u(a + i\delta x, T)$, $0 \leq i \leq n$.

S obzirom da moramo rješavati sustave, sada nam i u fazi računanja treba matrični oblik diferencijske jednačbe.

Definiramo $(n-1) \times (n-1)$ matricu A

$$A = \begin{bmatrix} 1+2\lambda & -\lambda & 0 \cdots & 0 \\ -\lambda & 1+2\lambda & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -\lambda \\ 0 & \cdots & 0 & -\lambda & 1+2\lambda \end{bmatrix},$$

i vektor desne strane sustava

$$b = u^{(j)} + u_r^{(j+1)},$$

gdje su

$$u^{(j)} = [u_{1,j} \quad \cdots \quad u_{n-1,j}]^T,$$

$$u_r^{(j+1)} = \lambda [u_{0,j+1} \quad 0 \quad \cdots \quad 0 \quad u_{n,j+1}]^T.$$

Sada potpunu implicitnu metodu možemo napisati u matričnom obliku kao

$$Au^{(j+1)} = u^{(j)} + u_r^{(j+1)} = b^{(j)}.$$

Vektor $u_r^{(j+1)}$ se pojavljuje zbog rubnih uvjeta, npr. iz prve jednačbe slijedi

$$(1 + 2\lambda)u_{1,j+1} - \lambda u_{2,j+1} = u_{1,j} + \lambda u_{0,j+1}.$$

Pokazat ćemo da je matrica A regularna pa se korak implicitne metode može napisati eksplicitno kao

$$u^{(j+1)} = A^{-1} \left(u^{(j)} + u_r^{(j+1)} \right).$$

Algoritam potpune implicitne metode kon. razl.

definiraj rješavač s matricom A ; $\lambda = \frac{\delta t}{(\delta x)^2}$;

for $i = 0 : n$

$$u(i) = u_0(a + i \cdot \delta x);$$

end

for $j = 1 : m$

for $i = 1 : n - 1$

$$b(i) = u(i);$$

end

$$u(0) = u_a(j \cdot \delta t);$$

$$u(n) = u_b(j \cdot \delta t);$$

$$b(1) = b(1) + \lambda \cdot u(0);$$

$$b(n-1) = b(n-1) + \lambda \cdot u(n);$$

$$\text{riješ} \text{ sustav } Au(1 : n-1) = b;$$

end

Stabilnost potpune implicitne metode konačnih razlika

Analognom argumentacijom kao kod eksplicitne metode konačnih razlika, metoda

$$u^{(j+1)} = A^{-1} \left(u^{(j)} + u_r^{(j+1)} \right).$$

će biti stabilna ako

$$\lim_{j \rightarrow \infty} A^{-j} e^{(0)} = 0., \quad \forall e^{(0)}.$$

Dakle, metoda će biti stabilna ako i samo ako je

$$\rho(A^{-1}) < 1.$$

Matrica

$$A = I - \lambda \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} -2 & 1 & & & 0 \\ 1 & -2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & & & 1 & -2 \end{bmatrix}}_{=G}.$$

Svojstvene vrijednosti matrice G :

$$\mu_k(G) = -4 \sin^2 \left(\frac{k\pi}{2n} \right) < 0, \quad k = 1, \dots, n-1,$$

Svojstvene vrijednosti matrice A :

$$\mu_k(A) = 1 - \lambda \mu_k(G) > 1, \quad k = 1, \dots, n-1.$$

Svojstvene vrijednosti matrice A^{-1} :

$$\mu_k(A^{-1}) = \frac{1}{\mu_k(A)} < 1, \quad k = 1, \dots, n-1.$$

Dakle, za bilo koji $\lambda > 0$ je $0 < \mu_k(A^{-1}) < 1$.

$\Rightarrow$ Potpuna implicitna metoda konačnih razlika je bezuvjetno stabilna.

S druge strane, vidimo da su sve svojstvene vrijednosti matrice A pozitivne, što znači da je matrica pozitivno definitna.

- Zbog toga za rješavanje sustava $Au^{(j+1)} = b^{(j)}$ možemo koristiti metode

- faktorizaciju Choleskog
- Gauss–Seidelovu i SOR metodu
- metodu konjugiranih gradijenata

koje su specijalno prilagođene za tridijagonalnu matricu.

- Kod efikasno implementirane eksplicitne i implicitne metode broj operacija je istog reda veličine, pa rješavanje sustava kod implicitne metode ne predstavlja preveliki dodatni trošak u odnosu na eksplicitnu.

Crank–Nicolsonova metoda

- Crank–Nicolsonova metoda je također implicitna metoda koja nema problema sa stabilnošću, ali ima grešku diskretizacije derivacije $\partial u / \partial t$ reda veličine $\mathcal{O}((\delta t)^2)$.
- Crank–Nicolsonova metoda računa aproksimaciju rješenja difuzijske jednačbe u čvorovima mreže tako da uzima srednju vrijednost diferencijalnih jednačbi eksplicitne i potpuno implicitne metode.

Dakle, ako koristimo konaču razliku unaprijed za $\partial u / \partial t$ dobivamo eksplicitnu metodu

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\delta t} + \mathcal{O}(\delta t) = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\delta x)^2} + \mathcal{O}((\delta x)^2),$$

a ako koristimo konaču razliku unazad za $\partial u / \partial t$ dobivamo potpunu implicitnu metodu

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\delta t} + \mathcal{O}(\delta t) = \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{(\delta x)^2} + \mathcal{O}\left((\delta x)^2\right).$$

Srednja vrijednost tih dviju jednažbi je

$$\begin{aligned} & \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\delta t} + \mathcal{O}(\delta t) = \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\delta x)^2} + \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{(\delta x)^2} \right) + \\ & \quad + \mathcal{O}\left((\delta x)^2\right). \end{aligned}$$

Ovom metodom zapravo aproksimiramo vrijednost difuzijske jednačbe u točki $(x_i, t_{j+\frac{1}{2}})$, koja se nalazi na pola puta između (x_i, t_j) i (x_i, t_{j+1}) :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) = \frac{\partial^2}{\partial x^2}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}).$$

U ovom slučaju, prvu derivaciju po varijabli t aproksimiramo centralnom konačnom razlikom

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) \approx \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\delta t},$$

a drugu derivaciju po varijabli x sa

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) \approx \frac{1}{2} \left(\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\delta x)^2} + \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{(\delta x)^2} \right).$$

Provjerimo točno koliku smo grešku napravili u varijabli t . Za egzaktnu vrijednost $u_{i,j} = u(x_i, t_j)$ imamo

$$u_{i,j+1} = u_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{\delta t}{2} \frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) + \frac{(\delta t)^2}{8} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) + \mathcal{O}((\delta t)^3)$$

$$u_{i,j} = u_{i,j+\frac{1}{2}} - \frac{\delta t}{2} \frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) + \frac{(\delta t)^2}{8} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) + \mathcal{O}((\delta t)^3).$$

To znači da za centralnu konačnu razliku vrijedi

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\delta t} = \frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) + \mathcal{O}((\delta t)^2).$$

S druge strane, moramo još provjeriti odnos desne strane u Crank–Nicolsonovoj iteraciji sa $\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}})$.

Uzimanjem srednje vrijednosti konačnih razlika unaprijed i unazad, dobivamo jednakost

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2} \left(\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\delta x)^2} + \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{(\delta x)^2} \right) = \\
 &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_j) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_{j+1}) \right) + \mathcal{O}\left((\delta x)^2\right) \\
 &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) - \frac{\delta x}{2} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) + \frac{\delta x}{2} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) \right) + \mathcal{O}\left((\delta x)^2\right) \\
 &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_{j+\frac{1}{2}}) + \mathcal{O}\left((\delta x)^2\right).
 \end{aligned}$$

Aproksimirajući difuzijsku jednačbu u točki $(x_i, t_{j+\frac{1}{2}})$ iteracijama Crank–Nicolsonove metode napravili smo grešku reda veličine $\mathcal{O}((\delta x)^2) + \mathcal{O}((\delta t)^2)$.

Srednja vrijednost tih dviju jednačbi točije sada glasi

$$\begin{aligned} & \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\delta t} + \mathcal{O}((\delta t)^2) = \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\delta x)^2} + \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{(\delta x)^2} \right) + \\ & \quad + \mathcal{O}((\delta x)^2). \end{aligned}$$

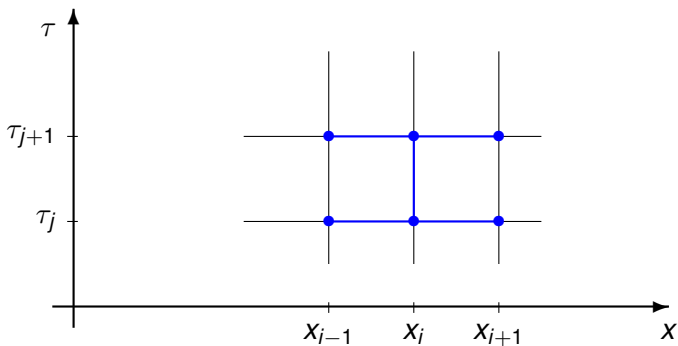
Zanemarujući izraze $\mathcal{O}((\delta t)^2)$ i $\mathcal{O}((\delta x)^2)$ dobivamo diferencijsku jednačbu

$$\begin{aligned} -\frac{\lambda}{2}u_{i-1,j+1} + (1 + \lambda)u_{i,j+1} - \frac{\lambda}{2}u_{i+1,j+1} = \\ = \frac{\lambda}{2}u_{i-1,j} + (1 - \lambda)u_{i,j} + \frac{\lambda}{2}u_{i+1,j}, \end{aligned}$$

gdje je opet

$$\lambda = \frac{\delta t}{(\delta x)^2}.$$

U Crank–Nicolsonovoj metodi $u_{i-1,j+1}$, $u_{i,j+1}$ i $u_{i+1,j+1}$ implicitno ovise o $u_{i-1,j}$, $u_{i,j}$ i $u_{i+1,j}$.



$u_{i-1,j+1}$, $u_{i,j+1}$ i $u_{i+1,j+1}$ ovise o $u_{i-1,j}$, $u_{i,j}$ i $u_{i+1,j}$

Sada možemo riješiti diferencijsku jednačbu za

$$0 < i < n, \quad 0 < j \leq m.$$

Rubne uvjete koristimo za određivanje $u_{0,j}$ i $u_{n,j}$:

$$\begin{aligned} u_{0,j} &= u_a(j\delta t), & 0 < j \leq m, \\ u_{n,j} &= u_b(j\delta t), & 0 < j \leq m. \end{aligned}$$

Za pokretanje ove iterativne metode koristimo inicijalni uvjet

$$u_{i,0} = u_0(a + i\delta x), \quad 0 \leq i \leq n.$$

Iterativna metoda završava za $j = m$ i rješenjem

$$u_{i,m}, \quad 0 \leq i \leq n,$$

što predstavlja aproksimaciju rješenja za $u(a + i\delta x, T)$, $0 \leq i \leq n$.

Matrični oblik diferencijske jednažbe.

Definiramo $(n - 1) \times (n - 1)$ matricu A

$$A = \begin{bmatrix} 1 + \lambda & -\frac{\lambda}{2} & 0 \dots & 0 & \\ -\frac{\lambda}{2} & 1 + \lambda & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -\frac{\lambda}{2} \\ 0 & \dots & 0 & -\frac{\lambda}{2} & 1 + \lambda \end{bmatrix},$$

i $(n-1) \times (n-1)$ matricu B

$$B = \begin{bmatrix} 1 - \lambda & \frac{\lambda}{2} & 0 \cdots & 0 \\ \frac{\lambda}{2} & 1 - \lambda & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \frac{\lambda}{2} \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{\lambda}{2} & 1 - \lambda \end{bmatrix}.$$

Isto tako nam još trebaju vektori

$$u^{(j)} = [u_{1,j} \quad \cdots \quad u_{n-1,j}]^T,$$

$$u_r^{(j)} = \lambda [u_{0,j} \quad 0 \quad \cdots \quad 0 \quad u_{n,j}]^T.$$

Tada Crank–Nicolsonovu metodu možemo napisati u matričnom obliku kao

$$Au^{(j+1)} = Bu^{(j)} + \frac{1}{2}u_r^{(j)} + \frac{1}{2}u_r^{(j+1)} = b^{(j)}.$$

Pokazat ćemo da je matrica A regularna pa se korak Crank–Nicolsonove metode može napisati eksplicitno kao

$$u^{(j+1)} = A^{-1} \left(Bu^{(j)} + \frac{1}{2}u_r^{(j)} + \frac{1}{2}u_r^{(j+1)} \right).$$

Algoritam Crank–Nicolsonove metode

```
definiraj rješavač s matricom  $A$ ;  $\lambda = \frac{\delta t}{(\delta x)^2}$ ;  
for  $i = 0 : n$   
     $u(i) = u_0(a + i \cdot \delta x)$ ;  
end  
for  $j = 1 : m$   
    for  $i = 1 : n - 1$   
         $b(i) = \frac{\lambda}{2}u(i - 1) + (1 - \lambda)u(i) + \frac{\lambda}{2}u(i + 1)$ ;  
    end  
     $u(0) = y_a(j \cdot \delta t)$ ;  
     $u(n) = u_b(j \cdot \delta t)$ ;  
     $b(1) = b(1) + \frac{\lambda}{2} \cdot u(0)$ ;  
     $b(n - 1) = b(n - 1) + \frac{\lambda}{2} \cdot u(n)$ ;  
    riješi sustav  $Au(1 : n - 1) = b$ ;  
end
```

Stabilnost Crank–Nicolsonove metode

Metoda:

$$u^{(j+1)} = A^{-1} B u^{(j)} + A^{-1} \left(\frac{1}{2} u_r^{(j)} + \frac{1}{2} u_r^{(j+1)} \right).$$

Metoda je stabilna ako i samo ako

$$\rho(A^{-1} B) < 1$$

Za

$$G = \begin{bmatrix} -2 & 1 & & & 0 \\ 1 & -2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & & & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

je

$$A = I - \frac{\lambda}{2}G$$

$$B = I + \frac{\lambda}{2}G$$

$$A^{-1}B = \left(I - \frac{\lambda}{2}G\right)^{-1} \left(I + \frac{\lambda}{2}G\right)$$

Svojsvene vrijednosti:

$$\mu_k(A^{-1}B) = \frac{1 + \frac{\lambda}{2}\mu_k(G)}{1 - \frac{\lambda}{2}\mu_k(G)}$$

Kako je

$$\mu_k(G) = -4 \sin^2\left(\frac{k\pi}{2n}\right) \Rightarrow -4 < \mu_k(G) < 0.$$

$$k = 1, \dots, n-1,$$

svojstvene vrijednosti matrice $A^{-1}B$ zadovoljavaju

$$-4 < \mu_k(G) < 0 \quad \Rightarrow$$

$$-1 < -1 + \frac{1}{1 + 2\lambda} < \mu_k(A^{-1}B) = \frac{1 + \frac{\lambda}{2}\mu_k(G)}{1 - \frac{\lambda}{2}\mu_k(G)} < 1.$$

Dakle,

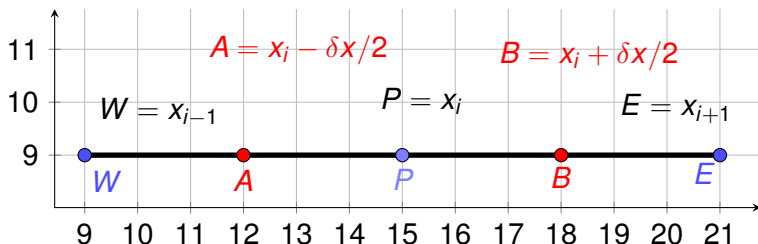
$$\rho(A^{-1}B) < 1$$

tj. Crank–Nicolsonova metoda je bezuvjetno stabilna.

- Kao i kod potpuno implicitne metode, može se vidjeti da su sve svojstvene vrijednosti matrice A pozitivne, što znači da je matrica pozitivno definitna.
- Zbog toga za rješavanje sustava $Au^{(j+1)} = b^{(j)}$ možemo koristiti metode
 - faktorizaciju Choleskog
 - Gauss–Seidelovu i SOR metodu
 - metodu konjugiranih gradijenatakoje su specijalno prilagođene za tridijagonalnu matricu.

Malo općenitija difuzijska jednačba ...

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(a(x) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right) + p(x)u(x, t) + q(x), \quad 0 < x < 1, \quad t > 0$$



$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \left(a(x) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right) \right)_P \approx \frac{\left(a(x) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right)_B - \left(a(x) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right)_A}{2 \cdot (\delta x/2)}$$

Stavimo $a_{i+1/2} = a(x_i + \delta x/2)$, $a_{i-1/2} = a(x_i - \delta x/2)$, $u_i^{(j)} \approx u(x_i, t_j)$.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(a(x) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right) \right)_P &\approx \frac{a_{i+1/2} \frac{u_{i+1}^{(j)} - u_i^{(j)}}{2(\delta x/2)} - a_{i-1/2} \frac{u_i^{(j)} - u_{i-1}^{(j)}}{2(\delta x/2)}}{2 \cdot (\delta x/2)} \\ &= \frac{1}{(\delta x)^2} (a_{i+1/2} (u_{i+1}^{(j)} - u_i^{(j)}) - a_{i-1/2} (u_i^{(j)} - u_{i-1}^{(j)})) \end{aligned}$$

Ostali elementi jednačbe:

$$p(x_i)u(x_i, t_j) \approx p_i u_i^{(j)}; \quad q(x_i) = q_i.$$

Prisjetimo se: trapezna metoda za $y' = f(t, y)$ ponavlja

$$y_{j+1} = y_j + (\delta t/2)(f(t_j, y_j) + f(t_{j+1}, y_{j+1})),$$

(tu piše $(y_{j+1} - y_j)/\delta t = (f(t_j, y_j) + f(t_{j+1}, y_{j+1}))/2$)

Dakle, imamo

$$\begin{aligned} \frac{u_i^{(j+1)} - u_i^{(j)}}{\delta t} = & \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{(\delta x)^2} [a_{i+1/2}(u_{i+1}^{(j)} - u_i^{(j)}) - a_{i-1/2}(u_i^{(j)} - u_{i-1}^{(j)})] \right. \\ & + p_i u_i^{(j)} + q_i + \frac{1}{(\delta x)^2} [a_{i+1/2}(u_{i+1}^{(j+1)} - u_i^{(j+1)}) - a_{i-1/2}(u_i^{(j+1)} - u_{i-1}^{(j+1)})] \\ & \left. + p_i u_i^{(j+1)} + q_i \right\} \end{aligned}$$

Sada prebaciti indeks $j + 1$ na lijevu stranu, uvažiti inicijalni i rubne uvjete i to je to.

Numeričko rješavanje Poissonove jednačbe

Poissonova jednačba

Poissonova jednačba opisuje razne procese u fizici:

- prijenos topline,
- procese u elektrostatici,
- i gravitacijskom polju.

Ona zapravo opisuje stacionarni oblik (koji ne ovisi o vremenu) difuzijske jednačbe uz uvjet da je funkcija a konstantna.

Poissonova jednačba je oblika

$$-\Delta u(x) = f(x), \quad x \in \Omega$$

pri čemu je potrebno još zadati

- rubne uvjete za $x \in \partial\Omega$.

1D Poissonova jednačba

Promotrimo prvo najjednostavniji slučaj Poissonove jednačbe u jednoj dimenziji — na nekom segmentu, recimo $[0, 1]$.

Jednačba glasi

$$-\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = f(x), \quad x \in [0, 1],$$

pri čemu je funkcija f zadana, a u nepoznata funkcija.

- Da bi Poissonova jednačba bila dobro zadana, moramo još zadati rubne uvjete na rubu tog segmenta.
- U ovom slučaju, uzmimo najjednostavnije rubne uvjete, tj. zahtijevajmo da na rubu segmenta za funkciju u vrijedi

$$u(0) = u(1) = 0.$$

Diskretizacija 1D Poissonova jednačba

Da bismo numerički riješili 1D Poissonovu jednačbu, zajedno s rubnim uvjetima, moramo je diskretizirati, tj. odabrati niz točaka x_i u kojima želimo naći približno rješenje.

- Neka su točke x_i ekvidistantne, tj. neka je

$$x_i = ih, \quad h = \frac{1}{N+1}, \quad i = 0, \dots, N+1.$$

Sada imamo $N+1$ podsegmenata, tako da dobivena matrica (slično kao kod difuzijske jednačbe) bude dimenzija $N \times N$.

- Također, neka je približno rješenje jednačbe u točkama x_i označeno s $u_i \approx u(x_i)$, i neka je funkcija s desne strane u tim točkama $f_i = f(x_i)$.

Drugu derivaciju aproksimirat ćemo simetričom konačnom razlikom:

$$\frac{d^2 u}{dx^2}(x_i) \approx \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2}.$$

Sada uvrstimo aproksimaciju za drugu derivaciju u diferencijalnu jednačbu, za sve točke x_i . Dobivamo

$$-u_{i-1} + 2u_i - u_{i+1} = h^2 f(x_i), \quad i = 1, \dots, N.$$

U matričnom obliku, ova jednačba glasi:

$$-G_N u = h^2 f,$$

pri čemu je G_N matrica koja se pojavljivala i kod difuzijske jednačbe (samo što je sada dimenzije N):

$$G_N = \begin{bmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -2 & 1 \\ & & & 1 & -2 \end{bmatrix},$$

$u = [u_1, u_2, \dots, u_N]^T$ je nepoznati vektor rješenja, a $f = [f_1, f_2, \dots, f_N]^T$ vektor desne strane sustava.

Znamo da su svojstvene vrijednosti matrice G_N jednake

$$\lambda_j = -4 \sin^2 \left(\frac{\pi j}{2(N+1)} \right), \quad j = 1, \dots, N.$$

Uvjetovanost matrice G_N

Po apsolutnoj vrijednosti najveća svojstvena vrijednost matrice G_N približno je jednaka -4 ,
dok je najmanja svojstvena vrijednost λ_1 približno jednaka

$$\lambda_1 \approx -4 \left(\frac{\pi}{2(N+1)} \right)^2 = - \left(\frac{\pi}{N+1} \right)^2.$$

Ovdje smo iskoristili $\sin x \approx x$ za $x \approx 0$.

Sada je odmah jasno da je matrica $-G_N$ pozitivno definitna i da je njezina uvjetovanost približno jednaka

$$\kappa(G_N) = \frac{\lambda_N}{\lambda_1} \approx \frac{4(N+1)^2}{\pi^2}.$$

To znači da uvjetovanost brzo raste s porastom broja podintervala.

2D Poissonova jednačba

Sada promatramo slučaj Poissonove jednačbe (eliptičku parcijalnu diferencijalnu jednačbu) u dvije dimenzije - na nekom kvadratu, recimo $[0, 1] \times [0, 1]$.

Jednačba glasi

$$-\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} = f(x, y), \quad (x, y) \in [0, 1] \times [0, 1],$$

uz rubni uvjet $u = 0$, tj. funkcija u je jednaka 0 na rubu kvadrata.

Kvadrat podijelimo u mrežu čvorova, a da nam bude jednostavnije, pretpostavimo da je i ta mreža kvadratna, tj. korak u x i y smjeru je jednak

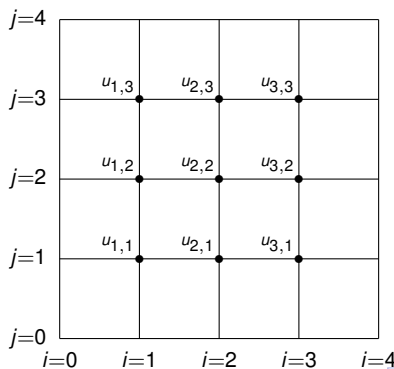
$$h = \frac{1}{N + 1}.$$

Diskretizacija 2D Poissonove jednačine

Uz tako definirane korake, unutarnji čvorovi mreže su točke (x_i, y_j) , gdje je $x_i = ih$, $y_j = jh$, za $i, j = 1, \dots, N$.

Dakle, imamo $n := N^2$ unutarnjih čvorova mreže.

Takva mreža za $N = 3$ izgleda ovako:



Vrijednost aproksimacije rješenja u čvoru (x_i, y_j) označavamo s $u_{i,j} \approx u(ih, jh)$, a funkcijsku vrijednost s $f_{i,j} = f(ih, jh)$.

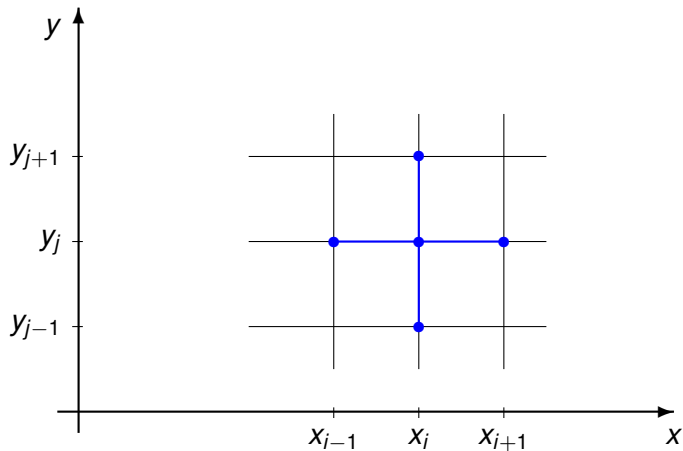
Druge parcijalne derivacije aproksimirat ćemo simetričim konačnim razlikama:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{h^2},$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{h^2}.$$

Uvrstimo li te aproksimacije derivacija u diferencijalnu jednažbu, dobivamo

$$4u_{i,j} - u_{i-1,j} - u_{i+1,j} - u_{i,j-1} - u_{i,j+1} = h^2 f_{i,j}, \quad i, j = 1, \dots, N.$$



$u_{i,j}$ ovisi o $u_{i-1,j}$, $u_{i+1,j}$, $u_{i,j-1}$ i $u_{i,j+1}$.

Numeriranje čvorova u kvadratnoj mreži

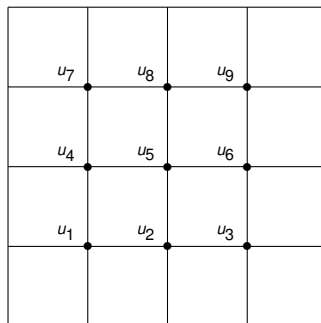
Pitanje je kako treba napisati ove jednačbe, tako da se dobije linearni sustav s nekom strukturom.

Postoje dva načina da bi se to napravilo.

- Jedan je sekvencijalno numeriranje $u_{i,j}$ po recima ili stupcima (slijeva nadesno, ili zdesna nalijevo, odozgo nadolje ili odozdo nagore),
- a drugi tzv. crveno–crni poredak čvorova, kao kod šahovnice.

Sekvencijalno numeriranje čvorova

Ako $u_{i,j}$ sekvencijalno numeriramo po recima odozdo nagore, na primjer za $N = 3$, dobivamo ovakav poredak čvorova:



Dakle, lako zamjenjujemo $u_{i,j}$ s u_k , gdje $k = (j - 1)N + i$.

Linearni sustav za 2D Poissonovu jednačbu

Ako se na isti način transformiraju i $f_{i,j}$ u f_k , onda dobivamo linearni sustav

$$G_{N \times N} u = h^2 f,$$

gdje je $u = [u_1, u_2, \dots, u_{N \times N}]^T$, $f = [f_1, f_2, \dots, f_{N \times N}]^T$, a matrica $G_{N \times N}$ ima N blok-redaka i blok-stupaca, svaki dimenzije N . $G_{N \times N}$ je $N^2 \times N^2$ matrica oblika

$$G_{N \times N} = \begin{bmatrix} G_N + 2I_N & -I_N & & \\ -I_N & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -I_N \\ & & -I_N & G_N + 2I_N \end{bmatrix},$$

pri čemu je I_N jedinična matrica reda N , a opet je

$$G_N = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ & & -1 & 2 \end{bmatrix}.$$

G_N matrica koja nastaje diskretizacijom odgovarajuće 1D Poissonove jednačbe.

Na primjer, za $N = 3$, matrica linearnog sustava je

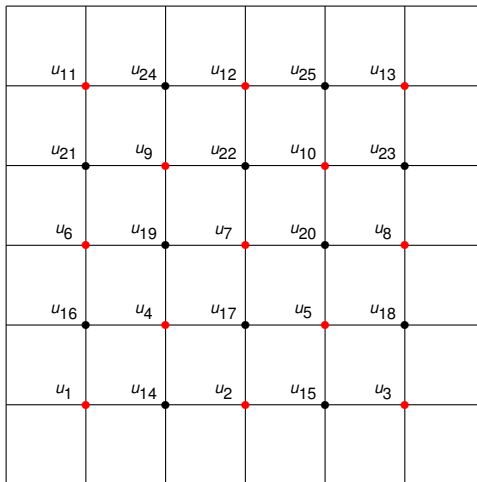
$$G_{3 \times 3} = \begin{bmatrix} 4 & -1 & & -1 & & \\ -1 & 4 & -1 & & -1 & \\ & -1 & 4 & & & -1 \\ -1 & & & 4 & -1 & -1 \\ & -1 & & -1 & 4 & -1 \\ & & -1 & & -1 & 4 \\ & & & -1 & & 4 & -1 \\ & & & & -1 & -1 & 4 \end{bmatrix}$$

Crveno-crno numeriranje čvorova

Ako čvorove $u_{i,j}$ poredamo u tzv. crveno–crni poredak, dobit ćemo konzistentno poredanu matricu (definicija kasnije).

Crveno–crni poredak dobivamo tako da ih obojamo poput šahovske ploče: svaki crveni čvor (osim rubnog) je okružen s četiri crna susjeda i obratno.

Na primjer, za $N = 5$ takvo crveno–crno bojanje čvorova izgleda ovako:



Ako zatim sve čvorove koji su crveno obojani popišemo prije crnih (dodijelimo im indekse prije crnih), ili obratno, dobit ćemo blok matricu oblika

$$PG_{N \times N}P^T = \begin{bmatrix} D_1 & G_{12} \\ G_{21} & D_2 \end{bmatrix}.$$

Lako je vidjeti da su dijagonalni blokovi baš dijagonalne matrice, jer ne postoji veza između dva crvena ili dva crna čvora (osim čvora sa samim sobom).

Konkretno, crveno–crni poredak za matricu $G_{3 \times 3}$ daje

$$PG_{3 \times 3}P^T = \left[\begin{array}{cccc|cccc} 4 & & & & -1 & -1 & & \\ & 4 & & & -1 & & -1 & \\ & & 4 & & -1 & -1 & -1 & -1 \\ & & & 4 & & -1 & & -1 \\ & & & & 4 & & -1 & -1 \\ \hline -1 & -1 & -1 & & 4 & & & \\ -1 & & -1 & -1 & & 4 & & \\ & -1 & -1 & & -1 & & 4 & \\ & & -1 & -1 & -1 & & & 4 \end{array} \right].$$

Svojstvene vrijednosti matrice $G_{N \times N}$

Teorem

Svojstvene vrijednosti matrice $G_{N \times N}$ su

$$\lambda_{j,k} = 4 \left[\sin^2 \left(\frac{j\pi}{2(N+1)} \right) + \sin^2 \left(\frac{k\pi}{2(N+1)} \right) \right], \quad j, k = 1, \dots, N,.$$

Dokaz. Neka je λ neka svojstvena vrijednost od $G_{N \times N}$ sa odgovarajućim svojstvenim vektorom u , koji se može particionirati u oblik

$$u = \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{bmatrix}, \quad u_\ell = \begin{bmatrix} u_{1,\ell} \\ \vdots \\ u_{N,\ell} \end{bmatrix}, \quad \ell = 1, \dots, N.$$

Neka je

$$S = G_N + 2I_N.$$

Tada se jednakost

$$G_{N \times N} u = \lambda u$$

može napisati u obliku

$$-I u_{\ell-1} + (S - \lambda I_N) u_{\ell} - I u_{\ell+1} = 0, \quad \ell = 1, \dots, N, \quad (*)$$

gdje smo postavili da je $u_0 = u_{N+1} = 0$.

Svojstvena vrijednosti matrice S su

$$\mu_j(S) = \mu_j(G) + 2 = 2 + \sin^2 \left(\frac{j\pi}{N+1} \right).$$

S je simetrična pa postoji ortogonalna matrica Q takva da je

$$S = Q \Lambda_S Q^T,$$

gdje je Λ_S dijagonalna matrica: $\Lambda_S = [\mu_1(S), \mu_2(S), \dots, \mu_N(S)]^T$.

Pomnožimo blok-rekurziju (*) sa Q^T slijeva kako bismo dobili

$$-I v_{\ell-1} + (\Lambda_S - \lambda I) v_{\ell} - I v_{\ell+1} = 0, \quad v_{\ell} = Q^T u_{\ell}, \quad \ell = 1, \dots, N.$$

Budući da su ovdje sve matrice dijagonalne, jednakosti duž vertikalnih linija u mreži imaju oblik

$$-v_{j,\ell+1} + \mu_j(S) v_{j,\ell} - v_{j,\ell-1} = \lambda v_{j,\ell}, \quad j = 1, \dots, N.$$

Ako je, za fiksnu vrijednost od j , vektor $[v_{j,1} \dots v_{j,N}]^T$ svojstveni vektor matrice

$$\begin{bmatrix} \mu_j(S) & -1 & & \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ & & -1 & \mu_j(S) \end{bmatrix},$$

s odgovarajućom svojstvenom vrijednošću λ , i ako uzmemo da su sve ostale komponente vektora v jednake 0, tada će prethodna jednakost biti zadovoljena.

Svojstvene vrijednosti ove matrice jednake su

$$\begin{aligned}\lambda_{j,k} &= \mu_j(S) + 4 \sin^2 \left(\frac{k\pi}{2(N+1)} \right) - 2 \\ &= 4 \sin^2 \left(\frac{j\pi}{2(N+1)} \right) + 4 \sin^2 \left(\frac{k\pi}{2(N+1)} \right),\end{aligned}$$

za $k = 1, \dots, N$.

Napomena. Formula za $\lambda_{j,k}$ je poopćenje formule za svojstvene vrijednosti matrice G .

Da bismo dobili matricu vezanu uz rekurziju za Čebiševljeve polinome 2. vrste, umjesto korištene supstitucije $2y = x + 2$ treba koristiti $2y = x + \mu_j(S)$. □

Uvjetovanost matrice $G_{N \times N}$

Korolar

Najmanja i najveća svojstvena vrijednost od $G_{N \times N}$ ponašaju se kao

$$\lambda_{\min} \approx 2\pi^2 h^2 + \mathcal{O}(h^4) \quad i \quad \lambda_{\max} \approx 8 + \mathcal{O}(h^2)$$

kada $h \rightarrow 0$, tako da se uvjetovanost matrice $G_{N \times N}$ ponaša kao

$$\kappa(G_{N \times N}) \approx \frac{4}{\pi^2} h^{-2} + \mathcal{O}(1) = \mathcal{O}(N^2).$$

Dokaz. Najmanja svojstvena vrijednost od $G_{N \times N}$ je ona za $j = k = 1$, a najveća je ona sa $j = k = N$:

$$\lambda_{\min} = 8 \sin^2 \left(\frac{\pi h}{2} \right), \quad \lambda_{\max} = 8 \sin^2 \left(\frac{\pi}{2} - \frac{\pi h}{2} \right).$$

Razvojem u Taylorov red slijedi dokaz teorema.