Programovanie, 4. prednáška

Peter Vanya
Jarná škola FX

18. apríla 2014

Sústavy rovníc

Vyskytujú sa... asi že všade. Dnes sa zamyslíme nad ich využitím pri parciálnych difkách.

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

kde A je matica $\mathbf{x}$ je neznámy vektor a $\mathbf{b}$ je vektor pravých strán. Existuje asi milión spôsobov riešenia:

- Gaussova eliminačná metóda
- LU faktorizácia
- Choleského/QR faktorizácia
- Gauss-Seidelova a Jacobiho metóda (iteratívne, pre špeciálne matice)
- Konjugované gradienty (pre symetrické a pozitívne matice)

Vedenie tepla

Rovnica vedenia tepla v 1d:

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

vo viacerých rozmeroch:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = K \nabla^2 T$$

Čo s tým spravíme v počítači?

Diskretizácia

Vieme, že 2. derivácia je

$$\partial_{xx} T = \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

To znamená, že ak mám vektor teplôt $\mathbf{T} = T_1 \dots T_N$, tak derivácia je ako matica pôsobiaca na tento vektor:

$$\partial_{xx} = \frac{1}{h^2} D, \quad D = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & \\ 1 & -2 & 1 & \dots & \\ 0 & 1 & -2 & \dots & \\ & & & \ddots & \\ & \dots & & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

(Ešte sa potom musíme zamyslieť nad okrajovými podmienkami.)

Časová závislosť

Čas označíme indexom j. Dopredná derivácia je

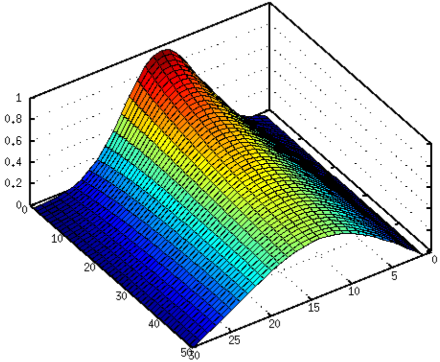
$$\partial_t T = \frac{T^{j+1} - T^j}{\Delta t} + \mathcal{O}(h)$$

Teda

$$\mathbf{T}^{j+1} = \mathbf{T}^j + D\mathbf{T}^j \Delta t$$

... a iterujeme od 1 do N.

Tok tepla



Pozor na jednu vec – číslo $\mu = K\Delta t/h^2$ nesmie byť väčšie ako 0.5, inak nám to začne divoko oscilovať. (Overte si to.)

Okrajové podmienky

... sú veľkou vedou samy osebe. Možnosti sú napr.:

- periodické,
- nula na kraji (nekonečná tepelná kapacita).

Ako sa to prejaví v matici D? (Cvičenie.)

2d prípad

Druhá derivácia je

$$\partial_{xx} T + \partial_{yy} T = \frac{T_{i,j+1} + T_{i+1,j} + T_{i-1,j} + T_{i,j-1} - 4T_{ij}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

Ako sa to dá reprezentovať? Z vektora teplôt T_i vznikne matica T_{ij}, a naň pôsobí akýsi operátor D, ktorý má nasledovnú obrázkovú reprezentáciu:

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Maticu T_{ij} pretransformujeme na vektor T_{Ni+j}, a obrázkový operátor D na maticu:

2d prípad

$$D = \begin{pmatrix} B & I & 0 & \dots & \\ I & B & I & \dots & \\ 0 & I & B & \dots & \\ & & & \ddots & \\ & \dots & & I & B \end{pmatrix}$$

kde

$$B = \begin{pmatrix} -4 & 1 & 0 & \dots & \\ 1 & -4 & 1 & \dots & \\ 0 & 1 & -4 & \dots & \\ & & & \ddots & \\ & \dots & & 1 & -4 \end{pmatrix}$$

a I je identita. Iterujeme ako v 1d prípade.

Poissonova rovnica

Základná úloha elektrostatiky – aký potenciál/el. pole vytvára náboj $\rho(\mathbf{r})$? Teoreticky nám slúži Gaussov zákon

$$\nabla^2\phi(\mathbf{r}) = -\frac{\rho(\mathbf{r})}{\varepsilon_0}$$

Začnime v 1d – diskretizujeme priestor:

$$\nabla^2\phi = \partial_{xx}\phi = \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{h^2}$$

Na pravej strane máme rozloženie náboja ρ_i a riešime sústavu lineárnych rovníc (s patričnými okrajovými podmienkami ϕ_0 a ϕ_N)

$$\frac{1}{h^2}D\phi_i = -\frac{1}{\varepsilon_0}\rho_i$$

Riešime systém lineárnych rovníc

Máme $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, a na začiatok si rozdelíme A na horný a dolný trojuholník a diagonálu:

$$A = L + D + U$$

Teraz nastúpi napr. Jacobiho iteratívna metóda metóda:

$$(A - B)\mathbf{x}^{(n+1)} = -B\mathbf{x}^{(n)} + \mathbf{b}$$

V našom prípade $B = L + U$, teda $A - B = D$, teda $(A - B)^{-1} = 1/4I$ (cvičenie):

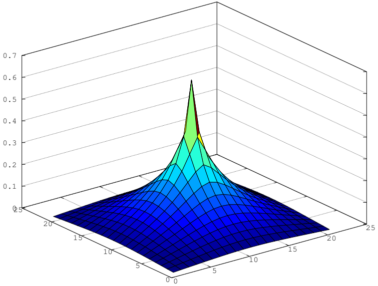
$$\mathbf{x}^{(n+1)} = -\frac{1}{4}(L + U)x^{(n)} + \frac{1}{4}\mathbf{b}$$

Iterujeme $\mathbf{x}^{(n)}$ až dokým nedosiahneme želanú presnosť.

2d Poissonova rovnica

$$\nabla^2\phi = \frac{\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} - 4\phi_{ij}}{h^2}$$

Túto „maticu“ si potrebujeme znova naskladať do vektora, aby sme ho vedeli prenásobovať operátorom D.



Obr.: Potenciál pre nulové okrajové podmienky, $Q = -\delta(\mathbf{r})$ a $\varepsilon = 1$.