



Practicum 9: Partiële differentiaalvergelijkingen III: Basis en eenvoudige expliciete methoden.

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

Na parabolische en hyperbolische PDEs opgelost te hebben beschouwen we in dit practicum de elliptische PDE. Voor deze soort PDE moeten we een RVW probleem oplossen, en de oplossing is een statisch veld, zoals een elektrisch veld dat voldoet aan de Laplace vergelijking.

1 Problemen met RVW

Elliptische vergelijkingen, zoals de Poisson en Laplace vergelijking, zijn geen BVW problemen maar RVW problemen. Bijvoorbeeld: stel dat de potentiaal op de rand van een rechthoek gegeven wordt door

$$\Phi(x = 0, y) = \Phi_1; \quad \Phi(x = L_x, y) = \Phi_2;$$

$$\Phi(x, y = 0) = \Phi_3; \quad \Phi(x, y = L_y) = \Phi_4;$$

en er wordt gevraagd de potentiaal te berekenen in alle punten binnen de rechthoek. Nu discretiseren we de ruimte als $x_i = (i - 1)h_x$, $y_j = (j - 1)h_y$ met h_x en h_y de gridstappen zijn in x en y richting.

Algoritmes om dergelijke RVW problemen op te lossen noemt men vaak *jury* methoden. De potentiaal in een punt wordt beïnvloed door alle punten op de rand.

2 Relaxatie methoden

Ons modelprobleem voor een elliptische PDE is de Laplace vergelijking. In 2 dimensies wordt ze gegeven door

$$\frac{\partial^2 \Phi(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi(x, y)}{\partial y^2} = 0$$

met $\Phi(x, y)$ de elektrostatische potentiaal. We gaan deze PDE oplossen in een rechthoekig domein met randen $x = 0, x = L_x, y = 0$ en $y = L_y$. Als RVW kiezen we

$$\begin{aligned}\Phi(x = 0, y) &= \Phi(x = L_x, y) = \Phi(x, y = 0) = 0 \\ \Phi(x, y = L_y) &= \Phi_0\end{aligned}$$

met Φ_0 constant.

Met behulp van de methode van scheiding van veranderlijken kan dit probleem exact opgelost worden:

$$\Phi(x, y) = \Phi_0 \sum_{n=1,3,5,\dots}^{\infty} \frac{4}{\pi n} \sin\left(\frac{n\pi x}{L_x}\right) \frac{\sinh(n\pi y/L_x)}{\sinh(n\pi L_y/L_x)}$$

2.1 Jacobi methode

Om de Laplace vergelijking numeriek op te lossen is het nuttig om eerst eens terug te kijken naar de diffusievergelijking:

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

met κ de diffusiecoëfficiënt en $T(x, y, t)$ de temperatuur op ogenblik t in (x, y) . We weten dat, gegeven een begintemperatuursprofiel en RVW, de oplossing zal relaxeren naar een stationaire toestand $T_s(x, y)$. Dus $\lim_{t \rightarrow \infty} T(x, y, t) = T_s(x, y)$. In de stationaire toestand geldt $\partial T_s / \partial t = 0$. De stationaire toestand voldoet daarom aan de PDE

$$\frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_s}{\partial y^2} = 0$$

wat niets anders is dan de Laplace vergelijking.

Het idee is nu dat de oplossing van de Laplace vergelijking gegeven wordt door de oplossing van de diffusievergelijking in de limiet $t \rightarrow \infty$. Dergelijke algoritmes noemt men *relaxatie methoden*. Het FTCS schema om de tweedimensionale diffusievergelijking op te lossen wordt gegeven door

$$\begin{aligned}\Phi_{i,j}^{n+1} &= \Phi_{i,j}^n + \frac{\kappa\tau}{h_x^2} \{ \Phi_{i+1,j}^n + \Phi_{i-1,j}^n - 2\Phi_{i,j}^n \} \\ &\quad + \frac{\kappa\tau}{h_y^2} \{ \Phi_{i,j+1}^n + \Phi_{i,j-1}^n - 2\Phi_{i,j}^n \}\end{aligned}$$

met $\Phi_{i,j}^n \equiv \Phi(x_i, y_j, t_n)$, $x_i \equiv (i-1)h_x$, $y_j \equiv (j-1)h_y$ en $t_n \equiv (n-1)\tau$. Uiteraard hangt de potentiaal niet echt van de tijd af. We introduceren enkel een artificiële tijdsafhankelijkheid zodat de oplossing van de diffusievergelijking convergeert naar de oplossing van de Laplace vergelijking. Men kan tonen dat het FTCS schema stabiel is als

$$\frac{\kappa\tau}{h_x^2} + \frac{\kappa\tau}{h_y^2} \leq \frac{1}{2}$$

Als $h_x = h_y = h$ genomen wordt, vereenvoudigt dit tot $\kappa\tau/h^2 \leq 1/4$.

Omdat we enkel geïnteresseerd zijn in de stationaire toestand ($n \rightarrow \infty$) wensen we de grootst mogelijke tijdstap te gebruiken. Voor $\kappa\tau/h^2 = 1/4$ wordt het FTCS schema

$$\Phi_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{4} \{ \Phi_{i+1,j}^n + \Phi_{i-1,j}^n + \Phi_{i,j+1}^n + \Phi_{i,j-1}^n \}$$

Deze methode wordt de *Jacobi methode* genoemd. Deze methode vervangt de waarde in een punt gewoon door het gemiddelde van zijn vier naaste naburen.

2.2 Gauss-Seidel methode en overrelaxatie

Net zoals bij de relaxatiemethoden die we behandeld hebben bij het oplossen van stelsels, kunnen we in de methode van Jacobi de nieuw berekende waarden voor Φ gebruiken zodra ze beschikbaar zijn, bv.

$$\Phi_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{4} \{ \Phi_{i+1,j}^n + \Phi_{i-1,j}^{n+1} + \Phi_{i,j+1}^n + \Phi_{i,j-1}^{n+1} \}$$

Deze methode noemt men de *Gauss-Seidel methode*. Deze methode heeft als voordeel dat nu niet gelijktijdig Φ^n en Φ^{n+1} in het geheugen opgeslagen moeten worden.

Vorige methoden convergeren echter relatief traag, het kan gelukkig ook sneller. We kunnen bij elke iteratie de waarde voor Φ ‘overcorrigeren’:

$$\Phi_{i,j}^{n+1} = (1 - \omega)\Phi_{i,j}^n + \frac{\omega}{4} \{ \Phi_{i+1,j}^n + \Phi_{i-1,j}^{n+1} + \Phi_{i,j+1}^n + \Phi_{i,j-1}^{n+1} \}$$

met ω de overrelaxatie parameter. Dit noemt men *overrelaxatie*.

De truc is nu om ω zo goed mogelijk te kiezen. Voor $\omega = 1$ reduceert dit schema tot de methode van Gauss-Seidel. Voor $\omega < 1$ hebben we onderrelaxatie, en de convergentiesnelheid wordt kleiner. Voor $\omega > 2$ is de overrelaxatie methode niet stabiel. Er is een ideale waarde tussen 1 en 2 die de beste versnelling oplevert. Voor sommige geometrieën is deze optimale waarde gekend. Bijvoorbeeld, voor een $N_x \times N_y$ rechthoekige grid is

$$\omega_{\text{opt}} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - r^2}}$$

met

$$r = \frac{1}{2} \left(\cos \frac{\pi}{N_x} + \cos \frac{\pi}{N_y} \right)$$

Als $N_x = N_y = N$ reduceert dit tot

$$\omega_{\text{opt}} = \frac{2}{1 + \sin(\pi/N)}$$

Voor $N = 100$ geeft dit $\omega_{\text{opt}} \approx 1.939$. Voor moeilijkere geometrieën wordt de waarde voor ω bepaald door ‘trial and error’. Vaak wordt de waarde voor ω ook automatisch aangepast naargelang de oplossing gewenst convergeert of niet.

2.3 De Poisson vergelijking

De hierboven opgestelde methode is eenvoudig uit te breiden om ook de Poisson vergelijking op te lossen. De Poisson vergelijking in twee dimensies wordt gegeven door

$$\frac{\partial^2 \Phi(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi(x, y)}{\partial y^2} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \rho(x, y)$$

met $\rho(x, y)$ de ladingsdichtheid. Als voorbeeld wordt het Jacobi relaxatieschema voor de Poisson vergelijking

$$\Phi_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{4} \left\{ \Phi_{i+1,j}^n + \Phi_{i-1,j}^n + \Phi_{i,j+1}^n + \Phi_{i,j-1}^n + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} h^2 \rho_{i,j} \right\}$$

waarbij $h_x = h_y = h$ genomen werd.

2.4 Het programma

Het programma `relax.m` implementeert de Jacobi, Gauss-Seidel en overrelaxatie methoden om de Laplace vergelijking op te lossen. Het algoritme gaat als volgt:

- Initialiseer de parameters h, L, \dots
- Kies de overrelaxatie parameter ω (enkel voor de overrelaxatie methode)
- Kies een start-potentiaal.
- Loop totdat de gewenste verandering per iteratie bereikt is.
 - Bereken een nieuwe waarde voor Φ .
 - Controleer of het verschil $[\sum_{i,j} |(\Phi_{i,j}^{n+1} - \Phi_{i,j}^n)/\Phi_{i,j}^{n+1}|]/N^2$ klein genoeg is.
- Plot $\Phi(x, y)$ als contour en mesh plot.
- Plot voor iedere iteratie het verschil met vorige iteratie.

2.5 Opgave

1. Bestudeer het programma `relax.m` en run het voor de drie verschillende methoden. Het programma start met een goede startkeuze voor de potentiaal (de eerste term van de analytische oplossing). Om het belang hiervan aan te tonen, neem eens als BVW $\Phi = 0$ voor de interne punten. Test opnieuw met de drie methoden.
2. Bekijk nu `relax_hall.m`, dit lost ook de Laplace vergelijking op, maar met als geometrie een Hall-kruis en met RVW zoals getoond in figuur 1. Om een specifieke geometrie te implementeren wordt vaak gebruik gemaakt van een geometrie-grid, dit is simpelweg een matrix met daarin 0 of 1 als elementen naargelang het bijhorende punt al dan niet binnen de beschouwde geometrie ligt. Dit laat toe om eenvoudig de beschouwde geometrie te wijzigen. Ga gelijkaardig te werk om de Laplace vergelijking op te lossen voor een schijf begrensd door 2 concentrische cirkels met straal $r = 0.4$ en $r = 0.1$. Neem als RVW: $\Phi = 0$ voor $r = 0.1$ en $\Phi = 1$ voor $r = 0.4$

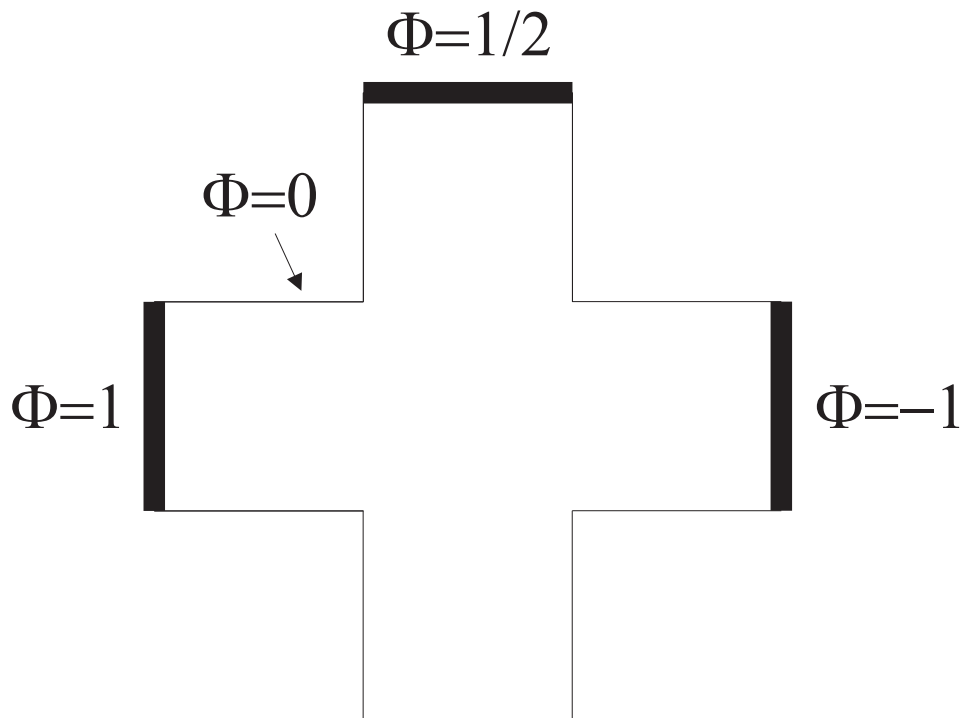


Figure 1: Geometrie en RVW voor het Hall-kruis