1. Numerické řešení okrajových úloh pro PDE parabolického typu

Buďte $\Omega \subset \mathbf{R}^n$ omezená oblast, jejíž hranicí je nadplocha Γ po částech třídy $\mathcal{C}^1$, L je eliptický parciální diferenciální operátor na Ω, $T > 0$. Zabývejme se smíšenou úlohou pro lineární parabolickou parciální diferenciální rovnici

$$\frac{\partial y}{\partial t} - Ly = f \quad \text{na } (0,\, T) \times \Omega$$

společně s okrajovou podmínkou

$$\alpha(x)\frac{\partial y}{\partial \vec{n}} + \beta(x)y = \gamma(x) \quad \text{na } (0,\, T) \times \Gamma$$

a počáteční podmínkou

$$y(0,\, x) = y_0(x) \quad \text{na } \Omega.$$

1.1. **Metoda sítí.**

Omezíme se na následující jednorozměrný případ:

$$\frac{\partial y}{\partial t} - D\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = f(t,\, x) \quad \text{na } (0,\, T) \times (a,\, b), \quad D > 0 \tag{1a}$$

$$y(t,\, a) = \gamma_1, \quad y(t,\, b) = \gamma_2 \quad \text{na } (0,\, T), \tag{1b}$$

$$y(0,\, x) = y_0(x) \quad \text{na } (a,\, b). \tag{1c}$$

Buď $N_T \in \mathbf{N}$ a označme $\tau = \frac{T}{N_T}$ časový krok. Na interval $(a,\, b)$ položíme prostorovou síť $\overline{\omega}_h$. Pro $k \in \{0,\, \ldots,\, N_T\}$, $j \in \{0,\, \ldots,\, m\}$ klademe

$$y_j^k := y(k\tau,\, jh).$$

Při řešení rovnic uvedeného typu vycházíme z formální analogie s obyčejnou diferenciální rovnicí: Místo toho, abychom na řešení pohlíželi jako na funkci $(t,\, x) \mapsto y(t,\, x)$, považujeme je za zobrazení $t \mapsto y(t,\, \cdot)$, které každému času $t \in (0,\, T)$ přiřazuje funkci prostorové proměnné. Síťovou funkci, která aproximuje řešení v čase $t = k\tau$, resp. $t = (k+1)\tau$, budeme značit u, resp. $\widehat{u}$.

1.1.1. *Explicitní schéma.*

Rovnici (1a) nahradíme diferenční rovnicí

$$\frac{\widehat{u} - u}{\tau} - Du_{\bar{x}x} = f \quad \text{na } \omega_h.$$

Odtud

$$\widehat{u} = u + \tau D u_{\bar{x}x} + \tau f,$$

resp. po uzlech

$$u_j^{k+1} = u_j^k + \frac{\tau}{h^2} D\left(u_{j+1}^k - 2u_j^k + u_{j-1}^k\right) + \tau f_j^k.$$

Maticově můžeme získanou úlohu zapsat ve tvaru

$$\widehat{u} = \mathbf{A}u + \tau f, \tag{2}$$

kde

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 - D\frac{2\tau}{h^2} & D\frac{\tau}{h^2} & 0 & 0 & \ldots \\ D\frac{\tau}{h^2} & 1 - D\frac{2\tau}{h^2} & D\frac{\tau}{h^2} & 0 & \ldots \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \end{pmatrix}.$$

Opakovanou aplikací (2) dostaneme

$$u^k = \mathbf{A}u^{k-1} + \tau f^{k-1} = \mathbf{A}^2 u^{k-2} + \tau \mathbf{A} f^{k-2} + \tau f^{k-1} = \ldots = \mathbf{A}^k u^0 + \ldots.$$

Protože si nepřejeme, aby malá změna u^0 mohla způsobit velkou změnu u^k, chceme, aby $\sigma(\mathbf{A}) \subset (-1,\, 1)$. Matice $\mathbf{A}$ je 3-diagonální a má vlastní čísla

$$\lambda_i = 1 - 4\frac{\tau}{h^2} D \sin^2 \frac{i\pi}{2m}, \quad i \in \widehat{m-1}.$$

Poznámka 1.1. Odpovídající vlastní vektory jsou

$$\left\{\sin \frac{i\pi j}{m}\right\}_{j=1}^{m-1}, \quad i \in \widehat{m-1}.$$

Požadujeme tedy, aby platilo

$$-1 < 1 - 4\frac{\tau}{h^2}D\sin^2\frac{i\pi}{2m} < 1, \quad i \in \widehat{m-1},$$

tj.

$$\frac{\tau}{h^2}D\sin^2\frac{i\pi}{2m} < \frac{1}{2}, \quad i \in \widehat{m-1}.$$

Toho dosáhneme volbou

$$D\frac{\tau}{h^2} < \frac{1}{2}.$$

Explicitní schéma je proto *podmíněně stabilní.*

1.1.2. *Implicitní schéma.* Rovnici (1a) nahradíme diferenční rovnicí

$$\frac{\widehat{u}-u}{\tau} - D\widehat{u}_{\bar{x}x} = \widehat{f} \quad \text{na } \omega_h.$$

Odtud

$$\widehat{u} - \tau D\widehat{u}_{\bar{x}x} = u + \tau\widehat{f},$$

resp. po uzlech

$$u_j^{k+1} - D\frac{\tau}{h^2}\left(u_{j+1}^{k+1} - 2u_j^{k+1} + u_{j-1}^{k+1}\right) = u_j^k + \tau f_j^{k+1}.$$

Maticově můžeme získanou úlohu zapsat ve tvaru

$$\mathbf{A}\widehat{u} = u + \tau\widehat{f}, \tag{3}$$

kde

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1+D\frac{2\tau}{h^2} & -D\frac{\tau}{h^2} & 0 & 0 & \dots \\ -D\frac{\tau}{h^2} & 1+D\frac{2\tau}{h^2} & -D\frac{\tau}{h^2} & 0 & \dots \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \end{pmatrix}.$$

Opakovanou aplikací (3) dostaneme

$$u^k = \mathbf{A}^{-1}(u^{k-1} + \tau f^k) = (\mathbf{A}^{-1})^2 u^{k-2} + \tau\mathbf{A}^{-1}f^k + \tau(\mathbf{A}^{-1})^2 f^{k-1} = \ldots = (\mathbf{A}^{-1})^k u^0 + \ldots.$$

Tvrzení 1.1. Implicitní schéma je *nepodmíněně stabilní.*

Důkaz. Později dokážeme, že $\sigma(\mathbf{A}^{-1}) \subset (-1, 1)$. □

1.1.3. *Chyba aproximace diferenciálního operátoru $\frac{\partial}{\partial t} - L$ pro explicitní a implicitní schéma.* Diferenciální operátor $y \mapsto \frac{\partial y}{\partial t}$ aproximujeme dopřednou diferencí u_t v explicitním schématu a zpětnou diferencí $u_{\bar{t}}$ v implicitním schématu. Chyba je v obou případech řádu $O(\tau)$.

Diferenciální operátor $y \mapsto -y''$ aproximujeme v obou schématech diferencí $u_{\bar{x}x}$. Chyba je řádu $O(h^2)$.

Celková chyba aproximace diferenciálního operátoru $\frac{\partial}{\partial t} - L$ je tudíž v obou případech řádu $O(\tau + h^2)$.

1.1.4. *Crankovo-Nicolsonovo schéma.* Rovnici (1a) nahradíme diferenční rovnicí

$$\frac{\widehat{u}-u}{\tau} - \frac{D}{2}\left(\widehat{u}_{\bar{x}x} + u_{\bar{x}x}\right) = \frac{1}{2}\left(f + \widehat{f}\right) \quad \text{na } \omega_h. \tag{4}$$

Odtud

$$\widehat{u} - \tau\frac{D}{2}\widehat{u}_{\bar{x}x} = u + \frac{\tau D}{2}u_{\bar{x}x} + \frac{\tau}{2}\left(\widehat{f} + f\right).$$

Poznámka 1.2. Schéma nahrazuje rovnici (1a) v čase $\left(k + \frac{1}{2}\right)\tau$;

- výraz $\frac{1}{\tau}\left(u^{k+1} - u^k\right)$ nahrazuje $\frac{\partial y}{\partial t}\left((k+\frac{1}{2})\tau, \cdot\right)$ s přesností řádu $O(\tau^2)$ (jde o centrální diferenci),
- výraz $\frac{1}{2}\left(u_{\bar{x}x}^{k+1} + u_{\bar{x}x}^k\right)$ nahrazuje $\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}\left((k+\frac{1}{2})\tau, \cdot\right)$ s přesností řádu $O(\tau^2 + h^2)$,
- výraz $\frac{1}{2}\left(f^{k+1} + f^k\right)$ nahrazuje $f\left((k+\frac{1}{2})\tau, \cdot\right)$ s přesností řádu $O(\tau^2)$.

Tvrzení 1.2. Crankovo-Nicolsonovo schéma je nepodmíněně stabilní.

Důkaz. Položme
$$\widehat{u}_{\bar{t}} = \frac{\widehat{u} - u}{\tau}, \quad \varphi = \frac{1}{2}\left(\widehat{f} + f\right).$$
Pak můžeme (4) přepsat jako
$$\widehat{u}_{\bar{t}} - \varphi = \frac{D}{2}\left(\widehat{u}_{\bar{x}x} + u_{\bar{x}x}\right).$$
Tuto rovnici skalárně vynásobme výrazem $2\tau\widehat{u}_{\bar{t}}$. Využijeme-li Greenovu formuli, dostaneme díky okrajovým podmínkám (1b)
$$2\tau\|\widehat{u}_{\bar{t}}\|_h^2 - 2\tau\left(\widehat{u}_{\bar{t}},\, \varphi\right)_h = \tau D\left(\widehat{u}_{\bar{t}},\, \widehat{u}_{\bar{x}x} + u_{\bar{x}x}\right)_h = D\left(\widehat{u} - u,\, (\widehat{u} + u)_{\bar{x}x}\right)_h =$$
$$= -\,D\left((\widehat{u} - u)_{\bar{x}},\, (\widehat{u} + u)_{\bar{x}}\right] = -D\|\widehat{u}_{\bar{x}}]|^2 + D\|u_{\bar{x}}]|^2.$$
Pomocí Schwarzovy a Youngovy nerovnosti dostaneme
$$2\tau\|\widehat{u}_{\bar{t}}\|_h^2 + D\|\widehat{u}_{\bar{x}}]|^2 - D\|u_{\bar{x}}]|^2 = 2\tau\left(\widehat{u}_{\bar{t}},\, \varphi\right)_h \le 2\tau\|\widehat{u}_{\bar{t}}\|_h\|\varphi\|_h \le \tau\|\widehat{u}_{\bar{t}}\|_h^2 + \tau\|\varphi\|_h^2$$
neboli
$$\tau\|\widehat{u}_{\bar{t}}\|_h^2 + D\|\widehat{u}_{\bar{x}}]|^2 - D\|u_{\bar{x}}]|^2 \le \tau\|\varphi\|_h^2.$$
Tím spíš ovšem platí
$$D\|\widehat{u}_{\bar{x}}]|^2 - D\|u_{\bar{x}}]|^2 \le \tau\|\varphi\|_h^2.$$
Odtud
$$D\|u_{\bar{x}}^{k+1}]|^2 \le D\|u_{\bar{x}}^{k}]|^2 + \tau\|\varphi^k\|_h^2 \le D\|u_{\bar{x}}^{k-1}]|^2 + \tau\|\varphi^{k-1}]|_h^2 + \tau\|\varphi^k\|_h^2 \le \dots \le$$
$$\le D\|u_{\bar{x}}^{0}]|^2 + \sum_{j=0}^{k}\tau\|\varphi^j\|_h^2.$$
Původní úlohu (1) nahrazujeme diferenční úlohou
$$\frac{u^{k+1} - u^k}{\tau} = \frac{1}{2}D\left(u_{\bar{x}x}^{k+1} + u_{\bar{x}x}^{k}\right) + \frac{1}{2}\left(f^{k+1} - f^k\right), \qquad k = 1,\, \dots,\, N_T - 1, \tag{5a}$$
$$u_0^k = \gamma_1, \quad u_m^k = \gamma_2, \qquad k = 1,\, \dots,\, N_T, \tag{5b}$$
$$u_j^0 = y_{0j}, \qquad j = 0,\, \dots,\, m. \tag{5c}$$
Odečtěme spojitou úlohu pro hladinu $k+\frac{1}{2}$ a tuto diskrétní úlohu. Chyba aproximace diferenciálního operátoru $\frac{\partial}{\partial t} - D\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ je
$$\Psi_{h,\tau} = \mathcal{P}_{h,\tau}\left(\frac{\partial y}{\partial t} - D\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}\right) - \frac{\left(\mathcal{P}_{h,\tau}y\right)^{k+1} - \left(\mathcal{P}_{h,\tau}y\right)^{k}}{\tau} +$$
$$+\frac{1}{2}D\left((\mathcal{P}_{h,\tau}y)_{\bar{x}x}^{k+1} + (\mathcal{P}_{h,\tau}y)_{\bar{x}x}^{k}\right) = O(h^2 + \tau^2),$$
kde $(\mathcal{P}_{h,\tau}y)_j^k = y(k\tau,\, a + jh)$, $j = 0, \dots, m$, $k = 0, \dots, N_T$. Položme $z = u - \mathcal{P}_{h,\tau}y$. Potom z splňuje soustavu rovnic
$$\frac{\widehat{z} - z}{\tau} = \frac{1}{2}D(\widehat{z}_{\bar{x}x} + z_{\bar{x}x}) + \Psi_{h,\tau},$$
$$z_0^k = z_m^k = 0, \quad k = 1,\, \dots,\, N_T,$$
$$z_j^0 = 0, \quad j = 0,\, \dots,\, m.$$
Odtud a z předchozího vyplývá, že platí
$$D\|z_{\bar{x}}^{k+1}]|^2 \le D\|z_{\bar{x}}^{0}]|^2 + \sum_{j=0}^{k}\tau\|\Psi^j\|_h^2 = \sum_{j=0}^{k}\tau\|\Psi^j\|_h^2.$$
Ze Sobolevových nerovností pak plyne
$$\|z^{k+1}\|_{h,0} \le \frac{\sqrt{b-a}}{2}\|z_{\bar{x}}^{k+1}]| \le \frac{\sqrt{b-a}}{2D}\sqrt{\sum_{j=0}^{k}\tau\|\Psi^j\|_h^2} = O(\tau^2 + h^2),$$
tj. stabilita a konvergence. □

1.2. **Metoda přímek.** V metodě sítí jsme vycházeli z toho, že řešení úlohy (1) je zobrazení, které každému časovému okamžiku přiřadí funkci prostorové proměnné. Nabízí se též opačný pohled na věc, tj. sledovat časový vývoj ve zvoleném bodě $x \in \langle a,\, b\rangle$ jako funkci času. Postupujeme tak, že na interval $\langle a,\, b\rangle$ položíme síť a úlohu (1) převedeme na počáteční úlohu pro soustavu obyčejných diferenciálních rovnic

$$\begin{aligned} &\frac{\mathrm{d}u_j}{\mathrm{d}t} = D\frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} + f_j, && j \in \widehat{m-1}, \\ &u_0(t) = \gamma_1, \quad u_m(t) = \gamma_2, && t \in (0,\, T), \\ &u_j(0) = y_{0j}, && j \in \widehat{m-1}, \end{aligned}$$

stručně zapsáno

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}}{\mathrm{d}t} &= D\boldsymbol{u}_{\bar{x}x} + \boldsymbol{f}, \\ \boldsymbol{u}(0) &= \boldsymbol{y}_0. \end{aligned}$$

Tuto soustavu řešíme např. Rungovou-Kuttovou metodou.