



Practicum 7:

Partiële differentiaalvergelijkingen I:

Basis en eenvoudige expliciete methoden

Contact: jeroen.mulkers@uantwerpen.be U.305

In vorig practicum hebben we enkele problemen behandeld die geformuleerd werden in termen van gewone differentiaal vergelijkingen (ODEs). Echter, in heel wat fysische problemen hebben we te maken met partiële differentiaal vergelijkingen (PDEs), bv. de Schrödinger vergelijking in kwantummechanica, de Maxwell vergelijkingen in elektriciteit en magnetisme en de golfvergelijking in optica.

In de volgende practica zullen we een aantal technieken zien om PDEs numeriek op te lossen. Al deze methoden behoren tot de groep van *finite difference* technieken. Maar laten we beginnen met kort de verschillende types PDEs te bespreken.

1 Inleiding tot PDEs

1.1 Classificatie

Bij het oplossen van ODEs kunnen we gebruik maken van een aantal algemene methoden, zoals Runge-Kutta, die gebruikt kunnen worden voor elk probleem. Dit is niet meer het geval voor PDEs. De klasse waartoe een PDE behoort, geeft een indicatie van het type oplossingsmethode dat gebruikt kan worden.

Er zijn drie PDEs die model staan voor de drie klassen van PDEs. De eerste is de *ééndimensionale diffusie vergelijking*:

$$\frac{\partial}{\partial t}T(x, t) = \kappa \frac{\partial^2}{\partial x^2}T(x, t)$$

Deze vergelijking beschrijft vele diffusie processen. Hier is de variabele $T(x, t)$ bv. de temperatuur op positie x op ogenblik t . De constante κ is de diffusiecoëfficiënt. Deze eerste vergelijking is een voorbeeld van een *parabolische* PDE. De tijdsafhankelijke Schrödingervergelijking is een ander voorbeeld.

De tweede belangrijke PDE is de *ééndimensionale golfvergelijking*

$$\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 A}{\partial x^2}$$

met $A(x, t)$ de golfamplitude en c de golfsnelheid. Deze vergelijking is een voorbeeld van een *hyperbolische* PDE.

De derde PDE is de *Poisson vergelijking* uit de elektrostatica. In twee dimensies wordt ze gegeven door

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = -\frac{1}{\epsilon_0} \rho(x, y)$$

met $\Phi(x, y)$ de elektrostatische potentiaal, $\rho(x, y)$ de ladingsdichtheid, en ϵ_0 de permittiviteit van de lucht. Als $\rho = 0$ wordt dit de *Laplace vergelijking*. De Poisson en de Laplace vergelijking zijn voorbeelden van *elliptische* PDEs.

Het is niet de bedoeling van deze practica om de classificatie van PDEs verder uit te spitten, noch om diep in te gaan op het al dan niet uniek zijn van oplossingen en dergelijke. In plaats daarvan zullen we een aantal concrete voorbeelden bestuderen voor elk van deze drie types vergelijkingen.

1.2 Problemen met beginvoorwaarden

Parabolische en hyperbolische PDEs zoals de diffusie en golfvergelijking worden vaak opgelost met beginvoorwaarden (BVW). Voor de diffusievergelijking kennen we bv. de begintemperatuur $T(x, t = 0)$ en we willen $T(x, t)$ bepalen voor elke $t > 0$. Analooq, voor de golfvergelijking is bv. de beginamplitude $A(x, t = 0)$ en -snelheid $dA(x, t = 0)/dt$ van een puls gekend en men wenst de vorm van de resulterende golf $A(x, t)$ te kennen voor $t > 0$.

Naast BVW moeten we vaak ook rekening houden met randvoorwaarden (RVW). Onze oplossing is bv. beperkt tot het deel van de ruimte tussen $x = -L/2$ en $x = L/2$. RVW worden dan opgelegd aan deze eindpunten. Voor de diffusievergelijking zouden we bv. de temperatuur constant kunnen nemen op de rand:

$$T(x = -L/2, t) = T_a; \quad T(x = L/2, t) = T_b$$

Dit is een voorbeeld van *Dirichlet* RVW. Een alternatief zou kunnen zijn dat de warmteflux gekend is op de rand:

$$-\kappa \left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=-L/2} = F_a; \quad -\kappa \left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=L/2} = F_b$$

Als de randen geïsoleerd zijn dan is $F_a = F_b = 0$. In dit geval spreekt men van *Neumann* RVW. Nog een derde type van RVW komt vaak voor in numerieke

simulaties, nl. men kan de resultaten op beide randen aan mekaar gelijk stellen:

$$T(x = -L/2, t) = T(x = L/2, t)$$

$$\left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=-L/2} = \left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=L/2}$$

Dit zijn *periodische* RVW.

Om dergelijke vergelijkingen numeriek op te lossen splitsen we, net zoals bij ODEs, de tijd op in discrete stappen $t_n = (n - 1)\tau$ (met τ de tijdsstap) en $n = 1, 2, \dots$. Analooog discretiseren we de ruimte als $x_i = (i - 1)h - L/2$, met h de afstand tussen de gridpunten en $i = 1, 2, \dots$. BVW problemen worden vaak opgelost m.b.v. *marching* methoden. Startend van de BVW wordt de oplossing berekend voor de volgende tijdsstap. Met dit resultaat wordt dan het resultaat voor $t = 2\tau$ bepaald, enz.

2 De diffusie vergelijking

2.1 Forward Time Centered Space Scheme (FTCS)

We starten met de numeriek eenvoudigste van de drie PDEs, nl. de diffusie vergelijking:

$$\frac{\partial}{\partial t} T(x, t) = \kappa \frac{\partial^2}{\partial x^2} T(x, t)$$

met $T(x, t)$ de temperatuur op plaats x en tijd t en κ de thermische diffusiecoëfficiënt. Het probleem dat we wensen op te lossen is het volgende: gegeven de BVW $T(x, t = 0) = \delta(x)$ en de Dirichlet RVW

$$T(x = -L/2, t) = T(x = L/2, t) = 0,$$

bepaal $T(x, t)$ voor elke x en t .

Er zijn verschillende manieren om dit probleem analytisch op te lossen, maar wij gaan het numeriek doen. We discretiseren zoals gezegd tijd en ruimte als volgt:

$$T_i^n = T(x_i, t_n)$$

met $x_i = (i - 1)h - L/2$ en $t_n = (n - 1)\tau$. Index i komt dus overeen met een ruimtelijk gridpunt, terwijl index n een tijdsstap aanduidt. Merk op dat $h = L/(N - 1)$.

De afgeleide naar de tijd wordt, gebruik makend van de voorwaartse verschil benadering:

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} \Rightarrow \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\tau}$$

De afgeleide naar de plaats wordt, gebruik makende van de centraal verschil benadering:

$$\frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} \Rightarrow \frac{T_{i+1}^n + T_{i-1}^n - 2T_i^n}{h^2}$$

De manier waarop we de afgeleiden gediscrètiseerd hebben geeft de naam aan deze methode: *forward time centered space scheme* (FTCS).

Hiermee wordt de gediscrètiseerde diffusie vergelijking

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\tau} = \kappa \frac{T_{i+1}^n + T_{i-1}^n - 2T_i^n}{h^2}$$

Dit levert volgend schema om de temperatuur op tijdstip $n + 1$ te bepalen:

$$T_i^{n+1} = T_i^n + \frac{\kappa\tau}{h^2}(T_{i+1}^n + T_{i-1}^n - 2T_i^n)$$

Alles dat afhangt van tijdsstap n staat in het rechterlid, terwijl de toekomstige waarde van de temperatuur in het linkerlid staat. Daarom noemt men het FTCS schema een *expliciete* methode.

2.2 Het FTCS programma

Het programma `dftcs.m` lost deze diffusie vergelijking op m.b.v. het FTCS schema. Het algoritme gaat als volgt:

- Initialiseer de parameters (τ, h, \dots) .
- Geef BVW en RVW.
- Bepaal de variabelen voor loop en plot.
- Loop over gewenst aantal tijdstappen.
 - Bereken nieuwe temperatuur m.b.v. FTCS schema.
 - Schrijf regelmatig de temperatuur uit voor de plot.
- Plot temperatuur als functie van x en t als **wire-mesh** en **contour** plots.

De RVW kunnen vertaald worden als

$$T_1^n = T_N^n = 0$$

voor alle n . De BVW $T(x, 0) = \delta(x)$ kunnen we moeilijk in het programma gebruiken. Om zo goed mogelijk een delta functie numeriek te benaderen, gebruiken we

$$\Delta(x) = \begin{cases} (x+h)/h^2 & \text{voor } -h < x < 0 \\ (h-x)/h^2 & \text{voor } 0 \leq x < h \\ 0 & \text{anders} \end{cases}$$

Hiervoor geldt

$$\lim_{h \rightarrow 0} \Delta(x) = \delta(x)$$

Discretisatie levert

$$\Delta_i = \begin{cases} 1/h & \text{voor } i = N/2 \\ 0 & \text{anders} \end{cases}$$

Voordat we het programma runnen is het nuttig om een idee te hebben over hoe de tijdsstap te kiezen. Daarvoor is het nuttig om op te merken dat een Gaussische van de vorm

$$T_G(x, t) = \frac{1}{\sigma(t)\sqrt{2\pi}} \exp \left[\frac{-(x - x_0)^2}{2\sigma^2(t)} \right]$$

voldoet aan de algemene diffusie vergelijking als de standaard deviatie toeneemt in de tijd als

$$\sigma(t) = \sqrt{2\kappa t}.$$

Noem t_σ de tijd dat het duurt dat de breedte σ toeneemt van 0 tot h (i.e. één gridstap), dus

$$t_\sigma = \frac{h^2}{2\kappa}.$$

Intuïtie zegt ons dat we waarschijnlijk beter geen tijdsstap kiezen die veel groter is dan t_σ .

2.3 Opgave

Bestudeer het programma `dftcs.m`. Bekijk hoe het FTCS schema geïmplementeerd is. Probeer ook te achterhalen wat de RVW en de BVW zijn en hoe deze geïmplementeerd worden.

1. Run het programma voor $N = 61$, $\kappa = 1$ en een aantal waarden van τ tussen 10^{-3} en 10^{-5} . Voor $\tau = 10^{-4}$, test ook voor verschillende N . Wat observeer je? Breng dit in verband met t_σ . Bekijk ook eens het resultaat met BVW $T(x, 0) = \delta(x - L/4)$.
2. Pas `dftcs.m` aan waarbij je de Neumann RVW

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=-L/2} = \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=L/2} = 0$$

implementeert. Bekijk het resultaat voor BVW $T(x, 0) = \delta(x)$. Bekijk ook het resultaat voor BVW $T(x, 0) = \delta(x - L/4)$.

3. Het DuFort-Frankel schema (centraal-verschil benadering voor beide afgeleides) om de diffusie vergelijking op te lossen gebruikt volgende discretisatie:

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^{n-1}}{2\tau} = \kappa \frac{T_{i+1}^n + T_{i-1}^n - (T_i^{n+1} + T_i^{n-1})}{h^2}$$

Merk op dat dit schema niet zelf-startend is. Schrijf een programma dat dit schema implementeert. Gebruik het FCTS schema voor de eerste tijdsstap. Probeer een aantal waarden voor τ . Is dit algoritme stabiel? Is dit algoritme nauwkeurig?