MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ A NUMERICKÉ METODY

MICHAL ŠMOLÍK, ONDŘEJ NEDVĚD

KLASIFIKACE DIFFERENCIÁLNÍCH ROVNIC

- Zavedení zjednodušeného značení:
  - $\frac{\partial u}{\partial x} = u_x \qquad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = u_{xx} \qquad \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} = u_{xy}$
- Obecný tvar rovnice:
  - $au_{xx} + bu_{xy} + cu_{yy} + du_x + eu_y + fu = g$
- Klasifikace diferenciálních rovnic:
  - $b^2 - 4ac < 0$: eliptická
    - Např.: $u_{xx} + u_{yy} = 0$
  - $b^2 - 4ac = 0$: parabolická
    - Např.: $u_{xx} + u_y = 0$
  - $b^2 - 4ac > 0$: hyperbolická
    - Např.: $u_{xx} - u_{yy} = 0$

STACIONÁRNÍ × T-PROMĚNNÉ ÚLOHY

- Stacionární úlohy
  - Stálé v čase
  - V rovnicích se neobjevuje proměnná času
- T-Proměnné úlohy
  - Proměnné v čase
  - Rovnice obsahují t, u_t
  - Nutné dát pozor na míchání času a prostoru (výpočet vzdálenosti)
    - Mají jiné jednotky ($[s] \times [m]$)

METODY NA PRAVIDELNÉ SÍTI

- Diskretizací prostoru možné vytvořit pravidelnou síť bodů
- Jednoduché výpočty aproximací derivací:
  - $u_x(x) = \frac{u(x+\Delta x)-u(x)}{\Delta x}$, nebo $u_x(x) = \frac{u(x)-u(x-\Delta x)}{\Delta x}$, nebo $u_x(x) = \frac{u(x+\Delta x)-u(x-\Delta x)}{2\Delta x}$
  - $u_{xx}(x) = \frac{u(x+\Delta x)-2u(x)+u(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2}$

1. PŘÍKLAD

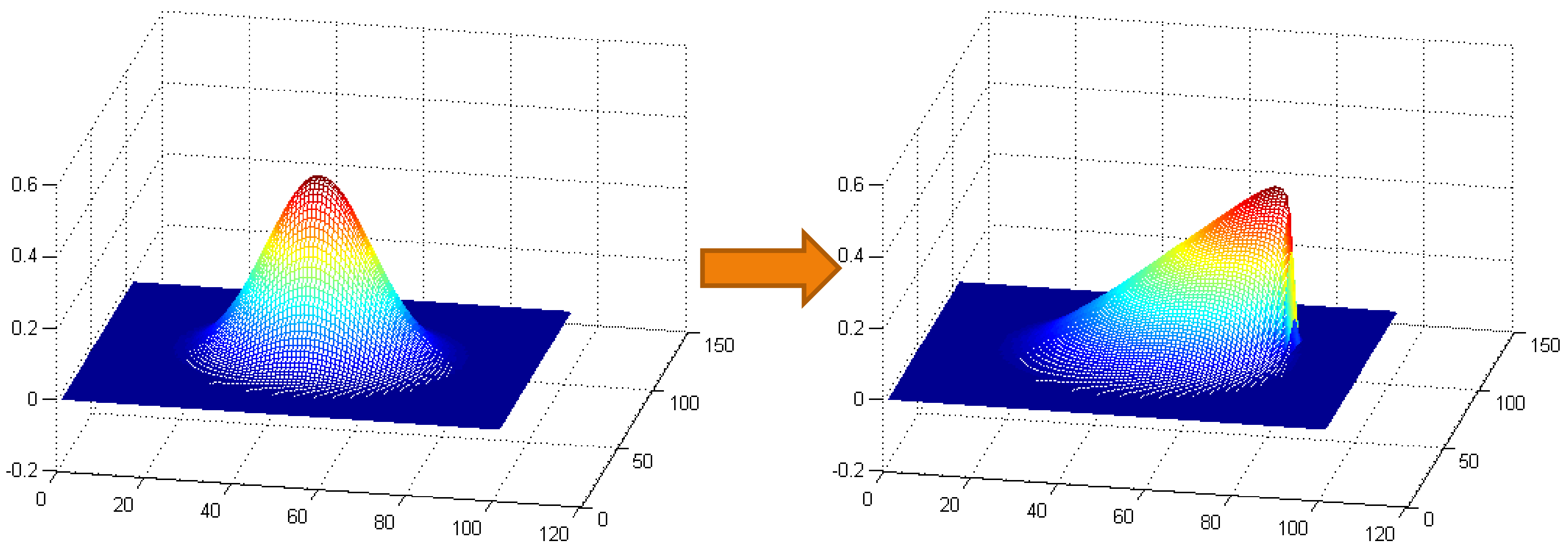
- Zadání:
  - $u_t + au_x = du_{xx}$
  - Počáteční podmínky: $u_{t_0} =$………
  - Okrajové podmínky: $u_{x_0} =$……… $u_{x_n} =$………
- Diskretizace:
  - $\frac{u(t+\Delta t,x)-u(t,x)}{\Delta t} + a\frac{u(t,x+\Delta x)-u(t,x)}{\Delta x} = d\frac{u(t,x+\Delta x)-2u(t,x)+u(t,x-\Delta x)}{(\Delta x)^2}$
- Vyjádření $u(t+\Delta t, x)$:
  - $u(t+\Delta t, x) = \Delta t\left(d\frac{u(t,x+\Delta x)-2u(t,x)+u(t,x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} - a\frac{u(t,x+\Delta x)-u(t,x)}{\Delta x}\right) + u(t,x)$

2. PŘÍKLAD

- Zadání:
  - $u_t + \left(\frac{1}{2}u^2\right)_x + \left(\frac{1}{2}u^2\right)_y = d\left(u_{xx} + u_{yy}\right)$
  - Počáteční podmínky: $u_{t_0} =$………
  - Okrajové podmínky: $u_{x_0} =$……… $u_{x_n} =$……… $u_{y_0} =$……… $u_{y_n} =$………
- Výpočet první parciální derivace $\left(\frac{1}{2}u^2\right)_x$ nebo $\left(\frac{1}{2}u^2\right)_y$:
  - Nutné určit typ derivace: dopředná × zpětná
  - $\left(\frac{1}{2}u^2\right)_x = uu_x$, nebo-li hodnota u určuje směr advekce

2. PŘÍKLAD

- Řešení



GALLERKINOVA METODA

$$-u'' = f$$
$$-u''v = fv$$
$$-\int_0^1 u''v\,dx = \int_0^1 fv\,dx$$
$$\int_0^1 u'v'dx - [u'v]_0^1 = \int_0^1 fv\,dx$$
$$\sum_{i=1}^{N_\phi} \lambda_i \left(\int_0^1 \phi_i'(x)v'dx - [\phi_i'(x)v]_0^1 \right) = \int_0^1 fv\,dx$$

- $\phi_i(x)$ je bázová funkce – např.: Fourierova báze
- Okrajové podmínky: $\mathrm{u}(0) = \sum_{i=1}^{N_\phi} \lambda_i\, \phi_i(0)$, $\quad \mathrm{u}'(1) = \sum_{i=1}^{N_\phi} \lambda_i\, \phi_i{}'(1)$

GALLERKINOVA METODA

- Použité bázové funkce
  - Fourierova báze:
    - $\cos(k\pi x)$ & $\sin(k\pi x), k \in \left\{1, 2, \dots, \frac{N_\phi}{2}\right\}$
  - Bernsteinovy polynomy:
    - $\binom{N_\phi - 1}{k} x^k (1-x)^{N_\phi - 1 - k}, k \in \{0, 1, \dots, N_\phi - 1\}$
    - Špatně podmíněná soustava
  - Polynomy k-tého stupně:
    - $x^k, k \in \{0, 1, \dots, N_\phi - 1\}$
    - Špatně podmíněná soustava

MESHLESS METODY

- Pro úlohu $au_x + bu_y = d\left(u_{xx} + u_{yy}\right)$
- Vstupní data
  - Jsou dány hodnoty v obecně D-dimenzionálním prostoru
    - Množina dvojic $\{[\boldsymbol{x}, h], \dots\}$ kde $\boldsymbol{x}$ je z dimenze **D** a h je skalár.
    - h zde na rozdíl od úlohy integrace gradientního pole není vektor.
  - Hodnoty nemusí být uspořádány.
- Vyjádření hodnot jako lineární kombinace RBF, tedy:
  - $f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \Phi(\|x - x_i\|)$

JAKÉ RBF LZE POUŽÍT

- Např. pro fyzikální simulace je často požadován předpis minimalizující energii.
- Tomuto požadavku odpovídají dvě funkce [Fasshauer 2009]:
  - TPS - $\Phi(r) = r^2 \log(r)$
  - Multikvadrika - $\Phi(r) = \sqrt{1 + (\epsilon r^2)}$
  - Norma je použita Euklidovská, tedy pro 2D: $r = \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2}$
- Je nutné, aby požadovaná derivace funkce existovala a byla spojitá.
  - Požadavky na stupeň spojitosti se předpokládají alespoň stejné jako u vstupních dat.
- Při výběru RBF brát v potaz derivaci složené funkce: $\phi'\big(r(\boldsymbol{x})\big) = \frac{d\Phi}{dr} \cdot \frac{dr}{d\boldsymbol{x}}$
  - Derivace normy přidává možnou nespojitost v nule.

GALLERKINOVA METODA & RBF

- Změna bázové funkce: $\phi_i{}'(x) \to \phi_i'(\|x - x_i\|)$
  - $\sum_{i=1}^{N_\phi} \lambda_i \left(\int_0^1 \phi_i'(\|x - x_i\|) v' \, dx - [\phi_i'(\|x - x_i\|) v]_0^1 \right) = \int_0^1 f v \, dx$
- Použité radiální bázové funkce:
  - $\text{Wendland}_{3,2}$, Multikvadrika, Gauss
- Stabilita výpočtu:
  - Nutné vhodně zvolit šířku radiální bázové funkce

OKRAJOVÉ ÚLOHY

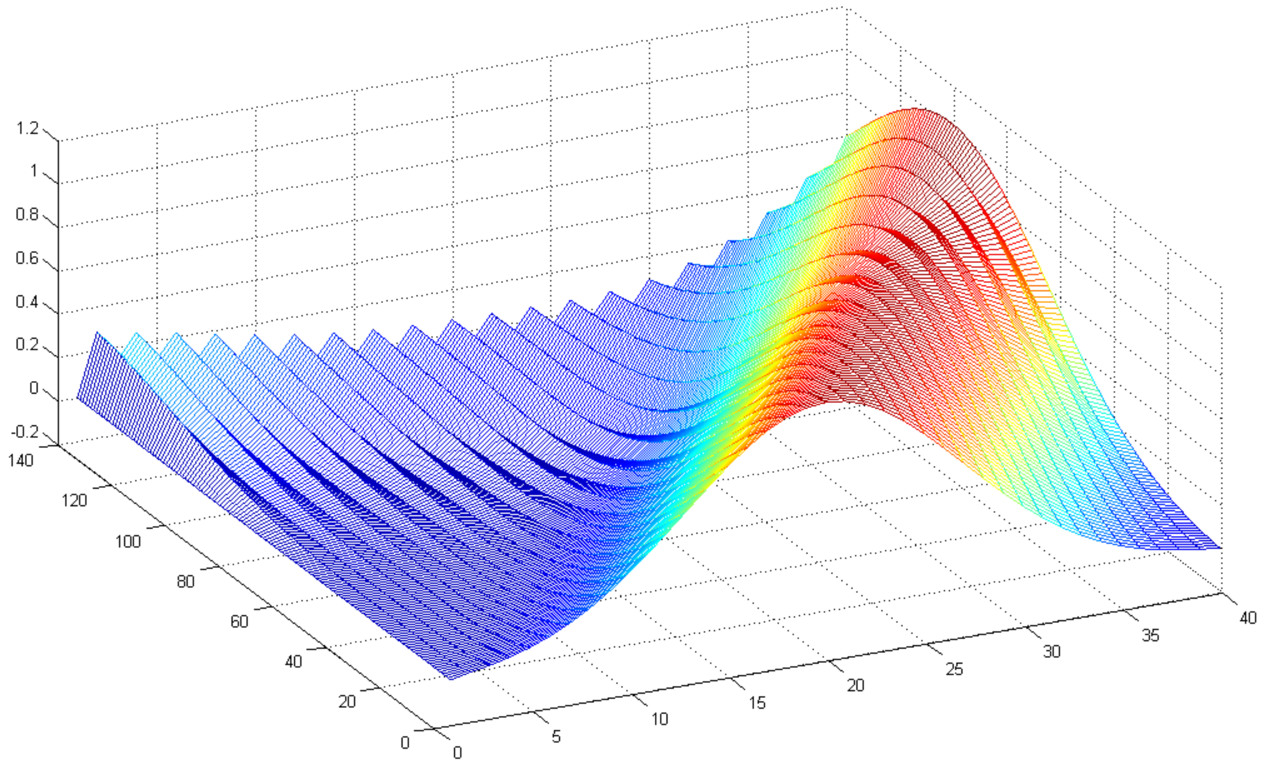
- Předpokládejme úlohu:
  - $Lu(x) = f(x); \quad x \in [a, b]; \quad u(a) = \alpha; \quad u(b) = \beta$
  - Kde L je lineární operátor.
  - Tedy např.: $au_x + bu_y - d(u_{xx} + u_{yy}) = f$
- Při použití RBF tedy lze přepsat:
  - $Ly = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i L\Phi(r_i);$ + okrajové podmínky.
- Tento postup se obecně nazývá „*Kansa's collocation method*".
- Pro představu:
- $a \sum \lambda_i \Phi'_x(r_i) + b \sum \lambda_i \Phi'_y(r_i) - d\left(\sum \lambda_i \Phi''_{xx}(r_i) + \sum \lambda_i \Phi''_{yy}(r_i)\right) = f$

T-VARIAČNÍ ÚLOHY – PŘÍSTUP I

- Zadání úlohy $bu_t + au_x = f$
- Pro každý časový okamžik t_i je řešena separátní okrajová úloha.
  - $u_{t+1} = u_t + \frac{\Delta \mathrm{t}}{b} \cdot (au_x - f)$
  - Zadané počáteční a okrajové podmínky.
- Po aplikaci RBF:
  - $u_{t+1} = \sum \lambda_i \Phi(r_i) + \frac{\Delta \mathrm{t}}{b} \cdot (a \sum \lambda_i \Phi_x'(r_i) - f)$
- Po úpravě:
  - $u_{t+1} = \sum \lambda_i \left(\Phi(r_i) + \frac{\Delta \mathrm{t}}{b} \cdot (a\Phi_x'(r_i) - f) \right)$

T-VARIAČNÍ ÚLOHY – PŘÍSTUP I

- Bez stabilizace je zřetelně vidět chyba:



T-VARIAČNÍ ÚLOHY – PŘÍSTUP 2

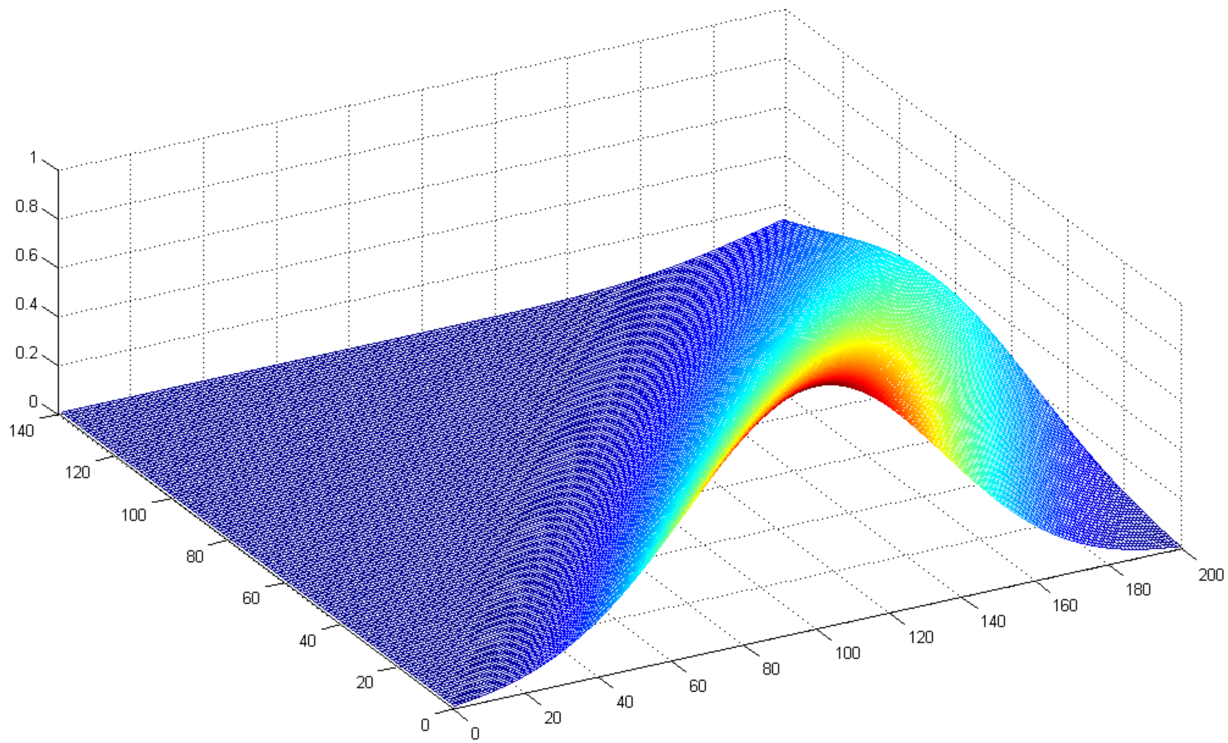
- Zadání úlohy $bu_t + au_x = f$
- Řešení je prakticky stejné jako u kolokace:
  - $b\sum \lambda_i \Phi_t'(r_i) + a\sum \lambda_i \Phi_x'(r_i) = f$
- Čas se v RBF projeví pouze v normě:
  - $\Phi(r);\;\; r(\boldsymbol{x}, t) = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \;\ldots + (c \cdot t)^2}$
- Úloha je tedy prakticky „degradována“ na okrajovou úlohu o vyšší dimenzi.
- $\sum \lambda_i \left(b \cdot \Phi_t'(r_i) + a \cdot \Phi_x'(r_i)\right) = f$

T-VARIAČNÍ ÚLOHY – STABILIZACE

- Stabilitu řešení lze zlepšit následujícími přístupy:
- Vhodná volba parametru ϵ pro RBF
  - Tj. zlepšit podmíněnost soustavy.
  - Zároveň se však zhorší citlivost bázové funkce → vyhlazení detailů.
- Přidání difuzního členu:
  - $bu_t + au_x - du_{xx} = f$
  - $u_{t+1} = \sum \lambda_i \left(\Phi(r_i) + \frac{\Delta t}{b} \cdot (a\Phi'_x(r_i) - d\Phi''_{xx}(r_i) - f) \right)$

VÝSLEDKY PO STABILIZACI

- Po přidání difuzního členu do stejné úlohy jako u přístupu 1 dosáhneme:



ZÁVĚR

- Nastudovali jsme metody řešení PDR:
  - Na pravidelné síti
  - Pomocí radiálních bázových funkcí
- Při použití RBF je nutné vhodně zvolit parametr ϵ – šířku báze.
- Nestabilní úlohu prvního řádu lze stabilizovat přidáním difuzního členu.
- Časově proměnné úlohy lze řešit jako stacionární (vyšší dimenze).

LITERATURA

- [Fasshauer 2009] FASSHAUER, Gregory E. *Meshfree approximation methods with MATLAB*. Singapore: World Scientific, c2009, xviii, 500 s. Chapman. ISBN 978-981-270-633-1.
- [Kansa 1990] Kansa, E. J., "Multiquadrics - A scattered data approximation scheme with applications to computational fluid-dynamics - II solutions to parabolic, hyperbolic and elliptic partial differential equations," Computers & Mathematics with Applications, vol. 19, pp. 147–161, 1990.