Matematisk modellering og numeriske metoder

Lektion 13

Morten Grud Rasmussen

13. november 2016

1 Numerisk metode til Laplace- og Poisson-ligningerne

1.1 Finite difference-formulering af problemet

I det følgende vil vi approksimere Laplace- og Poisson-ligningerne med en diskret udgave. For klarheds skyld holder vi os til to dimensioner, hvor Laplace-ligningen altså ser ud på følgende måde:

$$\nabla^2 u = u_{xx} + u_{yy} = 0,$$

mens Poisson-ligningen er den inhomogene pendant:

$$\nabla^2 u = u_{xx} + u_{yy} = f(x, y).$$

Vi minder om, at Laplace-ligningen kan tolkes som en tidsuafhængig udgave af såvel bølge- som varmeligningen, mens f'et i Poisson-ligningen kan tolkes som et *kildeled*, eksempelvis som en modellering af en konstant varmekilde. I lektion 1 kiggede vi på Eulers metode, hvor vi fandt en numerisk løsning til en eksplicit ODE af førsteorden ved at diskretisere den reelle akse. Hvis vi nu tilsvarende diskretiserer planen med $\{(x_i, y_j)\}_{i,j}$, hvor $x_i = x_0 + ih$ og $y_j = y_0 + jh$, *altså samme skridtlængde i de to retninger*, og bruger det, der kaldes *den centrale andenordensdifferenskvotient* i diskretiseringen af både u_{xx} og u_{yy}, så bliver diskretiseringen af Laplace-ligningen til

$$\begin{aligned}\nabla^2 u(x_i, y_j) &\approx \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h^2} \\ &= \frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j}}{h^2} = 0\end{aligned} \tag{1}$$

eller blot

$$u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j} = 0, \tag{2}$$

mens Poisson-ligningen tilsvarende bliver til

$$u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j} = h^2 f(x_i, y_j). \tag{3}$$

1.2 Dirichlet-randbetingelser

Hvis randen af den region, hvor vi ønsker at løse Laplace- eller Poisson-ligningen, er så pæn, at randen af vores maske kan arrangeres til at ligge på randen af den pågældende region, så kan vi inkludere Dirichlet-randbetingelser (faste værdier langs randen) i modellen blot ved at sætte $u_{i,j} = u(x_i, y_j)$ for de par (x_i, y_j) som ligger på randen. Vi illustrerer med et eksempel.

Eksempel 1.1. Vi har en 12×12 kvadratisk plade som langs øverste kant holdes på temperaturen 0 grader, mens de andre kanter holdes på 100 grader (spørg ikke, hvad der sker i hjørnerne – det er alligevel ikke relevant i vores diskrete model). Vi er interesserede i den temperatur, pladen har, når der er gået tilpas lang tid, til at temperaturudvekslingen er i ligevægt. Dette modelleres altså med en tidsuafhængig varmeligning, også kendt som Laplace-ligningen.

Vi vil løse ligningen numerisk, og skal derfor diskretisere, $u_{i,j} \approx u(x_i, y_j)$. Vi vælger $h = 4$ (en ret voldsom størrelse af en skridtlængde, som dog skal vise sig at give nogenlunde fornuftige resultater), et koordinatsystem, som følger pladens rand og har origo i nederste, venstre hjørne, og vælger masken givet ved $x_i = x_0 + ih$ og $y_j = y_0 + jh$ for $x_0 = 0$ og $y_0 = 0$. Vi kan nu benytte (2) til at opstille ligningssystemet.

Det ses let, at regionen, som pladen dækker, diskretiseres til $\{(x_i, y_j)\}_{i,j=0}^{3}$, og da temperaturen er kendt på kanten ($i = 0, 3$, $j = 0, 3$), er der faktisk kun fire ubekendte: u_{11}, u_{21}, u_{12} og u_{22}. Disse værdier kan nu findes vha. (2), idet vi får ligningssystemet:

$$
\begin{aligned}
-4u_{11} + u_{01} + u_{10} + u_{21} + u_{12} &= 0,\\
-4u_{21} + u_{11} + u_{20} + u_{31} + u_{22} &= 0,\\
-4u_{12} + u_{02} + u_{11} + u_{22} + u_{13} &= 0,\\
-4u_{22} + u_{12} + u_{21} + u_{32} + u_{23} &= 0.
\end{aligned}
$$

Her er $u_{01} = u_{10} = u_{02} = u_{20} = u_{31} = u_{32} = 100$ mens $u_{13} = u_{23} = 0$ pga. randbetingelserne (bemærk, at hjørnerne ikke indgår i nogen af ligningerne), så hvis vi smider kendte størrelser over på højresiden og omrokerer, fås

$$
\begin{array}{rrrrl}
-4u_{11} & +u_{21} & +u_{12} & & = -200,\\
u_{11} & -4u_{21} & & +u_{22} & = -200,\\
u_{11} & & -4u_{12} & +u_{22} & = -100,\\
 & u_{21} & +u_{12} & -4u_{22} & = -100,
\end{array}
$$

altså fire ligninger med fire ubekendte, som nemt kan løses. Gøres dette, fås $u_{11} = u_{21} = 87.5$ og $u_{12} = u_{22} = 62.5$, hvilket er omkring 1% fra den eksakte løsning: $u(x_1, y_1) = u(x_2, y_1) = 88.1$ og $u(x_1, y_2) = u(x_2, y_2) = 61.9$.

Vi bemærker, at sidste ligningssystem også kan skrive på formen $Au = b$, hvor

$$
A = \begin{pmatrix} B & I_2 \\ I_2 & B \end{pmatrix} \quad \text{med} \quad B = \begin{pmatrix} -4 & 1 \\ 1 & -4 \end{pmatrix} \quad \text{og} \quad I_2 = \begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix},
$$

mens

$$
u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \quad \text{hvor} \quad u_i = \left(\begin{smallmatrix} u_{i1} \\ u_{i2} \end{smallmatrix}\right)
$$

og b repræsenterer randbetingelserne. Hvis vi i stedet for at lade $h = 4 = \frac{12}{3}$, hvor vi endte med en $(3-1)^2 \times (3-1)^2$-matrix A (antallet af indre punkter er $(3-1)^2$) og to $(3-1) \times (3-1)$-matricer B og $I_{3-1} = I_2$, havde valgt $h = \frac{12}{n}$, så havde vi fået en $(n-1)^2 \times (n-1)^2$-matrix A på formen

$$A = \begin{pmatrix} B & I_{n-1} & & & \\ I_{n-1} & B & I_{n-1} & & \\ & & \ddots & & \\ & & I_{n-1} & B & I_{n-1} \\ & & & I_{n-1} & B \end{pmatrix}, \qquad \text{hvor} \qquad B = \begin{pmatrix} -4 & 1 & & & \\ 1 & -4 & 1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & 1 & -4 & 1 \\ & & & 1 & -4 \end{pmatrix}$$

er en $(n-1) \times (n-1)$-matrix. Med andre ord ville vi med en fin inddeling (eller et lille h) hurtigt ende med en stor matrix med en masse 0-indgange. Bliver n tilstrækkeligt stor, bliver det umuligt at invertere A på en computer, og vi må ty til andre metoder. Næste sektion beskriver en iterativ metode til numerisk løsning af sådanne inverteringsproblemer.

1.3 Gauss-Seidel-iterationsmetoden

Den såkaldte Gauss-Seidel-iterationsmetode er en metode til numerisk løsning af lineære ligningsystemer med samme antal ligninger som ubekendte. Vi vil illustrere metoden på ligningssystemet

$$\begin{aligned} -4u_{11} + u_{21} + u_{12} \qquad &= -200, \\ u_{11} - 4u_{21} \qquad + u_{22} &= -200, \\ u_{11} \qquad - 4u_{12} + u_{22} &= -100, \\ u_{21} + u_{12} - 4u_{22} &= -100 \end{aligned}$$

fra forrige sektion. Vi bemærker, at ligningssystemet også kan skrives som $Au = b$ med alle diagonalelementer i A forskellige fra nul (i dette konkrete tilfælde er de alle -4), hvilket er vigtigt for denne metode. Først omskriver vi systemet til

$$\begin{aligned} u_{11} - \tfrac{1}{4}u_{21} - \tfrac{1}{4}u_{12} \qquad &= 50, \\ -\tfrac{1}{4}u_{11} + u_{21} \qquad - \tfrac{1}{4}u_{22} &= 50, \\ -\tfrac{1}{4}u_{11} \qquad + u_{12} - \tfrac{1}{4}u_{22} &= 25, \\ -\tfrac{1}{4}u_{21} - \tfrac{1}{4}u_{12} + u_{22} &= 25, \end{aligned}$$

ved at dividere hver række med diagonalelementets værdi, således at systemet nu er på formen $A'u = b'$ hvor diagonalelementerne i A' er 1. Herefter omskrives til formen

$$\begin{aligned} u_{11} &= \qquad \tfrac{1}{4}u_{21} + \tfrac{1}{4}u_{12} \qquad + 50, \\ u_{21} &= \tfrac{1}{4}u_{11} \qquad + \tfrac{1}{4}u_{22} + 50, \\ u_{12} &= \tfrac{1}{4}u_{11} \qquad + \tfrac{1}{4}u_{22} + 25, \\ u_{22} &= \qquad \tfrac{1}{4}u_{21} + \tfrac{1}{4}u_{12} \qquad + 25. \end{aligned}$$

Nu gættes på løsninger $u_{11}^{(0)}$, $u_{21}^{(0)}$, $u_{12}^{(0)}$ og $u_{22}^{(0)}$, eksempelvis $u_{11}^{(0)} = u_{21}^{(0)} = u_{12}^{(0)} = u_{22}^{(0)} = 100$, og iterationen fra $u_{ij}^{(n)}$ til $u_{ij}^{(n+1)}$ er nu som følger:

$$\begin{aligned}
u_{11}^{(n+1)} &= & \tfrac{1}{4}u_{21}^{(n)} &+ \tfrac{1}{4}u_{12}^{(n)} & &+ 50,\\
u_{21}^{(n+1)} &= \tfrac{1}{4}u_{11}^{(n+1)} & & & + \tfrac{1}{4}u_{22}^{(n)} &+ 50,\\
u_{12}^{(n+1)} &= \tfrac{1}{4}u_{11}^{(n+1)} & & & + \tfrac{1}{4}u_{22}^{(n)} &+ 25,\\
u_{22}^{(n+1)} &= & \tfrac{1}{4}u_{21}^{(n+1)} &+ \tfrac{1}{4}u_{12}^{(n+1)} & &+ 25,
\end{aligned}$$

hvor vi bemærker, at så snart en værdi er opdateret i linjen ovenover, skal den nye værdi benyttes i den efterfølgende linje, således at værdier "over diagonalen" er "gamle", mens værdier "under diagonalen" er "nye."

Med valget $u_{11}^{(0)} = u_{21}^{(0)} = u_{12}^{(0)} = u_{22}^{(0)} = 100$ giver de første iterationer

n	$u_{11}^{(n)}$	$u_{21}^{(n)}$	$u_{12}^{(n)}$	$u_{22}^{(n)}$
0	100.00	100.00	100.00	100.00
1	100.00	100.00	75.000	68.750
2	93.750	90.625	65.625	64.062
3	89.062	88.281	63.281	62.891
4	87.891	87.695	62.695	62.598
5	87.598	87.549	62.549	62.524
6	87.524	87.512	62.512	62.506
7	87.506	87.503	62.503	62.502

og resultaterne konvergerer altså mod de rigtige løsninger $u_{11} = u_{21} = 87.5$, $u_{12} = u_{22} = 62.5$.

Vi opsummerer metoden i mere formel form. Først skrives ligningssystemet $Au = b$ om til $A'u = b'$, hvor diagonalen i A' er lutter 1'ere ved at dividere hver række i $Au = b$ med den oprindelige (ikke-nul) værdi af diagonalelementet. Herefter skrives $A' = I + N + O$, hvor I er identitetsmatricen, Mens N er en nedre triangulærmatrix og O er en øvre triangulærmatrix. Ligningssystemet kan nu skrives $u = b' - Nu - Ou$. Der gættes på en løsning $u^{(0)}$ og iterationen er

$$u^{(n+1)} = b' - Nu^{(n+1)} - Ou^{(n)},$$

som under visse betingelser, som er opfyldt i ovenstående eksempel, konvergerer mod løsningen u.

1.4 Neumann- og blandede randbetingelser

Vi har set, hvordan man kan diskretisere Laplace- og Poisson-ligningen på en pæn region med Dirichlet-randbetingelser, og vi vil nu se, hvordan man diskretiserer i tilfældet med Neumann- eller blandede randbetingelser. Vi genkalder os, at Neumann-randbetingelser er randbetingelser, hvor den ydre normal-afledede $\frac{\partial u}{\partial n}$ har en bestemt (stedafhængig) værdi på randen, og i den tidsuafhængige varmeligning eksempelvis svarer til en isoleret rand hvis denne værdi er konstant lig 0. Vi illustrerer metoden for blandede randbetingelser med et eksempel.

Eksempel 1.2. Vi betragter Poissonligningen

$$\nabla^2 u = u_{xx} + u_{yy} = f(x,y) = 12xy$$

på regionen $R = [0, 1.5] \times [0, 1]$ med de blandede randbetingelser $u \equiv 0$ på $L_1 = [0, 1.5] \times \{0\}$, $u(x,y) = 3y^3$ på $L_2 = \{1.5\} \times [0, 1.0]$, $\frac{\partial u}{\partial n}(x,y) = 6x$ på $L_3 = [0, 1.5] \times \{1.0\}$ og igen $u \equiv 0$ på $L_4 = \{0\} \times [0, 1.0]$. Vi ønsker at løse ligningen numerisk, og diskretiserer problemet vha. (3) med $h = 0.5$. Vi skal altså finde $\{u_{ij}\}_{i,j=0}^{i=3,j=2}$, så $u_{ij} \approx u(x_i, y_j)$ med $x_i = ih$ og $y_j = jh$. Randbetingelserne på L_1 og L_4 giver

$$\begin{aligned} u_{i0} = u_{0j} &= 0 && \text{for} \quad i = 0,1,2,3,\ j = 0,1,2 \\ u_{31} &= 0.375, && u_{32} = 3, \\ \tfrac{\partial u_{12}}{\partial n} = \tfrac{\partial u_{12}}{\partial y} &= 6 \cdot 0.5 = 3, && \tfrac{\partial u_{22}}{\partial n} = \tfrac{\partial u_{22}}{\partial y} = 6 \cdot 1 = 6. \end{aligned}$$

Vi har altså værdier for alle punkter undtagen u_{12} og u_{22}, hvor vi har partielt afledede, samt u_{11} og u_{21}, hvor vi kan bruge samme metode som før:

$$\begin{aligned} -4u_{11} + u_{21} + u_{12} \quad &= h^2 f(x_1, y_1) - u_{01} = 0.75, \\ u_{11} - 4u_{21} \quad + u_{22} &= h^2 f(x_2, y_1) - u_{31} = 1.125. \end{aligned} \tag{4}$$

Problemet er naturligvis, at punkterne u_{12} og u_{22}, som vi kun kender de afledede af, også indgår. Vi løser dette problem ved at tilføje to kunstige punkter u_{13} og u_{23} udenfor regionen R, som vi antager også opfylder Poisson-ligningen og skriver i første omgang

$$\begin{aligned} u_{11} \quad - 4u_{12} + u_{22} + u_{13} \quad &= h^2 f(x_1, y_2) - u_{02} = 1.5, \\ u_{21} + u_{12} - 4u_{22} \quad + u_{23} &= h^2 f(x_2, y_2) - u_{32} = 0. \end{aligned} \tag{5}$$

For at slippe af med de kunstige punkter u_{13} og u_{23} benytter vi nu den centrale differenskvotient, som approksimerer $\frac{\partial u}{\partial y}$, og får

$$3 = \tfrac{\partial u_{12}}{\partial y} \approx \tfrac{u_{13} - u_{11}}{2h} = u_{13} - u_{11} \qquad \text{og} \qquad 6 = \tfrac{\partial u_{22}}{\partial y} \approx \tfrac{u_{23} - u_{21}}{2h} = u_{23} - u_{21},$$

og da u_{ij}'erne i forvejen er approksimationer, kan vi tillade os at sætte

$$u_{13} = u_{11} + 3 \qquad \text{og} \qquad u_{23} = u_{21} + 6.$$

sættes disse udtryk ind i (5), fås

$$\begin{aligned} 2u_{11} \quad - 4u_{12} + u_{22} &= h^2 f(x_1, y_2) - u_{02} - 3 = -1.5, \\ 2u_{21} + u_{12} - 4u_{22} &= h^2 f(x_2, y_2) - u_{32} - 6 = -6. \end{aligned} \tag{6}$$

Vi står nu med fire lineære ligninger (4) og (6), med fire ubekendte u_{11}, u_{21}, u_{12} og u_{22}, som vi kan løse med en valgfri metode. Som en service bringer vi her resultatet (u_{ij}'erne), samt den eksakte værdi ($u(x_i, y_j)$'erne):

$$\begin{aligned} &u_{11} = 0.077, && u(x_1, y_1) = 0.125, && u_{21} = 0.191, && u(x_2, y_1) = 0.25, \\ &u_{12} = 0.866, && u(x_1, y_2) = 1, && u_{22} = 1.812, && u(x_2, y_2) = 2, \end{aligned}$$

som vel kan siges at være en rimelig approksimation med den ret grove maske.

1.5 Irregulær rand

Indtil videre har randen været gevaldig pæn, så pæn, at maskens rand flugtede med regionens. Dette er naturligvis ikke altid muligt. Vi vil nu vise, hvordan man håndterer denne situation. Antag, at (x_i, y_j) er et maskepunkt indenfor regionen R, som ligger så tæt på randen, at ét eller flere af nabopunkterne $(x_{i-1}, y_j) = (x_i - h, y_j)$, $(x_{i+1}, y_j) = (x_i + h, y_j)$, $(x_i, y_{j-1}) = (x_i, y_j - h)$ og $(x_i, y_{j+1}) = (x_i, y_j + h)$ ligger udenfor R. Vælg $0 < a, b, p, q \leq 1$ så de fire punkter $u_P = (x_i - ph, y_j)$, $u_A = (x_i + ah, y_j)$, $u_Q = (x_i, y_j - qh)$ og $u_B = (x_i, y_j + bh)$ hver især enten er et randpunkt eller et af de førnævnte maskepunkter, som ligger indenfor R. Med andre ord "rykker" vi om nødvendigt nabopunkterne lige præcis så langt ind mod (x_i, y_j), at de alle fire ligger i R.

Justerer vi de to centrale andenordensdifferenskvotienter i forhold til disse punkter, får man i stedet for (1) approksimationen

$$\nabla^2 u(x_i, y_j) \approx \frac{2}{h^2}\left(\frac{u_A}{a(a+p)} + \frac{u_B}{b(b+q)} + \frac{u_P}{p(p+a)} + \frac{u_Q}{q(q+b)} - \frac{ap+bq}{abpq}u_{ij}\right) \tag{7}$$

(det bemærkes, at hvis $a = b = p = q = 1$, så reducerer udtrykket til højresiden i (1)). Problemer med irregulær rand kan nu løses som før, blot med (1) erstattet af (7) nær problematiske randpunkter. Vi vil nu se på et eksempel.

Eksempel 1.3. Vi ser på Laplace-ligningen[1] på regionen

$$R = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \,|\, 0 \leq x \leq 8, 0 \leq y \leq 9, x^2 + y^2 \leq 10^2\},$$

med Dirichlet-randbetingelserne $u(x, y) = x^3$ på nederste kant, $u(x, y) = 512 - 24y^2$ på højre kant, $u(x, y) = 4x^3 - 300x$ på den runde del af kanten, $u(x, y) = x^3 - 243x$ og $u \equiv 0$ på venstre kant. Vi vælger $h = 3$ og $x_0 = y_0 = 0$. Dette giver en maske med 11 punkter indenfor regionen, men her er de 7 allerede kendte blot ud fra randbetingelserne. De ukendte værdier er u_{11}, u_{21}, u_{12} og u_{22}. For u_{11} og u_{12} sættes $a = b = p = q = 1$, for u_{21} sættes $a = \frac{2}{3}$ og $b = p = q = 1$, og for u_{22} sættes $a = b = \frac{2}{3}$. Det betyder, at omkring u_{21} er $u_A = 296$, og omkring u_{22} er $u_A = -352$ og $u_B = -936$. Indsættes også de andre u_{ij}'er, som er kendte fra randbetingelserne, samt koefficienterne fra (7), fås følgende ligningssystem:

$$\begin{aligned}
-4u_{11} \quad + u_{21} \quad + u_{12} \qquad\qquad &= 0 - 27 = -27, \\
0.6u_{11} - 2.5u_{21} \qquad\qquad + 0.5u_{22} &= -0.9 \cdot 296 - 0.5 \cdot 216 = -374.4, \\
u_{11} \qquad\qquad - 4u_{12} \quad + u_{22} &= 702 + 0 = 702, \\
0.6u_{21} + 0.6u_{12} - \quad 3u_{22} &= 0.9 \cdot 352 + 0.9 \cdot 936 = 1159.2,
\end{aligned}$$

som nemt kan løses. Igen er der god service, og u_{ij} samt den eksakte værdi $u(x_i, y_j)$ (idet løsningen er $u(x, y) = x^3 - 3xy^2$) serveres her:

$$\begin{aligned}
u_{11} &= -55.6, & u(x_1, y_1) &= -54, & u_{21} &= 49.2, & u(x_2, y_1) &= 54, \\
u_{12} &= -298.5, & u(x_1, y_2) &= -297, & u_{22} &= -436.3, & u(x_2, y_2) &= -432,
\end{aligned}$$

altså en ret imponerende præcision, den grove maske taget i betragtning. En meget bedre løsning fås naturligvis ved at vælge h meget mindre, og eventuelle problemer med at løse det tilhørende ligningssystem kan afhjælpes vha. eksempelvis Gauss-Seidel-iteration.

[1]Da Laplace-ligningen er homogen, kan vi se bort fra den konstante faktor $\frac{2}{h^2}$. Dette gælder *ikke*, hvis vi arbejder med Poisson-ligningen.