Elliptikus PDE-k véges differenciás numerikus megoldása 3D tartományokon

Andó-Kinorányi Dóra

Témavezető: Karátson János

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés

Az önálló projekt során 3D-s elliptikus modellfeladatok véges differenciás kódolásával foglalkoztam. A legegyszerűbb példa elliptikus parciális differenciálegyenletekre a Poisson-egyenlet, melyhez megadható a peremre vonatkozó feltétel is. Dirichlet-peremfeltételnek nevezzük, ha ismerjük a tartomány peremén a megoldás értékeit. Az ilyen típusú feladatok általános alakja a következő:

$$\begin{cases} -\Delta u = f \\ u\big|_{\partial\Omega} = g, \end{cases}$$

ahol $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ egy korlátos tartomány, és $\partial\Omega$ szakaszonként sima határ.

Bizonyos áramlásokat és erőtereket gyakran tudunk modellezni egy $W \in C^1(\Omega, \mathbb{R}^n)$ vektortér segítségével. Erre a W vektortérre két fizikai törvény is vonatkozik. A $\mathrm{div} W = f$ egyenlet a *megmaradási törvényt* írja le. Eszerint a W mező által szállított anyag vagy megmarad (ha $f \equiv 0$), vagy a forrás/nyelő f függvényében változik. A W-re vonatkozó *Fick-törvény* szerint a W mező arányos egy megfelelő $u \in C^1(\Omega)$ mező gradiensével. Az u függvényt potenciálnak nevezzük. A törvény $W = -p\nabla u$ alakban is felírható, ahol $p > 0$ konstans. A fenti szabályok a $-\mathrm{div}(p\nabla u) = f$ elliptikus egyenletre vezetnek, ami $p \equiv 1$ esetén megegyezik az $-\Delta u = f$ elliptikus egyenlettel. Az u potenciál és a W erőtér vizsgálata is hasznos lehet. [1]

A véges differenciás módszer szerint a megoldás közelítéséhez az értelmezési tartományon felveszünk egy rácsot, melynek lépésközeit h_1, h_2, h_3-mal jelöljük, és azt szeretnénk, ha a rács finomításával a rácspontokban a becsült érték egyre jobban közelítené a pontos megoldást. [1] Az egyszerűség kedvéért feltesszük, hogy a továbbiakban ekvidisztáns felosztással dolgozunk, vagyis $h_1 = h_2 = h_3 =: h$. A rács paraméterének nevezzük h-t. A tartomány belső pontjaiban a diszkrét Laplace-operátor közelítéséhez mindhárom irányban szimmetrikus módszert alkalmazunk, így kapjuk az alábbi közelítést:

$$-\Delta u(ih, jh, kh) \approx \frac{-u_{i+1,j,k} - u_{i-1,j,k} - u_{i,j+1,k} - u_{i,j-1,k} - u_{i,j,k+1} - u_{i,j,k-1} + 6u_i, j, k}{h^2} \tag{1}$$

2. Egységkocka

2.1. A megoldás közelítése

Az első vizsgált tartományunk az $\Omega = [0,1] \times [0,1] \times [0,1]$ egységkocka. Ezen oldjuk meg a

$$\begin{cases} -\Delta u = f, \qquad \Omega = [0,1] \times [0,1] \times [0,1] \\ u\big|_{\partial\Omega} = 0, \\ f(x,y,z) = 3\pi^2 \sin(\pi x)\sin(\pi y)\sin(\pi z) \end{cases} \tag{2}$$

feladatot. Ennek a feladatnak könnyen kiszámolható a pontos megoldása, így a közelítésből származó hibát is meg tudjuk majd kapni. A pontos megoldás $u(x,y,z) = \sin(\pi x)\sin(\pi y)\sin(\pi z)$.

A 1. fejezetben leírtaknak megfelelően alkalmazunk egy h lépésközű ekvidisztáns rácsot Ω-n, N jelöli a belső rácspontok számát. A kapott rács pontjait lexikografikusan egy darab N^3 hosszú vektorba rendezzük úgy, hogy először az x-tengely, majd az y-tengely, végül pedig a z-tengely mentén növeljük az indexeket. Ezzel a rendezéssel a rácspontokbeli közelített értékeket egy $u_h \in \mathbb{R}^3$ vektorban tudjuk eltárolni. Hasonlóképpen igaz ez az f rácspontokbeli értékére is, ezt f_h-val jelöljük. Az 1-es képlet alkalmazásával felírható egy A_h együtthatómátrixú lineáris algebrai egyenletrendszer, melynek jobb oldalán az f értékei szerepelnek az egyes rácspontokban. Ehhez jelölje I_N az $N \times N$-es identitásmátrixot, továbbá bevezetjük az alábbi jelöléseket.

$$E := \begin{pmatrix} 6 & -1 & & & \\ -1 & 6 & -1 & & \\ & -1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 6 & -1 \\ & & & -1 & 6 \end{pmatrix} = \mathrm{tridiag}(-1, 6, -1) \in \mathbb{R}^{N \times N}, \quad \tilde{B} := \left(\begin{array}{c|c|c|c} E & -I_N & & \\ \hline -I_N & \ddots & \ddots & \\ \hline & \ddots & E & -I_N \\ \hline & & -I_N & E \end{array}\right) \in \mathbb{R}^{N^2 \times N^2}.$$

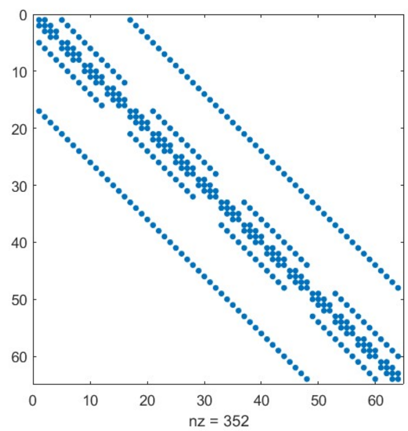
Ezek segítségével felírható az

$$A_h \coloneqq \frac{1}{h^2}\left(\begin{array}{c|c|c|c} \tilde{B} & -I_{N^2} & & \\ \hline -I_{N^2} & \ddots & \ddots & \\ \hline & \ddots & \tilde{B} & -I_{N^2} \\ \hline & & -I_{N^2} & \tilde{B} \end{array}\right) = \frac{1}{h^2}\text{blokktridiag}(-I_{N^2}, \tilde{B}, -I_{N^2}) \in \mathbb{R}^{N^3 \times N^3} \tag{3}$$

együtthatómátrix. Az

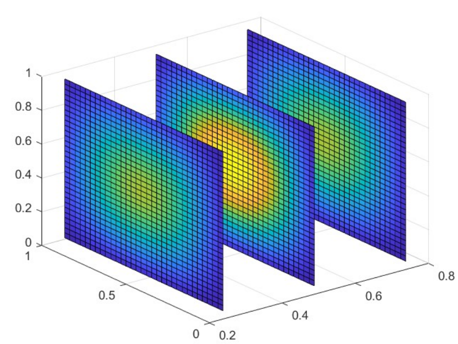
$$A_h u_h = f_h \tag{4}$$

lineáris egyenletrendszer u_h megoldása lesz a közelített érték a rácspontokban. A 1. ábrán az együtthatómátrix struktúrája látható $N = 4$ mellett. [2]

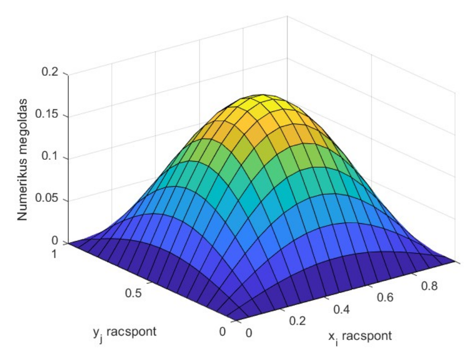


1. ábra. Az együtthatómátrix struktúrája kockán, $N = 4$ mellett.

Az összes megoldás nem ábrázolható térben, azonban valamely változó fixálásával megtekinthetjük tetszőleges "rétegen" a becslésünket. A 2. ábrán az $x = 8h$, $x = 16h$, $x = 24h$ rétegeken ábrázoljuk a becsült megoldást. A 3. ábrán a $z = h$ érték rögzítésével ábrázoltuk a becsült megoldást $N = 8$, illetve $N = 16$ belső rácspont esetén.



2. ábra. Az $N = 32$ melletti becsült értékek az $x = 8h$, $x = 16h$, $x = 24h$ rétegeken.



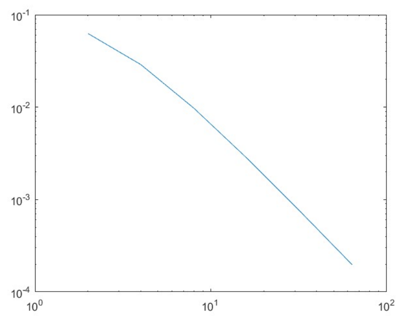
3. ábra. A $z = h$, $N = 16$ melletti becsült értékek.

2.2. A becslési hiba nagysága különböző lépéstávolságok esetén

Az alábbi táblázat a rácspontbeli becsült értékek eltérését tartalmazza a pontos értékektől maximum normában.

Belső rácspontok száma (N)	Hiba nagysága
2	0.0628
4	0.0289
8	0.0098
16	0.0028
32	$7.5303 \cdot 10^{-4}$
64	$1.9452 \cdot 10^{-4}$

Mivel a belső pontokban a szimmetrikus sémával közelítettük a diszkrét Laplace-operátort, ezért másodrendű konvergenciát várunk. A hibák nagyságát érdemes loglog-ábra segítségével is ábrázolni, így szemléltethető a módszer rendje.

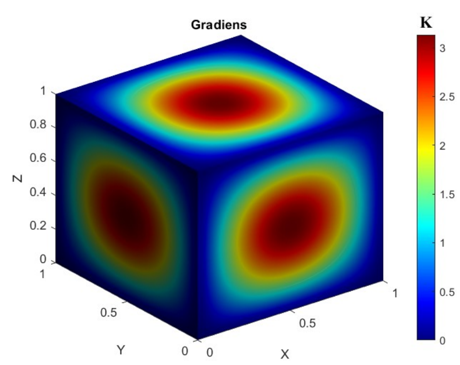


4. ábra. A lépésszám növelésével a hiba másodrendben csökken.

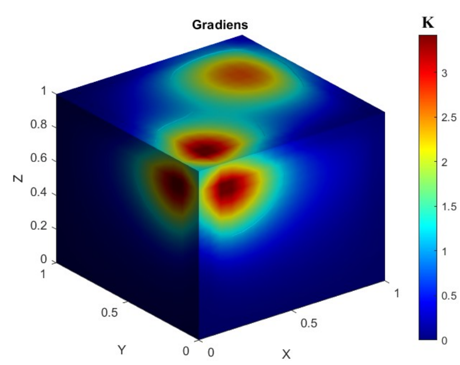
A fenti ábrán a 3. és a 6. pont közötti egyenes körülbelül $\frac{-1{,}7003}{0{,}9031} = -1{,}8827$ meredekségű, ami nagyjából megfelel a másodrendnek.

2.3. A gradiens közelítése

A közelített megoldásból kiszámoltuk a rácspontbeli gradiensvektorok hosszát. A határon lévő pontokban a megoldás nem C^1-beli, így ott a $|\nabla u| \approx |\partial_v u|$ közelítést alkalmaztuk. v olyan vektor, mely egy oldal belső pontjában az oldalra merőleges vektor, egy oldal élén az élre merőleges, átellenes él irányába mutató vektor, a kocka csúcsaiban pedig a kocka középpontjába mutató vektor. Az 5. ábrán a közelített $|\nabla u|$ látható a 2. feladat esetén. A 6. ábrán az $f(x,y,z) = 3e^{-10(x-0).^2-10(y-0).^2-10(z-1).^2} + e^{-10(x-0.8).^2-10(y-0.7).^2-10(z-1).^2}$ feladathoz tartozó közelített $|\nabla u|$ szerepel.



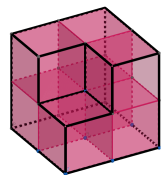
5. ábra. $|\nabla u|$ közelítése a határon a 2. feladat esetén.



6. ábra. A közelített $|\nabla u|$ kettős Gauss-forrás esetén.

3. Hiányos kocka konkáv sarokkal (Fichera corner)

A másik általunk vizsgált tartomány egy olyan 1 élhosszúságú kocka, melynek az egyik sarkából elhagytunk egy $\frac{1}{2}$ élhosszúságú kockát. Ezt szokás *fichera corner*nek nevezni. [3] Ezt a testet szemlélteti a 7. ábra. Ezen a tartományon csak azt az esetet vizsgáltuk, mikor a belső pontok száma páratlan sok.



7. ábra. Hiányos kocka konkáv sarokkal (Fichera corner).

3.1. Az együtthatómátrix struktúrája

Legyen $a \coloneqq sN + (N-s)s$, ahol $s = \lfloor \frac{N}{2} \rfloor$. Az eljárás együtthatómátrixa egy olyan négyzetes blokkmátrix, melynek bal felső négyzetes blokkja egy blokktridiagonális mátrix, N^2 méretű blokkokkal, a főátlóban C blokkokkal, a második átlókban $-I$ blokkokkal. A jobb alsó négyzetes blokk szintén egy blokktridiagonális mátrix a^2 méretű blokkokkal, ennél a főátlóban D mátrixok vannak, a második átlókban $-I$-k. A mátrix többi részeiben csak A_1-ben és A_2-ben vannak nemnulla elemek. Az A_1 egy olyan $a \times N^2$-es mátrix, melyben az utolsó a oszlop által meghatározott részmátrix az $-I \in \mathbb{R}^{s \times s}$, máshol pedig minden elem 0. $A_2 = A_1^T$, azaz az A_2 egy olyan mátrix, melyben az utolsó a sor által meghatározott részmátrix az $-I \in \mathbb{R}^{s \times s}$, máshol pedig minden elem 0. Tehát a mátrixnak összesen $sN^2 + (N-s)a$ oszlopa van. Például $N = 5$ esetén az alábbi struktúrát figyelhetjük meg. A mátrix fölött, illetve mellett az adott blokk mérete szerepel.

$$\begin{array}{cc} & \begin{array}{ccccc} N^2\ (1.) & N^2\ (s.) & a & a & a \end{array} \\ \begin{array}{c} N^2 \\ N^2 \\ a \\ a \\ a \end{array} & \left(\begin{array}{c|c|c|c|c} \mathrm{C} & \text{-I} & & & \\ \hline \text{-I} & \mathrm{C} & A_2 & & \\ \hline & A_1 & D & -I & \\ \hline & & -I & D & -I \\ \hline & & & -I & D \end{array}\right) \end{array} = A$$

C mátrix egy olyan blokktridiagonális mátrix, melynek minden oszlopában N darab $N \times N$-es blokk van. C főátlójában $\tilde{B} = \operatorname{tridiag}(-1, 6, -1) \in \mathbb{R}^{N \times N}$ blokkok szerepelnek, a második átlókban pedig $-I$ mátrixok.

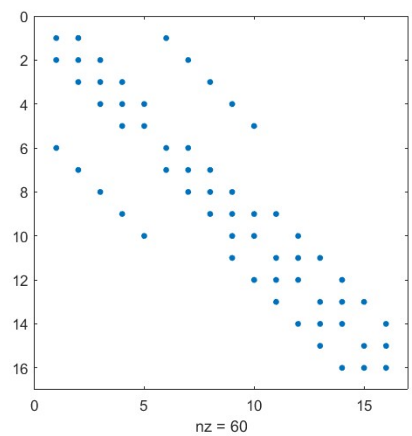
$$C = \left(\begin{array}{c|c|c|c} \tilde{B} & -I & & \\ \hline -I & \tilde{B} & \ddots & \\ \hline & \ddots & \ddots & -I \\ \hline & & -I & \tilde{B} \end{array}\right) \in \mathbb{R}^{N^2 \times N^2}$$

A D mátrix struktúrája megegyezik az A mátrix struktúrájával, azonban a méretek különböznek. A D mátrix bal felső négyzetes blokkjában a blokkok $N \times N$-esek, egy oszlopban s darab van belőlük, és a részmátrix főátlójában lévő blokkokat $\tilde{B}$-vel jelöljük. A jobb alsó négyzetes részmátrixban a blokkok $s \times s$-esek, egy oszlopban $N - s$ van belőlük, és a részmátrix főátlójában lévő blokkokat $\hat{B}$-vel jelöljük. $\tilde{B} = \operatorname{tridiag}(-1, 6, -1) \in \mathbb{R}^{N \times N}$ és $\hat{B} = \operatorname{tridiag}(-1, 6, -1) \in \mathbb{R}^{s \times s}$. Az A_1 és A_2 részeknek megfelelő elemeket hasonlóan írjuk fel, mint A-nál. Tehát D egy $(Ns + (N-s)s) \times (Ns + (N-s)s)$-es mátrix. $N = 5$-nél a következőképpen néz ki D.

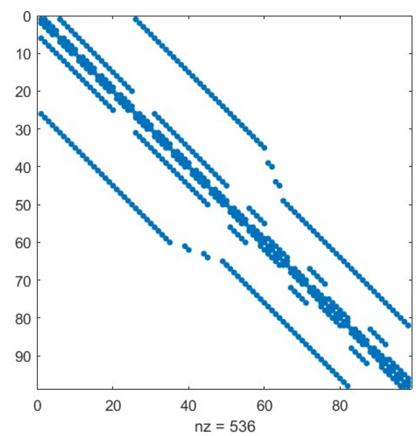
$$
\begin{array}{c|c|c|c|c|c}
 & N\quad(1.) & N\quad(s.) & s & s & s \\
\hline
N & \tilde{B} & \text{-I} & & & \\
\hline
N & \text{-I} & \tilde{B} & A_2' & & \\
\hline
s & & A_1' & \hat{B} & -I & \\
\hline
s & & & -I & \hat{B} & -I \\
\hline
s & & & & -I & \hat{B}
\end{array} = D
$$

3.1. Megjegyzés. Ha síkbeli L-tartományon vizsgáljuk az FDM együtthatómátrixát, a D mátrixot kapjuk, azzal a különbséggel, hogy az 5-pontos differenciacsillagban a középpontbeli elemek helyén 6 helyett 4 szerepel.

A 8. ábrán a D mátrix nemnulla elemeit, a 9. ábrán a módszer együtthatómátrixát láthatjuk $N = 5$ esetén.



8. ábra. A D mátrix struktúrája $N = 5$ mellett.



9. ábra. A módszer együtthatómátrixának struktúrája $N = 5$ mellett.

A módszer együtthatómátrixa $A_h = \frac{1}{h^2}A$. Kevés belső rácspont esetén az alábbi hibákat kapjuk.

Belső rácspontok száma (N)	Hiba nagysága
3	0.2337
5	0.0628
7	0.0530
9	0.0289
11	0.0232
15	0.0130
17	0.0098
19	0.0083
21	0.0066
25	0.0048

Hivatkozások

[1] Karátson János Horváth Róbert Izsák Ferenc. *Parciális differenciálegyenletek numerikus módszerei számítógépes alkalmazásokkal*. URL: https://web.cs.elte.hu/~karatson/pdnm_vegleges_2013.pdf.

[2] MathWorks. *Matlab Documentation*. URL: https://www.mathworks.com/help/matlab/.

[3] Wikipedia. *hp-FEM*. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Hp-FEM#Example:_the_Fichera_problem.