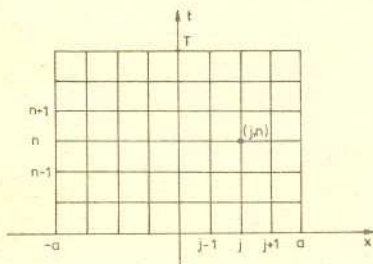


Doc. dr Andrzej PALCZEWSKI

Postęp w budowie sprzętu komputerowego był przez wiele lat inspirowany głównie potrzebami fizyków i inżynierów. Tworzyli oni różne matematyczne modele rzeczywistości, modele coraz doskonalsze, ale jednocześnie coraz trudniejsze do matematycznego zbadania. Jedyną szansą było znajdowanie rozwiązań przybliżonych, w czym nieocenioną pomocą służył komputer. Ponieważ rzecz dotyczyła często spraw kluczowych dla rozwoju cywilizacji – budowa statków, mostów, samolotów itp. – nie oszczędzono wysiłków dla doskonalenia narzędzia niezbędnego do tej działalności, tj. komputera.

W poniższym tekście zajmiemy się niektórymi pułapkami, jakie czyhają na praktyka pragnącego znaleźć, przy użyciu komputera, przybliżone rozwiązanie wymyślonego przez siebie modelu matematycznego. W opisie ograniczymy się tylko do klasy modeli opisywanych za pomocą równań różniczkowych. Ponieważ świat jest wielowymiarowy, więc mówić będziemy o równaniach z pochodnymi cząstkowymi, tj. pochodnymi w kierunku poszczególnych osi współrzędnych.



Rys. 1

Aby rozwiązać równanie (1) na tej siatce musimy występujące w nim pochodne zastąpić przez odpowiednie ilorazy różnicowe korzystając przy ich tworzeniu jedynie z wartości funkcji w węzłach siatki. Możemy na przykład napisać

$$(2) \quad \begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &\approx \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}, \\ \frac{\partial u}{\partial x} &\approx \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x}. \end{aligned}$$

Takie postępowanie nazywa się tworzeniem schematu różnicowego.

Zbudujmy teraz różnicowe przybliżenie równania (1). Wykonując w tym równaniu odpowiednie różniczkowanie możemy je zapisać następująco

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

i wstawiając przybliżenia pochodnych ze wzorów (2) otrzymujemy równanie różnicowe

$$(3) \quad \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + u_j^n \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = 0.$$

Po prostych przekształceniach dostajemy

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{u_j^n \Delta t}{\Delta x} (u_j^n - u_{j-1}^n).$$

Tak więc znając wartości u w warstwie n możemy z tego wzoru wyznaczyć wartości u w warstwie $n + 1$.

Wyobraźmy więc sobie, że mamy model matematyczny, w którym interesująca nas cecha rzeczywistości jest opisana funkcją u zależną od czasu t i położenia w przestrzeni. Dla uproszczenia przyjmijmy, że położenie zadane jest jedną zmienną x . Oznacza to, że $u = u(t, x)$. Model nasz dany jest następującym równaniem o pochodnych cząstkowych

$$(1) \quad \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial (u^2)}{\partial x} = 0.$$

Równanie to opisuje prawo, według którego zmienia się w czasie funkcja u . Jeśli chcemy znaleźć jej postać w jakiejś chwili czasu t , musimy znać ją w chwili początkowej $t = 0$, tzn. znać funkcję

$$u(0, x) = u_0(x).$$

Ograniczmy jeszcze obszar zmienności x do przedziału $[-a, a]$ (ułatwi to korzystanie z komputera) zakładając przy tym, że na krańcach tego przedziału znamy funkcję u w każdej chwili czasu.

Chcąc rozwiązać równanie (1) na komputerze możemy wykorzystać następujący sposób. Dzielimy przedział $[-a, a]$ na odcinki o tej samej długości Δx , a przedział $[0, T]$ na odcinki o długości Δt . Ponumerujemy węzły powstałej w ten sposób siatki parami liczb (j, n) tak, żeby j rosło w kierunku osi Ox , a n w kierunku osi Ot (patrz rys. 1, gdzie $0 \leq j \leq J$, $0 \leq n \leq N$ oraz $J = 2a/\Delta x$, $N = T/\Delta t$). Rozwiązanie równania (1) na komputerze będzie polegało na znalezieniu wartości funkcji u we wszystkich węzłach siatki, tj. zbioru liczb u_j^n , gdzie u_j^n jest wartością funkcji u w węzle o numerze (j, n) , $u_j^n = u(n\Delta t, -a + j\Delta x)$. Jak łatwo zauważyć, znając funkcję $u_0(x)$ możemy obliczyć wartości u w najniższej warstwie węzłów $u_j^0 = u_0(-a + j\Delta x)$.

Zauważmy jednak, że moglibyśmy nie wykonać różniczkowania w równaniu (1) i zastosować następujące przybliżenie

$$\frac{\partial (u^2)}{\partial x} \approx \frac{(u_j^n)^2 - (u_{j-1}^n)^2}{\Delta x}.$$

Wtedy nasze równanie różnicowe przyjąłoby postać

$$(4) \quad \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} \frac{(u_j^n)^2 - (u_{j-1}^n)^2}{\Delta x} = 0.$$

Powstaje teraz pytanie, które z dwóch otrzymanych równań różnicowych jest lepsze, tzn. lepiej przybliża rozwiązanie równania różniczkowego. Aby odpowiedzieć na to pytanie, scałkujmy równanie (1) względem x w przedziale $[-a, a]$. Otrzymamy wtedy (zakładamy, że funkcja $u(t, x)$ jest całkowalna)

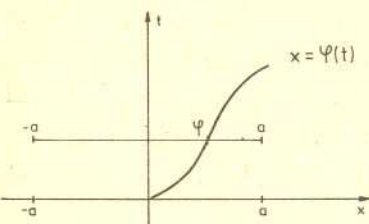
$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-a}^a u(t, x) dx + \int_{-a}^a \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^2}{2} \right) dx = 0.$$

Po dokonaniu prostych przekształceń drugiej całki otrzymujemy

$$(5) \quad \frac{\partial}{\partial t} \int_{-a}^a u(t, x) dx + \frac{1}{2} (u^2(t, a) - u^2(t, -a)) = 0,$$

tzn. zmiana w czasie całki $\int u(t, x) dx$ zależy jedynie od różnicy wartości funkcji u na brzegach przedziału. W szczególności jeśli $u(t, a) = u(t, -a)$, to całka $\int u dx$ jest stała w czasie.

Załóżmy, że nasz skok propaguje się po krzywej $x = \varphi(t)$ (rysunek poniżej).



Wtedy

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{-a}^a u(t, x) dx &= \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \left[\int_{-a}^{\varphi} u(t, x) dx + \int_{\varphi}^a u(t, x) dx \right] = \\ &= \int_{-a}^{\varphi} \frac{\partial u}{\partial t} dx + u(t, \varphi^-) \frac{d\varphi}{dt} + \\ &+ \int_{\varphi}^a \frac{\partial u}{\partial t} dx - u(t, \varphi^+) \frac{d\varphi}{dt}. \end{aligned}$$

Korzystając z faktu, że

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial (u^2)}{\partial x},$$

otrzymujemy

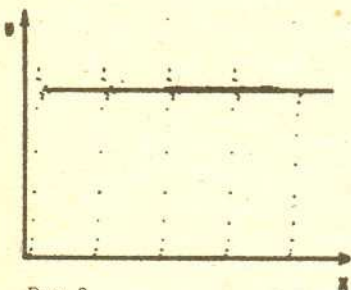
$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{-a}^a u(t, x) dx &= \\ &= \frac{1}{2} u^2(t, -a) - \frac{1}{2} u^2(t, \varphi^-) + \\ &+ u(t, \varphi^-) \frac{d\varphi}{dt} - \frac{1}{2} u^2(t, a) + \\ &+ \frac{1}{2} u^2(t, \varphi^+) - u(t, \varphi^+) \frac{d\varphi}{dt}. \end{aligned}$$

Uwzględniając tożsamość (5) dostajemy

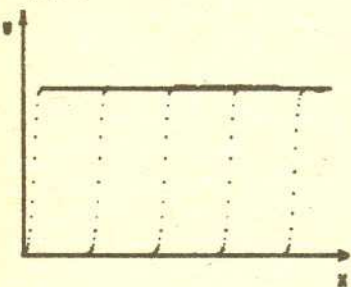
$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{2} \frac{[u^2(t, \varphi^+) - u^2(t, \varphi^-)]}{u(t, \varphi^+) - u(t, \varphi^-)}.$$

Ponieważ w naszym przypadku $u(t, \varphi^+) = 0$, a $u(t, \varphi^-) = 1$, więc

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{2} \quad \text{i} \quad \varphi(t) = \frac{1}{2}t.$$



Rys. 3



Rys. 4

Dokonując analogicznych operacji na równaniu różnicowym (4) (całkowanie zastępujemy teraz sumowaniem) otrzymujemy

$$\sum_{j=1}^J \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \sum_{j=1}^J \frac{(u_j^n)^2 - (u_{j-1}^n)^2}{2\Delta x} = 0,$$

a po wykonaniu drugiego sumowania

$$\sum_{j=1}^J \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \frac{(u_1^n)^2 - (u_0^n)^2}{2\Delta x} = 0.$$

Pokazuje to, że równanie (4) ma tę samą własność co równanie różniczkowe (1), tj. przyrost całki (sumy) względem czasu zależy jedynie od wartości na brzegu. Łatwo można sprawdzić, że własności tej nie ma równanie (3). Oznacza to, że równanie różnicowe (4) lepiej przybliża równanie różniczkowe (1).

To, że równanie (4) jest lepsze, nie znaczy jeszcze, że jest dobre. Ważnym kryterium jest zachowanie się rozwiązania komputerowego dla nieciągłego warunku początkowego. (De facto każdy problem rozwiązywany na siatce możemy traktować jako problem rozwiązywany w klasie funkcji schodkowych, więc nieciągłych.) W tym celu weźmy

$$(6) \quad u_0(x) = \begin{cases} 1 & x < 0, \\ 0 & x > 0. \end{cases}$$

Jak łatwo sprawdzić, funkcja

$$(7) \quad u(t, x) = \begin{cases} 1 & x < t/2, \\ 0 & x > t/2, \end{cases}$$

jest wtedy rozwiązaniem równania (1) (patrz margines). Oznacza to, że skok, który był początkowo w punkcie $x = 0$, porusza się z czasem po prostej $t = 2x$.

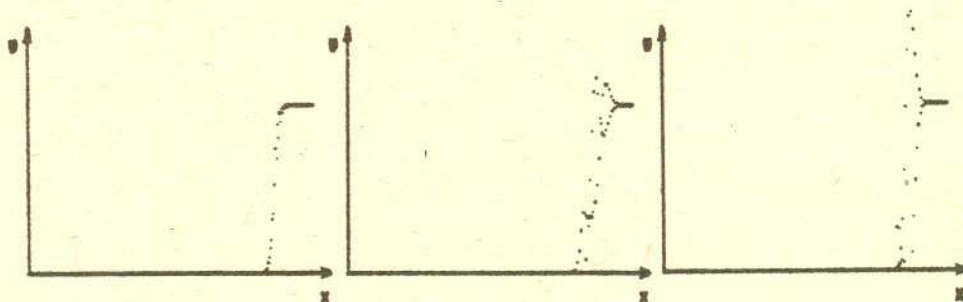
Tymczasem próba rozwiązania równania (4) z warunkiem początkowym (6) prowadzi bardzo szybko do pojawienia się na ekranie komputera komunikatu „real overflow” (przekroczony zakres liczb rzeczywistych) lub podobnego (zależy od typu komputera i użytego języka programowania), który świadczy, że wyniki obliczeń w kolejnych krokach musiały być obciążone coraz większym błędem (prawdziwe rozwiązanie jest przecież ograniczone).

Dla liczenia takich nieciągłych rozwiązań wymyślono znacznie bardziej wyrafinowane schematy różnicowe. Schemat wymyślony przez Petera D. Laxa prowadzi do następującego równania różnicowego

$$\frac{u_j^{n+1} - \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2}}{\Delta t} + \frac{1}{2} \frac{(u_j^n)^2 - (u_{j-1}^n)^2}{\Delta x} = 0.$$

Spełnia on dyskretną wersję tożsamości (5) i daje ograniczone rozwiązanie przy nieciągłych warunkach początkowych.

Prześledźmy to na przykładzie modelu nieco bardziej skomplikowanego niż równanie (1). Jest to model opisujący rozchodzenie się fal w powietrzu. Rysunek 2 pokazuje wyniki otrzymane przy obliczeniach z wykorzystaniem schematu użytego w równaniu (4) na kilka króków przed komunikatem „real overflow”.



Rys. 2

Rysunek 3 ilustruje wyniki otrzymane po zastosowaniu schematu Laxa. Widać wyraźnie, że w miejscu skoku funkcji pojawiły się oscylacje, których źródłem są błędy numeryczne. Na szczęście oscylacje te nie rosną w czasie w odróżnieniu od przypadku równania (4). Wreszcie rysunek 4 pokazuje rozwiązanie numeryczne, które bardzo dobrze się zgadza z wynikami dokładnymi. Niestety, do jego osiągnięcia należało użyć znacznie bardziej skomplikowanego schematu numerycznego.