Soluzione numerica delle equazioni alle derivate parziali (PDE) (II)

Laboratorio di Metodi Computazionali e statistici (2022/23)

Fabrizio Parodi

Dipartimento di Fisica

October 19, 2022

Criterio di stabilità di Von Neumann

Nella soluzione numerica delle equazioni alle derivate parziali è importante assicurarsi che la soluzione non diverga (a seguito dell'evoluzione temporale)

- Una qualsiasi soluzione può, a tempo fissato, essere sviluppata secondo Fourier:

$$T(m, n) = \sum_i \alpha(k_i) e^{ik_i m\Delta x}$$

- Inolte, poiché le equazioni sono lineari, si ha, nel tempo:

$$T(m, n+1) = \xi T(m, n)$$

  quindi, partendo da n=1, il fattore di amplificazione sarà, ξ^n. Lo sviluppo precedente si può quindi scrivere:

$$T(m, n) = \sum_i \xi^n(k_i) e^{ik_i m\Delta x}$$

- Criterio di Von Neumann: per verificare che la soluzione sia stabile basta verificare che lo sia una base generica con k qualsiasi

$$T^{test}(m, n) = \xi(k)^n e^{ikm\Delta x}$$

  imponendo che $\xi(k)^n$ non diverga cioè che $|\xi(k)| < 1$.

- Si noti che questo è sempre vero per la soluzione analitica. La soluzione numerica, pur avendo la stessa forma, può deviare e divergere, per problemi di approssimazione numerica, in funzione dei campionamenti Δx o Δt scelti.

Criterio di stabilità di Von Neumann

- Applicazione al metodo esplicito per l'equazione del calore:

$$T(m, n+1) = T(m, n) + \eta\left[T(m+1, n) + T(m-1, n) - 2T(m, n)\right]$$

$$\xi^{n+1} e^{ikm\Delta x} = \xi^n e^{ikm\Delta x} + \eta\left[\xi^n e^{ik(m+1)\Delta x} + \xi^n e^{ik(m-1)\Delta x} - 2\xi^n e^{ikm\Delta x}\right]$$

  da cui

$$\xi = 1 + 2\eta[cos(k\Delta x) - 1]$$

  la richiesta $|\xi| < 1$ dà:

$$\eta = \frac{\kappa\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2}$$

- Cosa ci dice ? Δt piccolo ok ma Δx piccolo solo se contemporaneamente Δt "quadraticamente" piccolo.

Metodo di Crank-Nicolson

- riscrivo la discretizzazione per $(x, t + \Delta t/2)$ ricalcolando la derivata temporale (come rapp. incrementale centrato) e ricalcolando la derivata seconda spaziale come media di quella in t ed in $t + \Delta t$

$$\frac{\partial T}{\partial t}\left(x, t + \frac{\Delta t}{2}\right) \simeq \frac{T(x, t+\Delta t) - T(x,t)}{\Delta t}$$

$$\begin{aligned} 2(\Delta x)^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\left(x, t + \frac{\Delta t}{2}\right) \\ \simeq [T(x-\Delta x, t+\Delta t) - 2T(x, t+\Delta t) + T(x+\Delta x, t+\Delta t)] \\ + [T(x-\Delta x, t) - 2T(x,t) + T(x+\Delta x, t)] + \mathcal{O}(\Delta x^2) \end{aligned}$$

- Si ottiene

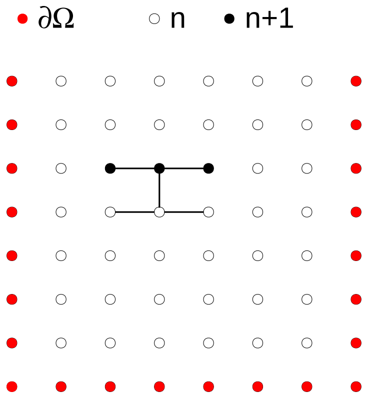
$$\begin{aligned} T(m, n+1) - T(m,n) = \\ \frac{\eta}{2}[T(m-1, n+1) - 2T(m, n+1) + T(m+1, n+1) \\ + T(m-1, n) - 2T(m,n) + T(m+1, n)] \end{aligned}$$

e raccogliendo termini con stessa temperatura

$$-T_{m-1,n+1} + \left(\frac{2}{\eta} + 2\right) T_{m,n+1} - T_{m+1,n+1} = T_{m-1,n} + \left(\frac{2}{\eta} - 2\right) T_{m,n} + T_{m+1,n}$$

Schema di soluzione

Cranck-Nicholson



$$-T_{m-1,n+1}+\left(\frac{2}{\eta}+2\right)T_{m,n+1}-T_{m+1,n+1}=T_{m-1,n}+\left(\frac{2}{\eta}-2\right)T_{m,n}+T_{m+1,n}$$

Metodo di Crank-Nicolson

- Non solo il metodo di Crank-Nicolson è più preciso ma si verifica che è stabile per ogni valore di Δt e Δx.

$$\xi^n(\xi-1)e^{ikm\Delta x} = \frac{\eta}{2}\xi^n e^{ikm\Delta x}\left[\xi\left(e^{-ik\Delta x}+e^{+ik\Delta x}-2\right)+\left(e^{-ik\Delta x}+e^{+ik\Delta x}-2\right)\right]$$

$$(\xi-1) = \frac{\eta}{2}\left[\xi\left(2\cos(k\Delta x)-2\right)+\left(2\cos(k\Delta x)-2\right)\right]$$

$$\xi\left(1+\eta(1-cos(k\Delta x))\right) = 1-\eta(1-cos(k\Delta x))$$

$$\xi = \frac{1-\eta(1-cos(k\Delta x))}{1+\eta(1-cos(k\Delta x))}$$

$$\xi = \frac{1-\alpha}{1+\alpha}$$

con $\alpha > 0 \longrightarrow |\xi| < 1$ sempre.

Metodo di Crank-Nicolson

- Metodo implicito (termini nel futuro)
- Cosa conosciamo ?
  - $T_{m,1}$ (funzioni all'istante iniziale)
  - $T_{1,n}$ e $T_{N,n}$ (condizioni al contorno)
- Equazione matriciale

$$
\begin{bmatrix}
\left(\frac{2}{\eta}+2\right) & -1 & 0 & 0 & \dots \\
-1 & \left(\frac{2}{\eta}+2\right) & -1 & 0 & \dots \\
0 & -1 & \left(\frac{2}{\eta}+2\right) & -1 & \dots \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
T_{2,n+1} \\ T_{3,n+1} \\ T_{4,n+1} \\ \dots \\ \dots \\ T_{N-1,n}
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
T_{1,n+1} + T_{1,n} + \left(\frac{2}{\eta}-2\right) T_{2,n} + T_{3,n} \\
T_{2,n} + \left(\frac{2}{\eta}-2\right) T_{3,n} + T_{4,n} \\
T_{3,n} + \left(\frac{2}{\eta}-2\right) T_{4,n} + T_{5,n} \\
\dots \\
\dots \\
T_{N,n+1} + T_{N,n} + \left(\frac{2}{\eta}-2\right) T_{N-1,n} + T_{N-2,n}
\end{bmatrix}
$$

- Partiamo con $T_{i,n=0}$ risolviamo l'equazione matriciale per trovare $T_{i,n=1}$. E così via.. È possibile perchè nel membro di destra gli unici termini a $n+1$ sono agli estremi e sono quindi determinati dalle condizioni al contorno.

Metodo di Crank-Nicolson

- La soluzione dell'equazione matriciale (tridiagonale) può essere affrontata con metodi ad hoc (più efficienti).
- Manipoliamo la matrice fino a farla diventare triangolare superiore.
- Matrice tri-diagonale

$$\begin{pmatrix} d_1 & c_1 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ a_2 & d_2 & c_2 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & a_3 & d_3 & c_3 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{N-1} & d_{N-1} & c_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & a_N & d_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \ddots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \ddots \\ b_{N-1} \\ b_N \end{pmatrix}$$

Metodo di Crank-Nicolson

- Divido la prima riga per d_1, quindi sottraggo a_2 volte la prima equazione

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{c_1}{d_1} & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & d_2 - \frac{a_2 c_1}{d_1} & c_2 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & a_3 & d_3 & c_3 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{N-1} & d_{N-1} & c_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & a_N & d_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \ddots \\ . \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{b_1}{d_1} \\ b_2 - \frac{a_2 b_1}{d_1} \\ b_3 \\ \ddots \\ . \\ b_N \end{pmatrix}$$

Metodo di Crank-Nicolson

- Divido la seconda riga per l'elemento diagonale la prima equazione

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{c_1}{d_1} & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \frac{c_2}{d_2 - a_2 \frac{c_1}{a_1}} & 0 & \cdots & & \cdots & 0 \\ 0 & a_3 & d_3 & c_3 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & a_{N-1} & d_{N-1} & c_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & a_N & d_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \ddots \\ . \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{b_1}{d_1} \\ \frac{b_2 - a_2 \frac{b_1}{d_1}}{d_2 - a_2 \frac{c_1}{d_1}} \\ b_3 \\ \ddots \\ . \\ b_N \end{pmatrix}$$

Metodo di Crank-Nicolson

- ...ottenendo alla fine

$$\begin{pmatrix} 1 & h_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & h_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & h_3 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & \ddots & \ddots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \ddots \\ \cdot \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ \ddots \\ \cdot \\ p_N \end{pmatrix}$$

dove

$$h_i = \frac{c_i}{d_i - a_i h_{i-1}} \qquad p_i = \frac{b_i - a_i p_{i-1}}{d_i - a_i h_{i-1}}$$

Risolvendo iterativamente si ottiene

$$x_i = p_i - h_i x_{i+1}$$

Equazione delle onde

L'equazione iperbolica più importante è quella delle onde:

$$u_{tt} = v^2 u_{xx}$$

Poichè l'equazione contiene due derivate seconde è necessario imporre le condizioni iniziali per la funzione e per la derivata prima temporale:

$$u(x,0) = f(x) \qquad u_t(x,0) = g(x)$$

Equazione delle onde

Si parte dalla scrittura della derivata seconda in termine di differenze finite:

$$f'' = \frac{f(x+\Delta x) + f(x-\Delta x) - 2f(x)}{\Delta x^2}$$

Applicata all'equazione delle onde fornisce (detto l'indice spaziale e n quello temporale):

$$\frac{u_{m,n+1} + u_{m,n-1} - 2u_{m,n}}{\Delta t^2} = v^2 \left(\frac{u_{m+1,n} + u_{m+1,n} - 2u_{m,n}}{\Delta x^2} \right)$$

$$u_{m,n+1} = 2u_{m,n} - u_{m,n-1} + v^2 \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} \left(u_{m+1,n} + u_{m+1,n} - 2u_{m,n} \right)$$

$$u_{m,n+1} = 2u_{m,n} - u_{m,n-1} + \frac{v^2}{v'^2} \left(u_{m+1,n} + u_{m+1,n} - 2u_{m,n} \right)$$

La soluzione è condizionatamente stabile. La condizione è:

$$v' > v$$

cioè la "velocità" associata a Δx, Δt deve essere maggiore della velocità fisica.

Equazione delle onde

Problema:

- Per calcolare la funzione all'indice temporale $n+1$ $(t+\Delta t)$ serve non solo n (t) ma anche $n-1$ $(t-\Delta t)$.

Utiliziamo la condizione $u(x,0)=f(x)$ e concentriamoci sul caso particolare $u(x,0)=0$. Esprimendo la condizione come derivata centrata ottengo:

$$u_{m,1}=\frac{u_{m,2}-u_{m,0}}{2\Delta x}=0\longrightarrow u_{m,0}=u_{m,2}$$

Quindi per il l'indice temporale $n=2$ (il successivo al primo)

$$u_{m,2}=2u_{m,1}-u_{m,0}+\frac{v^2}{v'^2}\left(u_{m+1,1}+u_{m+1,1}-2u_{m,1}\right)$$

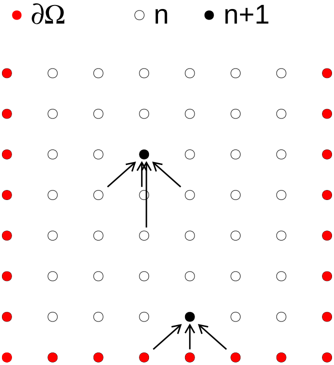
$$2u_{m,2}=2u_{m,1}+\frac{v^2}{v'^2}\left(u_{m+1,1}+u_{m+1,1}-2u_{m,1}\right)$$

$$u_{m,2}=u_{m,1}+\frac{v^2}{2v'^2}\left(u_{m+1,1}+u_{m+1,1}-2u_{m,1}\right)$$

Nota $u(x,0)$ si ricava $u(x,\Delta t)$ e quindi si itera l'algoritmo.

Schema di soluzione

Metodo esplicito



$$U_{m,n+1} = 2U_{m,n} - U_{m,n-1} + \frac{v^2}{v'^2}\left(U_{m+1,n} + U_{m-1,n} - 2U_{m,n}\right)$$

$$U_{m,2} = U_{m,1} + \frac{v^2}{v'^2}\left(U_{m+1,1} + U_{m-1,1} - 2U_{m,1}\right)$$

Equazione delle onde

Studiamo la condizione per la convergenza:

$$\xi = 2 - \frac{1}{\xi} + \frac{v^2}{v'^2}\left(e^{ikx} + e^{-ikx} - 2\right)$$
$$= 2 - \frac{1}{\xi} + \alpha^2\left(e^{ikx} + e^{-ikx} - 2\right)$$

Che diventa:

$$\xi^2 - 2\xi + 1 - \xi\alpha^2\left(2\cos(kx) - 2\right) = 0$$
$$\xi^2 - 2\xi + 1 + 4\xi\alpha^2\sin^2\left(\frac{kx}{2}\right) = 0$$
$$\xi^2 - 2\beta\xi + 1 = 0 \qquad \beta = 1 - 2\alpha^2\sin^2\left(\frac{kx}{2}\right) \qquad \xi = \beta \pm \sqrt{\beta^2 - 1}$$

Studiamo le soluzioni:

$$\xi = \beta \pm \sqrt{\beta^2 - 1}$$

$|\xi| \leq 1$ se $|\beta| \leq 1$ (se $|\beta| \geq 1$ c'è almeno una soluzione di modulo > 1) ma allora ξ si può riscrivere come:

$$\xi = \beta \pm i\sqrt{1 - \beta^2}$$

da cui:

$$|\xi| = 1$$

Equazione delle onde

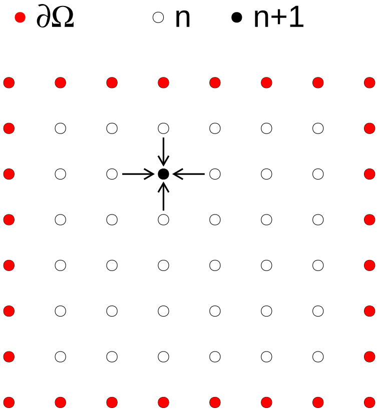
La condizione su α è

$$-1 \leq 1 - 2\alpha^2 \sin^2\left(\frac{kx}{2}\right) \leq 1$$
$$0 \leq \alpha^2 \sin^2\left(\frac{kx}{2}\right) \geq 1$$

che implica $\alpha \leq 1$ e quindi $v^2 \leq v'^2 = (\frac{\Delta x}{\Delta t})^2$. In altri termini, la “velocità” associata a Δx, Δt deve essere maggiore della velocità fisica.

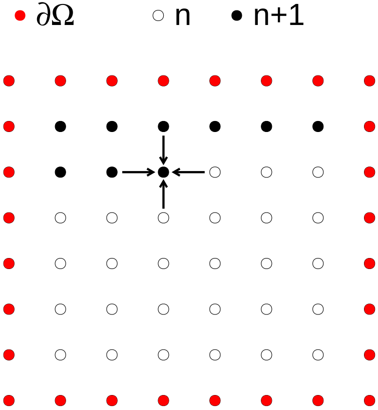
Riassunto: equazioni ellittiche

Metodo di Jacopi



Riassunto: equazioni ellittiche

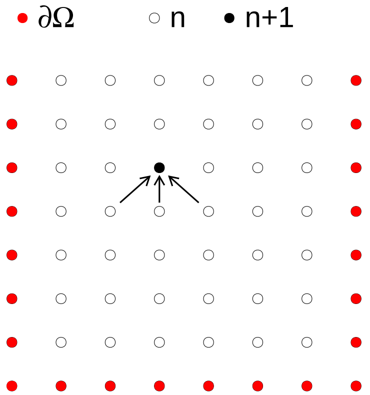
Metodo di Gauss-Seidel



Il metodo di sovra-rilassamento semplicemente accelera il processo.

Riassunto: equazioni paraboliche

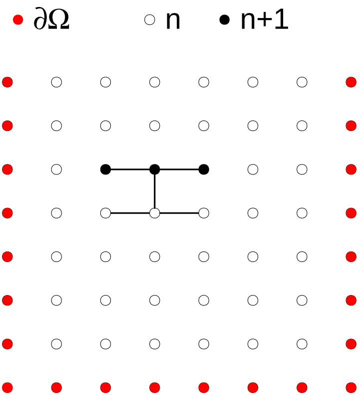
Metodo esplicito



$$T(i,j+1) = T(i,j) + \eta\,[T(i+1,j) + T(i-1,j) - 2T(i,j)]$$

Riassunto: equazioni paraboliche

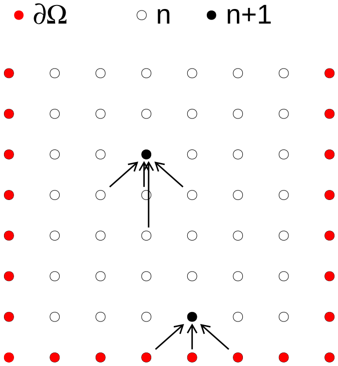
Cranck-Nicholson



$$-T_{m-1,n+1} + \left(\frac{2}{\eta} + 2\right) T_{m,n+1} - T_{m+1,n+1} = -T_{m-1,n} + \left(\frac{2}{\eta} + 2\right) T_{m,n} - T_{m+1,n}$$

Riassunto: equazioni iperboliche

Metodo esplicito



$$U_{m,n+1} = 2U_{m,n} - U_{m,n-1} + \frac{v^2}{v'^2}\left(U_{m+1,n} + U_{m-1,n} - 2U_{m,n}\right)$$

$$U_{m,2} = U_{m,1} + \frac{v^2}{2v'^2}\left(U_{m+1,1} + U_{m-1,1} - 2U_{m,1}\right)$$

Esercitazione

Esercitazione:

- Propagazione del calore lungo una sbarra
  - esperimento di Lab3 (impulso di calore ad un estremo, termostato all'altro estremo): soluzione esplicita

Compito a casa, uno a scelta tra:

- Propagazione del calore su sbarra "simmetrica" (con impulso di calore al centro, termostati ai lati) con metodo Crank-Nicholson
- Soluzione dell'equazione di Poisson per un condensatore 2D
- Corda vibrante 2D

Modalità:

- Implementazione e test dell'algoritmo in Matlab