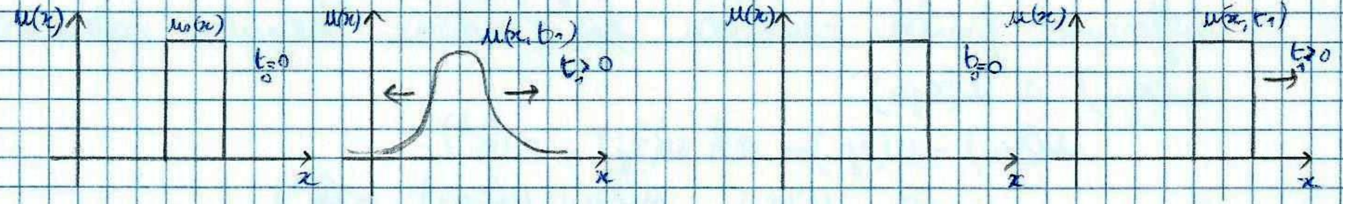
Metodi numerici per le equazioni differenziali alle derivate parziali: differenze finite

Numerosi problemi ingegneristici presentano dipendenza da più di una variabile. Per questo vengono descritti da equazioni differenziali in cui compaiono le derivate parziali (PDE - partial differential equations). Si tratta delle equazioni ellittiche, paraboliche e iperboliche.

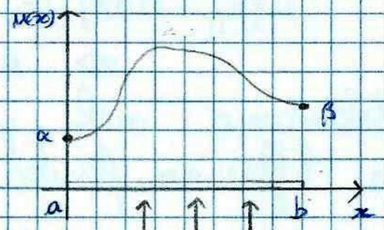
Una prima differenza che possiamo evidenziare, tra le paraboliche e le iperboliche, è che le prime hanno velocità di propagazione infinita e non presentano direzione privilegiata, mentre per le seconde sono veri i viceversa:



PARABOLICA (DIFFUSIONE, CALORE) IPERBOLICA (TRASPORTO, ONDE)

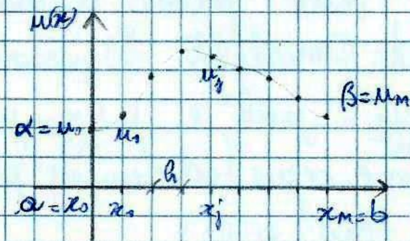
Consideriamo ora l'equazione di Poisson nel caso monodimensionale:

$$\begin{cases} -\mu\, u''(x) = f(x) & \text{in } [a,b] \\ u(a) = \alpha & \alpha,\beta \in \mathbb{R} \\ u(b) = \beta \end{cases}$$



Immaginiamo di avere una barra monodimensionale scaldata dalla sorgente di calore $f = f(x)$: u rappresenterà la temperatura di equilibrio. Il problema è di Dirichlet: sono fornite le temperature (bloccate) agli estremi.

Dobbiamo discretizzare il dominio:



$$x_j = x_0 + j\,h, \quad j = 0, 1, \dots M$$

La soluzione viene calcolata solo nei nodi di discretizzazione, con j che varia da 1 a $M-1$, essendo noti i valori α e β in a e b. In simboli $u_j = u(x_j)$, $j = 1, \dots, M-1$.

Il metodo delle differenze finite prevede l'approssimazione delle derivate con gli sviluppi in serie di Taylor:

$$u(x_{j+1}) = u(x_j + h) = u(x_j) + h\,u'(x_j) + \frac{h^2}{2} u''(x_j) + \frac{h^3}{6} u'''(x_j) + \frac{h^4}{24} u^{IV}(x_j)$$

$$u(x_{j-1}) = u(x_j - h) = u(x_j) - h\,u'(x_j) + \frac{h^2}{2} u''(x_j) - \frac{h^3}{6} u'''(x_j) + \frac{h^4}{24} u^{IV}(x_j)$$

Al diminuire di h la soluzione approssima sempre meglio quella esatta. Al posto delle derivate utilizziamo le cosiddette differenze finite centrate o decentrate:

- differenza finita decentrata a destra del I ordine (l'ordine è I poiché approssimazione della derivata prima):

$$u(x_{j+1}) = u(x_j) + h\,u'(x_j) + o(h^2)$$

$$\Rightarrow u'(x_j) = \frac{u(x_{j+1}) - u(x_j)}{h} + o(h)$$

- differenza finita decentrata a sinistra del I ordine:

$$u(x_{j-1}) = u(x_j) - h\,u'(x_j) + o(h^2)$$

$$\Rightarrow u'(x_j) = \frac{u(x_j) - u(x_{j-1})}{h} + o(h)$$

- differenza finita centrata del I ordine ottenuta sottraendo $u(x_{j-1})$ a $u(x_{j+1})$:

$$u(x_{j+1}) - u(x_{j-1}) = 2h\,u'(x_j) + o(h^3)$$

$$\Rightarrow u'(x_j) = \frac{u(x_{j+1}) - u(x_{j-1})}{2h} + o(h^2)$$

- differenza finita centrata del II ordine ottenuta sommando $u(x_{j-1})$ e $u(x_{j+1})$:

$$u(x_{j+1}) + u(x_{j-1}) = 2u(x_j) + h^2 u''(x_j) + o(h^4)$$

$$\Rightarrow u''(x_j) = \frac{u(x_{j+1}) - 2u(x_j) + u(x_{j-1})}{h^2} + o(h^2)$$

Sostituiamo nel problema differenziale iniziale quest'ultima differenza finita ($j = 1, \dots, M-1$):

$$-\mu \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} = f(x_j)$$

Formula equivalente a un sistema:

$$\begin{array}{l} j=1 \\ \\ j=2 \\ \\ \\ j=M-1 \end{array}
\begin{cases} -\mu \dfrac{u_0 - 2u_1 + u_2}{h^2} = f_1 \\ -\mu \dfrac{u_1 - 2u_2 + u_3}{h^2} = f_2 \\ \vdots \\ -\mu \dfrac{u_{M-2} - 2u_{M-1} + u_M}{h^2} = f_{M-1} \end{cases}$$

Il sistema è lineare (siamo partiti da equazioni lineari) con incognite $u, \dots, u_M$; u_0 e u_M sono noti poiché il problema è di Dirichelet. Si possono portare a II membro i termini noti $-\mu \frac{u_0}{h^2} = -\mu\alpha h^2$ e $-\mu \frac{u_M}{h^2} = -\frac{\mu\beta}{h^2}$.

Matricialmente il sistema si scrive come segue (ad esempio per $M=6$).

$$\frac{\mu}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_1) + \mu \frac{\alpha}{h^2} \\ f(x_2) \\ f(x_3) \\ f(x_4) \\ f(x_5) + \mu \frac{\beta}{h^2} \end{pmatrix}$$

In alternativa si possono aggiungere al sistema le due equazioni $u_0 = \alpha$ e $u_M = \beta \Rightarrow \frac{\mu}{h^2} u_0 = \frac{\mu}{h^2}\alpha$ e $\frac{\mu}{h^2} u_M = \frac{\mu}{h^2}\beta$. In forma matriciale il sistema diviene (per generico M):

$$\frac{\mu}{h^2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & \dots & & & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_{M-1} \\ u_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu\frac{\alpha}{h^2} \\ f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_{M-1}) \\ \mu\frac{\beta}{h^2} \end{pmatrix}$$

Consideriamo ora il problema misto:

$$\begin{cases} -\mu u''(x) = f(x) & \text{in } [a,b] \\ u(a) = \alpha \\ u'(b) = \beta \end{cases}$$

La derivata prima esprime il flusso che non può essere nullo.

Usiamo la differenza finita decentrata a sinistra (a destra non sono presenti punti con valori noti):

$$u'(b) = \frac{u(x_M) - u(x_{M-1})}{h} + o(h) \Rightarrow \frac{u_M - u_{M-1}}{h} = \beta$$

$$\Rightarrow \mu \cdot \frac{-u_{M-1} + u_M}{h^2} = \frac{\beta \cdot \mu}{h}$$

Matricialmente il sistema diviene (per generico M):

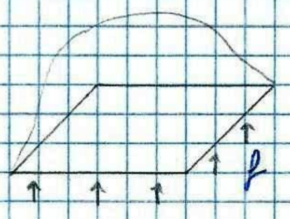
$$\mu/h^2\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & \dots & & & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_{M-1} \\ u_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu/h^2\,\alpha \\ f_1 \\ \vdots \\ f_{M-1} \\ \frac{\beta\mu}{h} \end{pmatrix}$$

Se si considerano condizioni di Neumann in entrambi i bordi del dominio non è possibile giungere a un'unica soluzione: ne esistono infinite, differenti per costanti. Il problema non è ben posto, cioè non esiste un'unica soluzione.

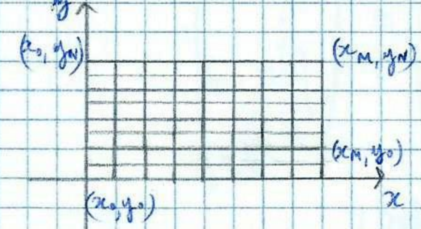
Il metodo delle differenze finite può anche essere applicato in due o tre dimensioni purché il dominio sia semplice (somma di rettangoli o di parallelepipedi). È infatti necessario discretizzare tramite griglia regolare. Consideriamo l'equazione di Poisson in due dimensioni:

$$\begin{cases} -\mu\, \Delta u(x,y) = f(x,y) & \text{in } \Omega \\ u|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases}$$

$\Omega \subset \mathbb{R}^2$, Ω regolare



In figura è rappresentato un esempio descritto dall'equazione di Poisson in due dimensioni: la piastra elastica in due dimensioni. Il passo di discretizzazione può essere differente sui due lati del dominio:



$(x_i, y_j) \qquad i=0,\dots,M \quad j=0,\dots,N$

$$\Rightarrow -\mu \Delta u(x_i, y_j) = f(x_i, y_j)$$

$$\Rightarrow -\mu \left[\partial_{xx} u(x_i, y_j) + \partial_{yy} u(x_i, y_j)\right] = f(x_i, y_j)$$

Nelle dimensioni superiori (al caso monodimensionale) eseguire la derivata parziale significa sezionare la superficie o il solido. Una delle due variabili viene tenuta fissa mentre si opera lungo l'altra. Per questo la derivata seconda in due dimensioni (rispetto a una sola delle due variabili) non differisce molto da quella monodimensionale:

1D $\quad u''(x_j) = \dfrac{u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}}{h^2} + \sigma(h^2)$

2D $\quad \partial_{xx} u(x_i, y_j) = \dfrac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{h^2} + \sigma(h^2) \qquad i=1,\dots,M-1$

$\quad\quad \partial_{yy} u(x_i, y_j) = \dfrac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{K^2} + \sigma(K^2) \qquad j=1,\dots,N-1$

$$\Rightarrow -\mu \left(\frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{K^2} \right) = f_{i,j}$$

Si ottiene quindi un sistema lineare $A_h V_h = F_h$ costituito da $(N-1)\cdot(M-1)$ equazioni, con A_h tridiagonale a blocchi:

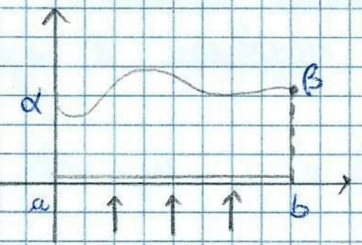
$$\left[\quad A_h \quad \right] \begin{pmatrix} u_{1,1} \\ u_{1,2} \\ \vdots \\ u_{1,N-1} \\ u_{2,1} \\ \vdots \\ u_{2,N-1} \\ \vdots \\ u_{M-1,1} \\ \vdots \\ u_{M-1,N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_h \end{pmatrix}$$

Passiamo ora all'equazione della diffusione (o del calore) monodimensionale (equazione di Fourier):

$$\begin{cases} \partial_t u(x,t) - \mu\, \partial_{xx} u(x,t) = f(x,t) & x \in [a,b] \\ u(0,x) = u_0(x) & x \in [a,b] \\ u(a,t) = \alpha & \forall t \in [0,T] \\ u(b,t) = \beta & \forall t \in [0,T] \end{cases}$$

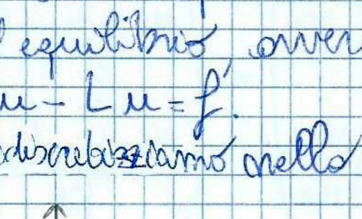
μ coefficiente di diffusione

Immaginando ancora una volta l'andamento della temperatura in una barra, possiamo descriverlo nel tempo:



Con l'equazione di Poisson si descrive l'equilibrio, con quella di Fourier il transitorio. Nel primo caso quindi α e $\beta \in \mathbb{R}$, $f=f(x)$, nel secondo $\alpha=\alpha(t)$ e $\beta=\beta(t)$, $f=f(x,t)$. Inoltre la soluzione dell'equazione ellittica $-Lu=f$ è la soluzione all'equilibrio, ovvero per $t\to\infty$, dell'equazione parabolica $\partial_t u - Lu = f$.

Semidiscretizziamo nello spazio ($j=1,\dots,M-1$):



$$u_j(t) := u(x_j,t) \qquad f_j(t) = f(x_j,t)$$

$$\partial_t u_j(t) - \mu \frac{u_{j-1}(t) - 2u_j(t) + u_{j+1}(t)}{h^2} = f_j(t)$$

$$x_j = x_0 + jh$$

Sostituendo, come di consueto, alla derivata prima la differenza finita centrata del II ordine si ottiene il sistema ($j=1,\dots,M-1$):

$$u_j'(t) = \mu \frac{u_{j-1}(t) - 2u_j(t) + u_{j+1}(t)}{h^2} + f_j(t)$$

Si tratta di $M-1$ equazioni differenziali ordinarie (ODE) accoppiate:

$$\begin{array}{ll} j=1 & \\ j=2 & \\ & \\ j=M-1 & \end{array} \begin{cases} u_1(t) = \mu \dfrac{u_0(t) - 2u_1(t) + u_2(t)}{h^2} + f_1(t) \\ u_2(t) = \mu \dfrac{u_1(t) - 2u_2(t) + u_3(t)}{h^2} + f_2(t) \\ \vdots \\ u_{M-1}(t) = \mu \dfrac{u_{M-1}(t) - 2u_M(t) + u_{M+1}(t)}{h^2} + f_M(t) \end{cases}$$

Per la risoluzione possiamo usare il Runge-Kutta di ordine 4 (ode45, esplicito) o il Crank-Nicolson di ordine 2 (ode15s). Usando l'esplicito si deve scegliere un passo temporale dt

sufficientemente piccolo, per l'implicito va bene $\forall\, dt$.
Con Eulero esplicito:

$$\frac{u_{n+1}-u_n}{dt} = F(t_n, u_n) \Rightarrow u_{j,n+1} = u_{j,n} + dt\,\frac{\mu}{h^2}\left(u_{j-1,n} - 2u_{j,n} + u_{j+1,n}\right) + f_{j,n}\,dt$$

Ad ogni iterazione si calcola la soluzione al passo successivo.
Con Eulero implicito:

$$\frac{u_{n+1}-u_n}{dt} = F(t_{n+1}, u_{n+1}) \Rightarrow u_{j,n+1} = u_{j,n} + dt\,\frac{\mu}{h^2}\left(u_{j-1,n+1} - 2u_{j,n+1} + u_{j+1,n+1}\right) + f_{j,n+1}\,dt$$

I pedici n e $n+1$ che compaiono dopo la virgola non sono da intendersi né come derivate né come indicatori della discretizzazione; esprimono semplicemente il passo iterativo.
Nel caso di Eulero implicito bisogna risolvere il seguente sistema lineare:

$$-\frac{dt\,\mu}{h^2}\,u_{j-1,n+1} + u_{j,n+1}\left(1 + 2\frac{dt\,\mu}{h^2}\right) - \frac{dt\,\mu}{h^2}\,u_{j+1,n+1} = u_{j,n} + dt \cdot f_{j,n+1}$$

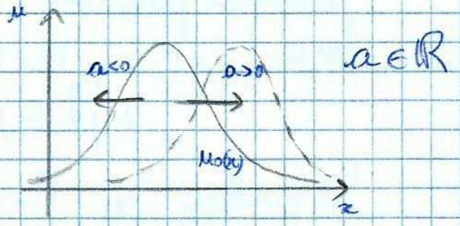
Ovvero, in forma matriciale:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & & 0 \\ -\frac{dt}{h^2}\mu & 1+2\frac{dt\mu}{h^2} & -\frac{dt\mu}{h^2} & \dots & & 0 \\ 0 & \dots & & & & 0 \\ 0 & \dots & -\frac{dt\mu}{h^2} & 1+2\frac{dt\mu}{h^2} & & -\frac{dt\mu}{h^2} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_{M-1} \\ u_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ u_{1,2} + f_{1,n+1}\,dt \\ \vdots \\ u_{M-1,2} + f_{M-1,n+1}\,dt \\ \beta \end{pmatrix}$$

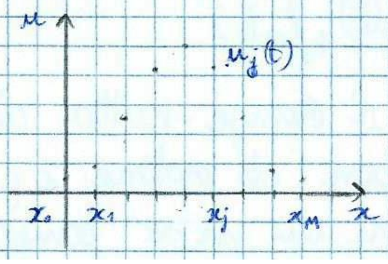
Per l'equazione del calore si prende generalmente $\mu\frac{dt}{h^2} \leq \frac{1}{2}$, condizione CFL (di Courant-Friedrichs-Lewy) per l'uso di metodi espliciti.

Concludiamo l'analisi delle differenze finite esaminando l'equazione del trasporto:

$$\begin{cases} \partial_t u(x,t) + a\,\partial_x u(x,t) = 0 & \text{in } [b,c] \\ u(x,0) = u_0(x) \\ + \text{c.b.} \end{cases}$$



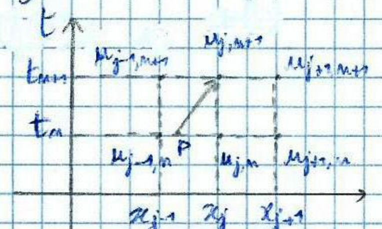
La soluzione esatta dell'equazione è $u(x,t) = u(x-at)$, con a velocità di propagazione positiva se il trasporto avviene verso destra, negativa se verso sinistra. La discretizzazione del dominio consiste nella semidiscretizzazione nello spazio:



$$u_j(t) := u(x_j, t) \qquad j = 1, \dots, M-1$$

$$\partial_t u_j(t) + a\,\partial_x u(x_j, t) = 0$$

La direzione di propagazione privilegiata e la velocità non infinita impongono una meditata scelta della differenza finita da sostituire alla derivata prima. Infatti quella centrata può portare a grandi oscillazioni che aumentano nel tempo. Non considera la direzione di propagazione privilegiata. È allora necessario usare la differenza finita decentrata a sinistra se $a>0$ (soluzione trasportata verso destra), quella decentrata a destra se $a<0$ (soluzione trasportata verso sinistra):



Se P va a destra serve il valore a sinistra, siamo tra $u_{j-1,n}$ e $u_{j,n}$ $(j=1,\dots,M-1)$;

•) $a>0 \quad \partial_t u_j(t) + a\,\dfrac{u_j(t)-u_{j-1}(t)}{h} = 0$

••) $a<0 \quad \partial_t u_j(t) + a\,\dfrac{u_{j+1}(t)-u_j(t)}{h} = 0$

L'ordine della differenza centrata sarebbe stato h^2, usando le decentrate siamo all'ordine h.

Usando inoltre Eulero esplicito $(n=0,1,\dots,N;\ j=1,\dots,M-1)$:

- $a>0 \quad u_{j,n+1} = u_{j,n} + dt \cdot a \cdot \dfrac{u_{j,n}-u_{j-1,n}}{h}$
- $a<0 \quad u_{j,n+1} = u_{j,n} + dt \cdot a \cdot \dfrac{u_{j+1,n}-u_{j,n}}{h}$

La condizione di stabilità CFL è:

$$|a| \cdot \frac{dt}{h} \leq \frac{1}{2} \Rightarrow dt \cong \frac{1}{2} \cdot \frac{h}{|a|}$$

Scelto h segue dt.