A hővezetési egyenlet numerikus megoldása többlépéses módszerrel és a megoldás kvalitatív tulajdonságai

Szakdolgozat

Írta: **Svantnerné Sebestyén Gabriella**

Alkalmazott Matematikus MSc szak

Témavezető:

Faragó István
tanszékvezető egyetemi tanár

Alkalmazott Analízis és Számításmatematikai Tanszék

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar

Budapest

2013

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés

A matematikában számos feladatban találkozhatunk lineáris algebrai egyenletrendszerekkel, parciális differenciálegyenletekkel. Ezek megoldása során egy sorozattal közelíthetjük a pontos megoldást.

A dolgozatban vizsgáljuk az

$$X_0(q)y^{n+1} = X_1(q)y^n + b^n, \qquad n = 0, 1, 2...., \tag{1}$$

alakú lineáris iterációt, ahol az y^n n = 0, 1, 2.... jelöli az n-dik közelítést, $X_0(q)$ és $X_1(q)$ egy q paramétertől függő adott mátrixok.

A dolgozatban, mindig feltesszük, hogy (1) konvergens. A továbbiakban pedig az egyszerűség kedvéért csak a homogén ($b^n = 0$) esettel foglalkozunk.

Alapvető problémánk, hogy egy konvergens

$$X_0(q)y^{n+1} = X_1(q)y^n \tag{2}$$

alakú iteráció mikor rendelkezik bizonyos kvalitatív tulajdonsággal.

Feltesszük, hogy az X_0 mátrix reguláris, így kifejezhető az

$$y^{n+1} = X_0^{-1}(q)X_1(q)y^n \tag{3}$$

közelítés.

Mint ismeretes, a homogén ($b^n = 0$) iteráció nullához való konvergenciájának szükséges és elégséges feltétele, hogy az $X_0^{-1}(q)X_1(q)$ konvergens mátrix legyen, azaz a spektrálsugarára teljesüljön a

$$\rho(X_0^{-1}(q)X_1(q)) < 1 \tag{4}$$

feltétel.

Tehát azt kell ellenőrizni, hogy az $X_0^{-1}(q)X_1(q)$ mátrix minden sajátértéke abszolút értékben az egységkörön belül helyezkedik el.
A továbbiakban vizsgáljuk, hogy tetszőleges $y^0 \geq 0$ mellett milyen feltételek mellett teljesül az $y^{n+1} \geq 0, \quad n = 0, 1, 2....$ reláció.
Ezt a tulajdonságot nevezzük globális nemnegativitásnak (GN):

1. Definíció. *Azt mondjuk, hogy a (3) lineáris iterációra teljesül a globális nemnegativitás, ha tetszőleges $y^0 \geq 0$ esetén, fennáll $y^{n+1} \geq 0$ reláció, az $n = 0, 1, 2...$ indexre.*

Azon q paraméterek összességét, melyek eleget tesznek a globális nemnegativitásnak, globális nemnegativitási tartománynak (GNT) nevezzük, azaz

$$GNT = \left\{q \in R : \forall y^0 \geq 0 \quad \Rightarrow \quad y^n \geq 0\right\} \tag{5}$$

Nyilvánvalóan a globális nemnegativitás egy elégséges feltétele, hogy az

$$X_0^{-1}(q) \geq 0, \tag{6}$$

$$X_1(q) \geq 0 \tag{7}$$

relációk teljesüljenek.

2. Definíció (M-mátrix). *Egy $A \in R^{p \times p}$ mátrixot M-mátrixnak nevezünk, ha megfelelő előjeleloszlású, azaz $A[i,j] \leq 0\ \forall i \neq j$ és létezik egy $g \in R^p$, hogy $g > 0$ és $Ag > 0$.*

Megmutatható, hogy minden M-mátrix reguláris és inverze nemnegatív. [Berman, Plemmons]

Így a (6) feltétel belátásának legegyszerűbb módja, ha igazoljuk, hogy X_0 M-mátrix.
A (6)-(7) feltételek mellett adható egy másik elégséges feltétel is, nevezetesen

$$X_0^{-1}(q)X_1(q) \geq 0. \tag{8}$$

A továbbiakban ezt nevezzük enyhe globális nemnegativitási feltételnek.
Nyilvánvalóan a (8) feltétel gyengébb a (6)-(7) feltételeknél.
(Ha (2) helyett az inhomogén (1) iterációt tekintjük, akkor a nemnegativitáshoz (8) mellett a (6) feltétel továbbra is szükséges.)

Az eddigi feltételek tehát arra vonatkoznak, hogy tetszőleges $y^0 \geq 0$ esetén mikor lesz az iteráció értéke nemnegatív. A feladatok megoldása során azonban adott az y^n érték. A továbbiakban azt fogjuk vizsgálni, hogy egy lépésben, az y^n vektor értékeitől függően mikor lesz nemnegatív y^{n+1}, azaz

$$y^{n+1} = X_0^{-1}(q)X_1(q)y^n \geq 0. \tag{9}$$

Ezt a tulajdonságot nevezzük lokális nemnegativitásnak (LN).

3. Definíció. *Azt mondjuk, hogy egy lineáris iterációra teljesül a lokális nemnegativitás, ha valamely rögzített $y^n \geq 0$ esetén fennáll $y^{n+1} \geq 0$ egyenlőtlenség.*

Azon q paraméterek összességét, melyek eleget tesznek a lokális nemnegativitásnak, lokális nemnegativitási tartománynak (LNT) nevezzük:

$$LNT = \left\{q_n \in R : ha\ \ y^n \geq 0 \quad \Rightarrow \quad y^{n+1} \geq 0\right\}. \tag{10}$$

A lokális nemnegativitás elégséges feltétele, ha teljesülnek az

$$X_0^{-1}(q) \geq 0, \tag{11}$$

$$X_1(q)y^n \geq 0 \tag{12}$$

egyenlőtlenségek.

Vezessük be az alábbi jelöléseket:

$$y_{min}^n = \min y_j^n, \tag{13}$$

$$y_{max}^n = \max y_j^n. \tag{14}$$

Ekkor (12) teljesülésének egy gyengébb elégséges feltétele felírható a következő módon.

Jelölje X_1^+ és X_1^- a következő mátrixokat

$$\left(X_1^+\right)_{ij} = \begin{cases} (X_1)_{ij}, & \text{ha}\,(X_1)_{ij} \geq 0 \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases} \tag{15}$$

$$\left(X_1^-\right)_{ij} = \begin{cases} (X_1)_{ij}, & \text{ha}\,(X_1)_{ij} < 0 \\ 0 & \text{egyébként.} \end{cases} \tag{16}$$

Ekkor $X_1 = X_1^+ + X_1^-$. Bevezetve az $e = [1, 1, \ldots, 1]^T$ jelölést, a (12) egy elégséges feltétele a következő:

$$\left(X_1^+\right)\left(y_{min}^n e\right) + \left(X_1^-\right)\left(y_{max}^n e\right) \geq 0. \tag{17}$$

Látható, ha $X_1 \geq 0$, akkor (17) automatikusan teljesül.

Nyilvánvalóan, hogy (17) felírható

$$y_{min}^n \left(X_1^+ e\right) + y_{max}^n \left(X_1^- e\right) \geq 0 \tag{18}$$

alakban. Ez azt jelenti, hogy az X_1 mátrix nemnegatív elemeinek összegének y_{min}^n-szeresének és az X_1 negatív részéinek összegének és y_{max}^n szorzatának nagyobbnak vagy egyenlőnek kell lenni, mint nulla.

Az eddig tárgyalt egylépéses lináris iteráció egy speciális esete az

$$X_0(q)y^{n+1} = X_1(q)y^n + X_2(q)y^{n-1} + \ldots + X_m(q)y^{n-(m-1)} \tag{19}$$

az m-lépéses lineáris iterációnak, ahol y^n az n-dik közelítés, $X_0(q), X_1(q), ..., X_m(q)$ ismét q paramétertől függő adott mátrixok.
Az X_0 mátrixról ismét feltesszük, hogy reguláris és a (19) iteráció konvergens.

A probléma a következő: ha $y^n \geq 0$, $y^{n-1} \geq 0, \ldots, y^{n-(m-1)} \geq 0$, akkor milyen feltételek mellett lesz $y^{n+1} \geq 0$.
Az egylépéses iterációhoz hasonlóan megvizsgálható a többlépéses rekurziók nemnegativitás megőrző feltételei.

4. Definíció. *Azt mondjuk, hogy egy többlépéses lineáris iterációra teljesül a globális nemnegativitás, ha tetszőleges $y^0 \geq 0$, $y^1 \geq 0$, $\ldots$, $y^{m-1} \geq 0$ esetén, fennáll $y^{n+1} \geq 0$, $n = m, m+1, m+2...$ esetén.*

Azon q paraméterek összességét, melyek eleget tesznek a globális nemnegativitásnak, globális nemnegativitási tartománynak (GNT) nevezzük, azaz

$$GNT = \left\{q \in R : \forall \ (y^0 \geq 0, \ \ y^1 \geq 0, \ \ \ldots \ \ y^{m-1} \geq 0) \Rightarrow \ \ y^{m+1} \geq 0\right\}. \quad (20)$$

A globális nemnegativitás egy elégséges feltétele:

$$X_0^{-1} \geq 0, \quad (21)$$

$$X_1 \geq 0, \ \ X_2 \geq 0, \ \ \ldots, \ \ X_m \geq 0. \quad (22)$$

A (21)-(22) feltételek helyett egy enyhébb feltétel is adható a nemnegativitásra:

$$X_0^{-1} \geq 0, \quad (23)$$

$$X_0^{-1}X_1 \geq 0, \ \ X_0^{-1}X_2 \geq 0, \ \ \ldots, \ \ X_0^{-1}X_m. \geq 0 \quad (24)$$

A továbbiakban ezt nevezzük enyhe globális nemnegativitási feltételnek.

5. Definíció. *Azt mondjuk, hogy egy többlépéses lineáris iterációra teljesül a lokális nemnegativitás, ha valamely $y^n \geq 0$, $y^{n-1} \geq 0$, $\ldots$, $y^{n-(m-1)} \geq 0$ esetén fennáll az $y^{n+1} \geq 0$ reláció.*

A továbbiakban jelölje q_n rögzített h paraméter és τ_n az n-dik lépésbeli paraméter hányadosát, azaz $q_n = \frac{\tau_n}{h^2}$. Azon q paraméterek összességét, melyek eleget tesznek a lokális nemnegativitásnak, nevezzük lokális nemnegativitási tartománynak (LNT).

$$LNT = \left\{q_n \in R : ha \ \ y^n \geq 0 \ \ \Rightarrow \ \ y^{n+1} \geq 0.\right\} \quad (25)$$

A lokális nemnegativitás elégséges feltétele

$$X_0^{-1}(q) \geq 0, \quad (26)$$

$$X_1(q)y^n + X_2(q)y^{n-1} + \ldots + X_m(q)y^{n-(m-1)} \geq 0. \tag{27}$$

Felhasználva a (13), (14) jelölést, ekkor a (27) teljesülésének egy elégséges feltétele felírható a következő módon.

Az X_r^+ és X_r^-, (r = 1, ...) a következő mátrixokat

$$\left(X_r^+\right)_{ij} = \begin{cases} (X_r)_{ij}\,, & \text{ha}\,(X_r)_{ij} \geq 0 \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases} \tag{28}$$

$$\left(X_r^-\right)_{ij} = \begin{cases} (X_r)_{ij}\,, & \text{ha}\,(X_r)_{ij} < 0 \\ 0 & \text{egyébként.} \end{cases} \tag{29}$$

Ekkor $X_r = X_r^+ + X_r^-$. Ekkor (27) egy elégséges feltétele a következő alakban adható meg:

$$\sum_{r=1}^{m} \left(X_r^+ y_{min}^{n-(r-1)} e + X_r^- y_{max}^{n-(r-1)} e \right) \geq 0. \tag{30}$$

A dolgozat következő részében ezeket a feltételeket szeretnénk alkalmazni a parciális differenciálegyenletek numerikus megoldásának nemnegativitás vizsgálatára.

2. Parciális differenciálegyenletek és numerikus megoldásának nemnegativitása

A parciális differenciálegyenletek számos biológiai, gazdasági stb. feladat modellezésére szolgálnak. Ezen feladatok analitikus megoldása képlettel általában nem adható meg, így megoldásukra numerikus módszereket alkalmazunk. Ekkor a közelítő megoldás meghatározásához az értelmezési tartományon egy rácshálót állítunk elő, majd a közelítő megoldást véges sok lépésben ezekben a rácspontokban határozzuk meg.
A differenciálegyenletek numerikus megoldása során fontos, hogy a közelítő megoldás tükrözze a folyamat kvalitatív tulajdonságait, melyek fizikai törvényszerűségeken alapulnak. A három legfontosabb ilyen a maximum-minimum elv, nemnegativitás-megőrzés és a maximumnormabeli kontraktivitás. Mi a továbbiakban a nemnegativitás-megőrzéssel foglalkozunk.

Tekintsük a következő feladatot:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(t,x)}{\partial t} - \Delta u(t,x) &= 0 \qquad \Omega_T = (0,T) \times \Omega - n, && (31)\\ u(t,x) &= g(t,x) \qquad \Gamma_T = (0,T) \times \partial\Omega - n, && (32)\\ u(0,x) &= u_0(x) \qquad \Omega - n. && (33) \end{aligned}$$

A fenti feladatot hővezetési egyenletnek nevezzük, mert például bizonyos fizikai egyszerűsítést feltételezve az $u(t,x)$ a t időpontban, x helyen vett hőmérsékletet fejezi ki.

A feladatban szereplő $u(t,x)$ az ismeretlen függvény, $\Omega \subset R^d$, $(d \geq 1)$ egy adott tartomány. A $\partial\Omega$ jelenti a tartomány megfelelően sima peremét, a Δ Laplace-operátor pedig a szokásos $\sum_{i=1}^{d} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$ operátort jelenti. Az $u_0 : \Omega \to R$ függvény a $t = 0$ időpontban vett kezdeti feltételt, a $g(t,x)$ függvény pedig a peremfeltételt fejezi ki.

A folytonos feladatra vonatkozó nemnegativitás-megőrzés tulajdonság a következőt jelenti.

A nemnegativitási elv azt mondja ki, hogy ha a hőmérséklet a tartomány peremén és kezdetben nemnegatív, akkor a hőmérséklet az adott tartományon nem lehet negatív.

6. Definíció (Nemnegativitás megőrzés (NP)). *Azt mondjuk, hogy az (31)-(33) feladatra érvényes az NP tulajdonság, ha tetszőleges nemnegatív g és u_0*

esetén a megoldás is nemnegatív.

A feladat numerikus megoldásánál az értelmezési tartományon egy rácshálót veszünk fel, majd ezekben a pontokban közelítjük a megoldást. A térbeli felosztást jelölje a h diszkretizációs paraméter. Ekvidisztáns rácsfelosztás esetén tehát az intervallumot h távolságokra osztjuk fel. Az időbeli felosztásra a τ diszkretizációs paratmétert használjuk. A megoldást a τ, 2τ... időpontokban közelítjük. Mind a $\partial_t u$ és Δu operátorokat véges differenciákkal helyettesítjük, majd egyenlővé téve őket a kapott egyenletrendszert megoldjuk. A rácshálón értelmezett közelítő megoldást jelölje $u_{h,\tau}$. A közelítő megoldás több tulajdonságát is vizsgálhatjuk.

Egy numerikus módszert konvergensnek nevezünk a (t^*, x^*) pontban, ha

$$\lim_{h\to 0,\tau\to 0} \left(y_j^n - u(t^*, x^*)\right) = 0. \tag{34}$$

ahol $t^* = n\tau$ és $x^* = jh$.

A (34) konvergencia h és τ szerinti rendjét a konvergencia rendjének nevezzük. Az előbbi tulajdonság mellett a diszkretizált feladatra hasonlóképpen definiálhatóak a kvalitatív tulajdonságok. Jelölje $u_{h,\tau}$, $g_{h,\tau}$, és u_{0_h} a folytonos feladatból kapott diszkretizált alakot.

7. Definíció (Diszkrét nemnegativitás megőrzés (DNP)). *Azt mondjuk, hogy a numerikus módszer DNP, ha $g_{h,\tau}, u_{0_h} \geq 0$, esetén $u_{h,\tau} \geq 0$.*

Vizsgáljuk meg az (31)-(33) feladatot egydimenziós esetben ($d = 1$).

A feladat numerikus megoldására alkalmazzauk az úgynevezett m-lépéses módszereket. Ez azt jelenti, hogy az m+1-dik időlépésbeli közelítést az azt megolőző m darab segítségével határozhatjuk meg.

A következő alakú m-lépéses iterációt kapjuk a diszkretizált feladatból

$$X_0(q)y^{n+1} = X_1(q)y^n + X_2(q)y^{n-1} + \ldots + X_m(q)y^{n-(m-1)}, \qquad n = 1, 2, 3.... \tag{35}$$

ahol y^n az n-edik időpontbeli közelítés, $X_0(q)$, $X_1(q)$ $\ldots$, $X_m(q)$ pedig a numerikus módszerekből kapott mátrixok.

A célunk pedig, hogy az így kapott iteráció nemnegativitását megvizsgáljuk. Ehhez felhasználhatjuk a lineáris iterációk nemnegativitás vizsgálatánál kapott eredményeket.

Mint láttuk a GN feltétele

$$X_0^{-1}(q) \geq 0, \tag{36}$$

$$X_1(q) \geq 0, \quad X_2(q) \geq 0, \quad \ldots, \quad X_m(q) \geq 0 \tag{37}$$

alakú.

Ezért egy enyhébb feltétel is adható, nevezetesen a

$$X_0^{-1}(q)X_1(q) \geq 0, \quad X_0^{-1}(q)X_2(q) \geq 0, \quad \ldots \quad X_0^{-1}(q)X_m(q) \geq 0 \tag{38}$$

feltételek.

Ugyanakkor a LN elégséges feltétele

$$X_0^{-1}(q) \geq 0, \tag{39}$$

$$X_1(q)y^n + X_2(q)y^{n-1} + \ldots + X_m(q)y^{n-(m-1)} \geq 0 \tag{40}$$

alakú.

A továbbiakban konkrét sémákat fogunk meg megvizsgálni, egylépéses illetve többlépéses módszereket.
A numerikus sémákból kapott $X_0(q), X_1(q), \ldots, X_m(q)$ mátrixok alapján pedig megvizsgáljuk a módszerek globális és lokális nemnegativitását.

3. Egylépéses módszerek

A legegyszerűbb egylépéses numerikus módszer a $\Theta-$módszer, ahol $\Theta \in [0,1]$ egy tetszőleges paraméter.

Ebben az esetben a diszkretizált alak

$$\frac{y_j^{n+1} - y_j^n}{\tau} = (1-\Theta)\,\frac{y_{j-1}^n - 2y_j^n + y_{j+1}^n}{h^2} + \Theta\frac{y_{j-1}^{n+1} - 2y_j^{n+1} + y_{j+1}^{n+1}}{h^2}, \tag{41}$$

ahol h, τ diszkretizációs paraméterek (a rácsháló lépésközei), az y_j^n pedig a közelítő megoldás az $u(n\tau, jh)$ értékhez.

A (37) képletben az X_0 és X_1 tridiagonális mátrixok a $\Theta-$ módszerre tehát

$$X_0 = tridiag\left[\frac{-\Theta\tau}{h^2}, 1 + \frac{2\Theta\tau}{h^2}, \frac{-\Theta\tau}{h^2}\right], \tag{42}$$

$$X_1 = tridiag\left[\frac{\tau}{h^2}(1-\Theta), 1 - \frac{2\tau}{h^2}(1-\Theta), \frac{\tau}{h^2}(1-\Theta)\right] \tag{43}$$

alakúak.

Bevezetve a $q = \frac{\tau}{h^2}$ jelölést, az X_0 és X_1 mátrixok felírhatóak az

$$X_0 = tridiag\left[-\Theta q, 1 + 2\Theta q, -\Theta q\right], \tag{44}$$

$$X_1 = tridiag\left[q(1-\Theta), 1 - 2q(1-\Theta), q(1-\Theta)\right] \tag{45}$$

alakban.

Vizsgáljuk meg a módszer tulajdonságait.

Mivel az X_0 és X_1 mátrixok egyenletesen kontinuális tridiagonális mátrixok, ezért a sajátvektor-rendszerük megegyezik, így kommutálnak. Másrészt a sajátértékük kiszámíthatók. Mindezek alapján az $X_0^{-1}X_1$ mátrix sajátértékei közvetlenül meghatározhatóak.
Ez alapján azt kapjuk, hogy a $\rho(X_0^1 X_1) < 1$ feltétel pontosan a

$$q = \begin{cases} \frac{1}{2(1-2\Theta)}, & \Theta \in [0, 0.5) \\ \text{tetszőleges} & \Theta \in [0.5, 1] \end{cases} \tag{46}$$

feltétel mellett teljesül.

Ez azt mutatja, hogy $\Theta \in [0.5, 1]$ esetén a konvergenciára nincs feltétel, tetszőleges q esetén konvergál.

A konvergencia rendjére, egy viszonylag egyszerű számolással megmutatható, hogy

$$\begin{cases} O(\tau + h^2), & \text{ha } \Theta \neq 0.5 \\ O(\tau^2 + h^2), & \text{ha } \Theta = 0.5. \end{cases} \tag{47}$$

A $\Theta-$ módszer globális nemnegativitás vizsgálatához a (36)-(37) feltételeket kell megvizsgálnunk.

Az X_0 hogy M-mátrix, mert a $g = e$ választás esetén teljesül az $X_0 g > 0$ feltétel és jó előjel-eloszlású.

Az X_1 mátrix nemnegativitására az

$$1 - 2q\,(1 - \Theta) \geq 0 \tag{48}$$

feltételt kapjuk.

Ez a

$$q \leq \frac{1}{2\,(1 - \Theta)}, \qquad \Theta \in [0, 1) \tag{49}$$

felső korlátot eredményezi.

Emellett $\Theta = 1$ esetén az (48) egyenlőtlenség minden q esetén teljesül.

A globális nemnegativitási tartományra tehát a

$$GNT = \left\{ q \in R : q \leq \frac{1}{2\,(1 - \Theta)}, \qquad \Theta \in [0, 1] \right\} \tag{50}$$

feltételt kapjuk.

Vizsgáljuk meg a lokális nemnegativitást. A definíció alapján a feltételünk

$$q\,(1 - \Theta)\, y_{j-1}^n + (1 - 2q\,(1 - \Theta))\, y_j^n + q\,(1 - \Theta)\, y_{j+1}^n \geq 0. \tag{51}$$

Becsüljük az egyes tagokat a

$$y_{min}^n = \min y_j^n, \tag{52}$$

$$y_{max}^n = \max y_j^n, \tag{53}$$

jelölések alkalmazásával.

Ekkor egy elégséges feltételt jelent a

$$2q(1 - \Theta)y_{min}^n + (1 - 2q(1 - \Theta))y_{max}^n \geq 0 \tag{54}$$

reláció.

Ezt alakítva az

$$y^n_{max} \geq 2q(1-\Theta)(y^n_{max} - y^n_{min}). \tag{55}$$

feltételt nyerjük. Az egyenlőtlenség vizsgálatánál az alábbi esetek lehetségesek.

1. Ha $y^n_{max} = y^n_{min}$, akkor az egyenlőtlenség nyilvánvalóan teljesül.

2. Ha $y^n_{max} > y^n_{min}$, akkor a következő feltételt kapjuk

$$q \leq \frac{y^n_{max}}{2(1-\Theta)(y^n_{max} - y^n_{min})}. \tag{56}$$

A lokális nemnegativitási tartományra tehát a

$$LNT = \left\{ q_n \in R : q_n \leq \frac{y^n_{max}}{2(1-\Theta)(y^n_{max} - y^n_{min})} \right\} \tag{57}$$

eredményt kaptuk.

A Θ paraméter különböző megválasztásával az egyes ismert módszereket és feltételeket kapjuk.

3.1. Explicit Euler módszer

Az explicit Euler módszer esetén a Θ paraméter értéke 0.

Ekkor a hővezetési egyenletet az alábbi alakú egyenlettel közelíthetjük

$$\frac{y^{n+1}_j - y^n_j}{\tau} = \frac{y^n_{j-1} - 2y^n_j + y^n_{j+1}}{h^2}. \tag{58}$$

Innen a következő alakú X_0 és X_1 mátrixokat kapjuk

$$X_0 = E, \tag{59}$$

$$X_1 = tridiag\left[\frac{\tau}{h^2}, 1 - \frac{2\tau}{h^2}, \frac{\tau}{h^2}\right]. \tag{60}$$

A $q = \frac{\tau}{h^2}$ jelölést használva, ezen mátrixok átírható a következő alakban:

$$X_0 = E, \tag{61}$$

$$X_1 = tridiag\left[q, 1-2q, q\right]. \tag{62}$$

Az explicit Euler módszer lokális approximációs hibájára a

$$O(\tau) + O(h^2) \tag{63}$$

rendet kapjuk. Azaz a módszer időben elsőrendben, a térbeli változó szerint másod- rendben konzisztens.

A módszer globális nemnegativitásának feltétele nyilvánvalóan

$$q \leq \frac{1}{2}. \tag{64}$$

teljesüljön.

Ezért érvényes az alábbi állítás.

1. Állítás. *Az explicit Euler módszer globális nemnegativitási tartománya* $GNT = \left\{q \in R : q \leq \frac{1}{2}\right\}$.

A globális nemnegativitás egy enyhébb feltétele az

$$X_0^{-1} X_1 \geq 0 \tag{65}$$

reláció teljesülése. Mivel ebben az esetben ez az $X_1 \geq 0$ feltételt jelenti, ezért az [1] eredményei alapján a

$$q \leq \frac{1}{2} \tag{66}$$

az enyhe globális nemnegativitási feltétele.

2. Állítás. *Az explicit Euler módszer enyhe globális nemnegativitási tartománya* *enyhe* $GNT = \left\{q \in R : q \leq \frac{1}{2}\right\}$.

A lokális nemnegativitás vizsgálatnál a következő egyenlőtlenséget kell megvizsgálnunk

$$q y_{j-1}^n + (1-2q) y_j^n + q y_{j+1}^n \geq 0. \tag{67}$$

Ha $q \leq \frac{1}{2}$, akkor az egyenlőtlenség fennáll, ugyanis minden együttható nemnegatív.
Ha $q > \frac{1}{2,}$ a tagokat becsülve a következő feltételt kapjuk a q paraméterre

$$q \leq \frac{y_{max}^n}{2(y_{max}^n - y_{min}^n)}. \tag{68}$$

3. Állítás. *Az explicit Euler módszer lokális nemnegativitási tartománya*

$$LNT = \left\{q_n \in R : q_n \leq \frac{y_{max}^n}{2(y_{max}^n - y_{min}^n)}\right\}. \tag{69}$$

3.2. Implicit Euler módszer

Az implicit Euler módszer esetén a Θ paraméter értéke 1.

Ekkor a séma

$$\frac{y_j^{n+1} - y_j^n}{\tau} = \frac{y_{j-1}^{n+1} - 2y_j^{n+1} + y_{j+1}^{n+1}}{h^2} \tag{70}$$

alakú.

Ezért az alábbi alakú tridiagonális mátrixokat kapjuk erre a módszerre:

$$X_0 = tridiag\left[-\frac{\tau}{h^2}, 1 + \frac{2\tau}{h^2}, -\frac{\tau}{h^2}\right], \tag{71}$$

$$X_1 = E. \tag{72}$$

Az implicit Euler módszer lokális approximációs hibája

$$O(\tau) + O(h^2). \tag{73}$$

Ezért ez a módszer időben elsőrendben, a térbeli változó szerint másod- rendben konzisztens.

Az implicit Euler módszer globális nemnegativitás vizsgálatánál mindkét tulajdonság teljesül, ugyanis X_0 szigorúan diagonálisan domináns mátrix, azaz M-mátrix.
További az X_1 mátrix minden eleme nemnegatív.

4. Állítás. *Az implicit Euler módszer globális nemnegativitási tartománya* $GNT = \{q \in R\}$.

Ez azt jelenti, hogy tetszőleges kezdeti érték és paraméter választás esetén a séma nemnegativitás megőrző lesz. Ezért a lokális nemnegativitás is teljesül a sémára tetszőleges paraméterek mellett. Mivel a globális nemnegativitásból következik az enyhe globális nemnegativitás és a lokális nemnegativitás, ezért a következő állításokat kapjuk.

5. Állítás. *Az implcit Euler módszer enyhe globális nemnegativitási tartománya: enyhe* $GNT = \{q \in R\}$.

6. Állítás. *Az implcit Euler módszer lokális nemnegativitási tartománya:* $LNT = \{q_n \in R\}$.

3.3. Crank-Nicholson séma

A Crank-Nicholson séma esetén a Θ paraméter értéke 0.5.

Ezért a séma

$$\frac{y_j^{n+1}-y_j^n}{\tau}=\frac{1}{2}\frac{y_{j-1}^n-2y_j^n+y_{j+1}^n}{h^2}+\frac{1}{2}\frac{y_{j-1}^{n+1}-2y_j^{n+1}+y_{j+1}^{n+1}}{h^2} \tag{74}$$

alakú.

A véges differenciás közelítésekből a következő mátrixokat kapjuk

$$X_0 = tridiag\left[-\frac{\tau}{2h^2}, 1+\frac{\tau}{h^2}, -\frac{\tau}{2h^2}\right], \tag{75}$$

$$X_1 = tridiag\left[\frac{\tau}{2h^2}, 1-\frac{\tau}{h^2}, \frac{\tau}{2h^2}\right], \tag{76}$$

azaz a szokásos $q=\frac{\tau}{h^2}$ jelöléssel

$$X_0 = tridiag\left[-\frac{q}{2}, 1+q, -\frac{q}{2}\right], \tag{77}$$

$$X_1 = tridiag\left[\frac{q}{2}, 1-q, \frac{q}{2}\right]. \tag{78}$$

Az Crank-Nicholson séma lokális approximációs hibája

$$O(\tau^2)+O(h^2). \tag{79}$$

Így a módszer az időbeli és térbeli változó szerint is másodrendben konzisztens.

A Crank-Nicholson séma esetén X_0 egy M-mátrix, ugyanis diagonálisan domináns mátrix, így a $g = e$ választás megfelelő.
Továbbá az X_1 mátrix minden elemének nemnegativnak kell lennie, amely

$$1-q \geq 0 \tag{80}$$

feltételt jelenti.

Átrendezve

$$q \leq 1 \tag{81}$$

feltételt kapjuk a q paraméterre.

7. Állítás. *A Crank-Nicholson séma globális nemnegativitási tartománya GNT* $= \{q \in R : q \leq 1\}$.

Ha az előző helyett egy enyhébb feltételt, nevezetesen a

$$X_0^{-1}X_1 \geq 0 \tag{82}$$

relációt vizsgáljuk, akkor az [1] eredménye szerint,

$$q \leq 2(2-\sqrt{2}) \approx 1.17 \tag{83}$$

a felső határ a q paraméterre. Így a következő állítást kapjuk.

8. Állítás. *A Crank-Nicholson séma enyhe globális nemnegativitási tartománya enyhe* $GNT = \{q \in R : q \leq 1,17\}$.

A séma lokális nemnegativitás vizsgálatánál a

$$\frac{1}{2}qy_{i-1}^n + (1-q)y_i^n + \frac{1}{2}qy_{i+1}^n \geq 0. \tag{84}$$

egyenlőtlenségt kell megvizsgálnunk.

Az egyes tagokat becsülve a q paratméterre a

$$q \leq \frac{y_{max}^n}{y_{max}^n - y_{min}^n}. \tag{85}$$

feltételt kapjuk.

9. Állítás. *A Crank-Nicholson séma lokális nemnegativitási tartománya*

$$LNT = \left\{ q_n \in R : q_n \leq \frac{y_{max}^n}{y_{max}^n - y_{min}^n} \right\}. \tag{86}$$

3.4. Számítógépes eredmények

Összefoglalásként a három egylépéses módszerre a következő eredményeket kaptuk.

	Rend időben	Rend térben	GNT	gyenge GNT
explicit Euler	1	2	$q \leq 0.5$	0.5
implicit Euler	1	2	$q \in R$	$q \in R$
Crank-Nicholson	2	2	$q \leq 1$	1.17

A módszerek számítógépes vizsgálatánál tekintsük az $I = (0, \pi)$ intervallumon adott feladatot

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad x \in I, \quad t \in (0, 10)$$
$$u(0, x) = \sin(x), \quad x \in I,$$
$$u(t, 0) = u(t, \pi) = 0, \quad t \in (0, 10).$$

A feladat megoldása az $u(t, x) = e^{-t} \sin(x)$ függvény. A számítógéges kísérletek során vizsgáljuk meg a megoldás explicit Euler, implicit Euler és Crank-Nicholson módszerrel való közelítését. Minden módszernél mérjük a közelítés minimum értéket, vagyis hogy a módszer nemnegativitás megőrző lesz-e az adott paraméterek mellett. A példák azt mutatják, hgoy a globális nemnegativitási feltétel és az enyhe globális nemnegativitási feltétel nem minden $y^0 \geq 0$ esetén szükséges feltétel.

1. Példa

Az alábbi táblázat a $h = \pi/5$, $\tau = 0.4$, azaz $q = \frac{\tau}{h^2} = 1.0132$ paraméterek mellett kapott eredményeket mutatja.
Az explicit Euler módszer esetén a GN és a gyenge GN szerint a q paraméterre a $q \leq \frac{1}{2}$ feltételt kaptuk.
A lokális nemnegativitás feltétele alapján azt kapjuk, hogy $q \leq \frac{0.9511}{2(0.9511-0.5878)} = 1.31$, azaz ebben az esetben nem szükséges a GN feltétele.

	Minimum érték	Nemnegativitás megőrzés
explicit Euler	0	teljesül
implicit Euler	0	teljesül
Crank-Nicholson	0	teljesül

	GNT	enyhe GNT	LNT
explicit Euler	0.5	0.5	1.31

2. példa

Az alábbi táblázat a $h = \pi/3$, $\tau = 2$, azaz $q = \frac{\tau}{h^2} = 1.8238$ paraméterek mellett kapott eredményeket mutatja.
A Crank-Nicholson séma esetén a GN szerint a q paraméterre a $q \leq 1$, az enyhe GN-ra pedig a $q \leq 1.17$ feltételt kaptuk.
A lokális nemnegativitás feltétele alapján azt kapjuk, hogy $q \leq \frac{0.8660}{0.8660-0.4330} = 2$, azaz ebben az esetben nem szükséges a GN feltétele.

	Minimum érték	Nemnegativitás megőrzés
explicit Euler	-0.7134	nem teljesül
implicit Euler	0	teljesül
Crank-Nicholson	0	teljesül

	GNT	enyhe GNT	LNT
Crank-Nicholson	1	1.17	2

Látható, hogy a globális nemnegativitás nem minden esetben ad pontos határt, így a paraméter értéke megnövelhető.

4. Többlépéses módszerek

Az eddigi egylépéses sémák esetén az y^{n+1}-et csak az y^n felhasználásával határoztuk meg. Többlépéses módszerek esetetén egy rögzített időpontbeli értéket azt megelőző m darab érték segítségével határozzuk meg. Ezeket m lépéses módszereknek nevezzük.
Így megnövelhetjük az időbeli derivált konzisztenciájának rendjét illetve magasabb rendű deriváltat is közelíthetünk.
A továbbiakban többlépéses módszereket és azok nemnegativitását fogjuk megvizsgálni. A dolgozatban három kétlépéses módszer szerepel, az explicit Richardson, MADE és a Du Fort-Frankel sémák. Mindegyik módszer a hővezetési egyenlet approximációjára három időréteget használ fel, de különböző módon.

4.1. Richardson séma

A Richardson séma az explicit Euler módszertől eltérően egy másodrendű approximációt használ az időbeli derivált közelítésére.

Így a hővezetési egyenlet az alábbi kétlépéses

$$\frac{y_j^{n+1} - y_j^{n-1}}{2\tau} = \frac{y_{j-1}^n - 2y_j^n + y_{j+1}^n}{h^2} \tag{87}$$

sémával közelíthető.

4.1.1. A Richardson séma konzisztenciája és stabilitása

A séma lokális approximációs hibája a következő módon számítható:

$$\begin{aligned} T_j^n &= \frac{1}{\tau}\left(u_j^{n+1} - u_j^{n-1}\right) - \frac{1}{h^2}\left(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n\right) = \frac{1}{2\tau}\left(\tau\frac{\partial u_j^n}{\partial t}\right. \\ &+ \left.\frac{\tau^2}{2}\frac{\partial^2 u_j^n}{\partial t^2} + \frac{\tau^3}{3!}\frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3} + \tau\frac{\partial u_j^n}{\partial t} - \frac{\tau^2}{2}\frac{\partial^2 u_j^n}{\partial t^2} + \frac{\tau^3}{3!}\frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3}\right) - \frac{1}{h^2}\left(h\frac{\partial u_j^n}{\partial x}\right. \\ &+ \left.\frac{h^2}{2}\frac{\partial^2 u_j^n}{\partial x^2} + \frac{h^3}{3!}\frac{\partial^3 u_j^n}{\partial x^3} + \frac{h^4}{4!}\frac{\partial^4 u_j^n}{\partial x^4} - h\frac{\partial u_j^n}{\partial x} + \frac{h^2}{2}\frac{\partial^2 u_j^n}{\partial x^2} - \frac{h^3}{3!}\frac{\partial^3 u_j^n}{\partial x^3} + \frac{h^4}{4!}\frac{\partial^4 u_j^n}{\partial x^4}\right) \end{aligned}$$

eredményt kapjuk.
A megfelelő tagok összevonásával

$$T_j^n = \frac{\partial u_j^n}{\partial t} + \frac{\tau^2}{3}\frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3} - \frac{\partial^2 u_j^n}{\partial x^2} + \frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 u_j^n}{\partial x^4} \tag{88}$$

eredményt kapjuk.

Mivel, a $\frac{\partial u_j^n}{\partial t} - \frac{\partial^2 u_j^n}{\partial x^2} = 0$, így a módszer konzisztenciájára tehát azt kapjuk, hogy mindkét változó szerint másodrendben konzisztens, továbbá ismeretes, hogy a módszer nem stabil.

4.1.2. A Richardson séma nemnegativitása

Mint láttuk a Richardson séma az $(n+1)-$dik időlépésben az $n-$dik és az $(n-1)-$dik időlépésben kapott értékeket használja fel.

Egy általános kétlépéses séma felírható az

$$X_0 y^{n+1} = X_1 y^n + X_2 y^{n-1} \tag{89}$$

mátrixos általános alakban.

Innen az $(n+1)-$dik időlépésbeli közelítés az

$$y^{n+1} = X_0^{-1} X_1 y^n + X_0^{-1} X_2 y^{n-1} \tag{90}$$

alakban.

A véges differenciás közelítéssel felírt sémát átrendezve kapjuk az

$$y_j^{n+1} = \frac{2\tau}{h^2} y_{j-1}^n - \frac{4\tau}{h^2} y_j^n + \frac{2\tau}{h^2} y_{j+1}^n + y_j^{n-1}. \tag{91}$$

alakot, alkalmazva a $q = \frac{\tau}{h^2} > 0$ jelölést, (91) átírható

$$y_j^{n+1} = 2q y_{j-1}^n - 4q y_j^n + 2q y_{j+1}^n + y_j^{n-1}. \tag{92}$$

alakban.

A térbeli diszkretizációnál legyen N a belső osztópontok száma, így az általános sémában az

$$X_0 = E, \qquad \left(X_0^{-1} = E\right) \tag{93}$$

$N \times N$ mátrixot kapjuk.

Az $n-$dik és $(n-1)$dik időlépésekhez tartozó mátrixok

$$X_1 = tridiag\,[2q, -4q, 2q] = 2q tridiag[1, -2, 1], \tag{94}$$

$$X_2 = E \tag{95}$$

alakúak.

A séma globális nemnegativitásának elégséges feltételéhez be kell látunk a (36) és (37) feltételeket.

Mivel $X_0^{-1} = E$, ezért a globális nemnegativitás szükséges feltétele, hogy

$$X_0^{-1} X_1 = X_1 \geq 0. \tag{96}$$

Ez nem teljesül, hiszem az X_1 diagonáljában negatív elemek vannak, tehát a Richardson séma nem lehet globálisan nemnegativitás megőrző.

Vizsgáljuk meg, hogy a nemnegativitás teljesíthető-e egy lépésben.
A lokális nemnegativáshoz a

$$2qy_{j-1}^n - 4qy_j^n + 2qy_{j+1}^n + y_j^{n-1} \geq 0. \tag{97}$$

egyenlőtlenséget kell belátnunk.

Innen a

$$2q\left(y_{j-1}^n - 2y_j^n + y_{j+1}^n\right) + y_j^{n-1} \geq 0 \tag{98}$$

egyenlőtlenséget kapjuk.

Ekkor két eset lehetséges:
1. Ha $y_{j-1}^n - 2y_j^n + y_{j+1}^n > 0$, teljesül minden j-re, akkor a (98) egyenlőtlenség minden esetben nemnegatív lesz.
2. Ha $y_{j-1}^n - 2y_j^n + y_{j+1}^n < 0$, akkor a

$$q_n \leq \frac{y_j^{n-1}}{2(y_{j-1}^n - 2y_j^n + y_{j+1}^n)} \tag{99}$$

feltételt nyerjük q_n-re.

10. Állítás. *Az explicit Richardson séma lokális nemnegativitási tartománya*

$$LNT = \left\{ q_n \in R : q_n \leq \frac{y_j^{n-1}}{2(y_{j-1}^n - 2y_j^n + y_{j+1}^n)} \right\} \tag{100}$$

A Richardson séma nem stabil, ennek javítására az ötlet, hogy az térbeli deriváltat nem ugyanazon időrétegen approximálj1uk.

4.2. MADE séma

A MADE (modified alternating directional explicit) séma a Richardson sémától abban különbözik, hogy a térbeli deriváltat különböző időrétegen approximálja, azaz

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t_n, x_j) \approx \frac{y_{j-1}^n - 2y_j^{n+1} + y_{j+1}^n}{h^2}. \tag{101}$$

Az Richardson sémában is alkalmazott elsőrendű derivált közelítésére pedig használjuk az

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{y_j^{n+1} - y_j^{n-1}}{2\tau} \tag{102}$$

másodrendű közelítést.

Ez alapján a hővezetési egyenletet az

$$\frac{y_j^{n+1} - y_j^{n-1}}{2\tau} - \frac{y_{j-1}^n - 2y_j^{n+1} + y_{j+1}^n}{h^2} = 0 \tag{103}$$

többlépéses sémával közelíthetjük.

4.2.1. A MADE séma konzisztenciája és stabilitása

A séma lokális approximációs hibájára

$$\begin{aligned}
T_j^n = {} & \frac{1}{\tau}\left(u_j^{n+1} - u_j^{n-1}\right) - \frac{1}{h^2}\left(u_{j+1}^n - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^n\right) = \frac{1}{2\tau}\left(\tau\frac{\partial u_j^n}{\partial t}\right. \\
& + \frac{\tau^2}{2}\frac{\partial^2 u_j^n}{\partial t^2} + \frac{\tau^3}{3!}\frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3} + \tau\frac{\partial u_j^n}{\partial t} - \frac{\tau^2}{2}\frac{\partial^2 u_j^n}{\partial t^2} + \left.\frac{\tau^3}{3!}\frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3}\right) - \frac{1}{h^2}\left(h\frac{\partial u_j^n}{\partial x}\right. \\
& + \frac{h^2}{2}\frac{\partial^2 u_j^n}{\partial x^2} + \frac{h^3}{3!}\frac{\partial^3 u_j^n}{\partial x^3} + \frac{h^4}{4!}\frac{\partial^4 u_j^n}{\partial x^4} - 2\tau\frac{\partial u_j^n}{\partial t} - 2\frac{\tau^2}{2}\frac{\partial^2 u_j^n}{\partial t^2} - 2\frac{\tau^3}{3!}\frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3} \\
& - 2\frac{\tau^4}{4!}\frac{\partial^4 u_j^n}{\partial t^4} - h\frac{\partial u_j^n}{\partial x} + \frac{h^2}{2}\frac{\partial^2 u_j^n}{\partial x^2} - \frac{h^3}{3!}\frac{\partial^3 u_j^n}{\partial x^3} + \left.\frac{h^4}{4!}\frac{\partial^4 u_j^n}{\partial x^4}\right)
\end{aligned}$$

eredmény kapjuk.
A megfelelő tagok összevonásával kapjuk

$$T_j^n = \frac{\partial u_j^n}{\partial t} + \frac{\tau^2}{3}\frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3} - \frac{\partial^2 u_j^n}{\partial x^2} + \frac{2\tau}{h^2}\frac{\partial u_j^n}{\partial t} + \frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 u_j^n}{\partial x^4} \tag{104}$$

az eredményt.

Mivel $\frac{\partial u_j^n}{\partial t} - \frac{\partial^2 u_j^n}{\partial x^2} = 0$, így a MADE séma konzisztenciájára tehát azt kaptuk, hogy

$$O(\tau^2) + O\left(\frac{\tau}{h^2}\right) + O(h^2), \tag{105}$$

melynek feltétele, hogy $\tau \approx h^3$ nagyságrendű legyen.
A MADE sémáról továbbá tudjuk, hogy stabil módszer. (Ez Fourier-analízissel belátható.)

4.2.2. A MADE séma nemnegativitása

A MADE séma kétlépéses séma. Ezért általános alakja

$$X_0 y^{n+1} = X_1 y^n + X_2 y^{n-1}. \tag{106}$$

Alkalmazva a $q = \frac{\tau}{h^2}$ jelölést, X_0, X_1 és X_1 a következő mátrixok

$$X_0 = diag[1+4q], \qquad X_0^{-1} = diag\left[\frac{1}{1+4q}\right], \tag{107}$$

$$X_1 = tridiag[2q, 0, 2q], \tag{108}$$

$$X_2 = E. \tag{109}$$

Formálisan a séma implicit, de a szokásos átírással a következő

$$y^{n+1} = X_0^{-1} X_1 y^n + X_0^{-1} \widetilde{X}_2 y^{n-1} \tag{110}$$

explicit alakot nyerjük.

A véges differenciás közelítéssel felírt sémát átrendezve az

$$(1+4q)\, y_j^{n+1} = 2q y_{j-1}^n + 2q y_{j+1}^n + y_j^{n-1} \tag{111}$$

alakot kapjuk.

A MADE séma globális nemnegativitásának biztosításához ismét vizsgáljuk meg a (36) és (37) feltételeket.

A (37) biztosításához annak kell teljesülnie, hogy X_1 minden eleme nemnegatív. Mivel

$$2q > 0 \tag{112}$$

tetszőleges parméterválasztás esetén, így X_1 minden eleme nemnegatív.

A MADE séma tehát tetszőleges q paraméter esetén nemnegativitás megőrző lesz.

4.3. Du Fort-Frankel séma

Tekintsünk egy másik véges differenciás közelítést a hővezetési egyenlet megoldására. A Du Fort-Frankel sémát 1953-ban publikálta Du Fort és Frankel.

Az időbeli derivált közelítésére a Richardson sémához hasonlóan az

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{y_j^{n+1} - y_j^{n-1}}{2\tau} \tag{113}$$

másodrendű approximációt alkalmazza.

A séma a térbeli derivált közelítására pedig három időréteget vesz figyelembe, nevezetesen

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{y_{j-1}^n - y_j^{n-1} - y_j^{n+1} + y_{j+1}^n}{h^2}. \tag{114}$$

A hővezetési egyenlet így az alábbi alakú többlépéses sémával közelíthetjük

$$\frac{y_j^{n+1} - y_j^{n-1}}{2\tau} - \frac{y_{j-1}^n - y_j^{n-1} - y_j^{n+1} + y_{j+1}^n}{h^2}. \tag{115}$$

4.3.1. A Du Fort-Frankel séma konzisztenciája és stabilitása

A Du Fort-Frankel séma lokális approximációs hibája

$$\begin{aligned}
T_j^n &= \frac{1}{2\tau}\left(u_j^{n+1} - u_j^{n-1}\right) - \frac{1}{h^2}\left(u_{j+1}^n - u_j^{n-1} - u_j^{n+1} + u_{j-1}^n\right) \\
&= \frac{1}{2\tau}\left(\tau\frac{\partial u_j^n}{\partial t} + \frac{\tau^2}{2}\frac{\partial^2 u_j^n}{\partial t^2} + \frac{\tau^3}{6}\frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3} + \tau\frac{\partial u_j^n}{\partial t} - \frac{\tau^2}{2}\frac{\partial^2 u_j^n}{\partial t^2}\right. \\
&\left.+ \frac{\tau^3}{6}\frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3}\right) - \frac{1}{h^2}\left(h\frac{\partial u_j^n}{\partial x} + \frac{h^2}{2}\frac{\partial^2 u_j^n}{\partial x^2} + \frac{h^3}{6}\frac{\partial^3 u_j^n}{\partial x^3} + \frac{h^4}{24}\frac{\partial^4 u_j^n}{\partial x^4} + \tau\frac{\partial u_j^n}{\partial t}\right. \\
&- \frac{\tau^2}{2}\frac{\partial^2 u_j^n}{\partial t^2} + \frac{\tau^3}{6}\frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3} - \frac{\tau^4}{24}\frac{\partial^4 u_j^n}{\partial t^4} - \tau\frac{\partial u_j^n}{\partial t} - \frac{\tau^2}{2}\frac{\partial^2 u_j^n}{\partial t^2} - \frac{\tau^3}{6}\frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3} \\
&\left.- \frac{\tau^4}{24}\frac{\partial^4 u_j^n}{\partial t^4} - h\frac{\partial u_j^n}{\partial x} + \frac{h^2}{2}\frac{\partial^2 u_j^n}{\partial x^2} - \frac{h^3}{6}\frac{\partial^3 u_j^n}{\partial x^3} + \frac{h^4}{24}\frac{\partial^4 u_j^n}{\partial x^4}\right)
\end{aligned}$$

eredményt kaptjuk, azaz a megfelelő tagok összevonásával a

$$T_j^n = \frac{\partial u_j^n}{\partial t} + \frac{\tau^2}{3}\frac{\partial^3 u_j^n}{\partial t^3} - \frac{\partial^2 u_j^n}{\partial x^2} + \frac{\tau^2}{h^2}\frac{\partial^2 u_j^n}{\partial t^2} + \frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 u_j^n}{\partial x^4} \tag{116}$$

alakot.
Mivel a $\frac{\partial u_j^n}{\partial t} - \frac{\partial^2 u_j^n}{\partial x^2}$, így a Du Fort-Frankel séma konzisztencia rendjére tehát

azt kaptuk, hogy

$$O(\tau^2) + O\left(\frac{\tau^2}{h^2}\right) + O(h^2), \tag{117}$$

melynek feltétele, hogy $\tau^2 \approx h^3$ nagyságrendű legyen.
A Du Fort-Frankel sémáról tovább ismeretes, hogy stabil módszer.

4.3.2. A Du Fort-Frankel séma nemnegativitása

A Du Fort-Frankel kétlépéses séma általános alakja

$$X_0 y^{n+1} = X_1 y^n + X_2 y^{n+1}, \tag{118}$$

innen kifejezve az (n+1)-dik időlépés értékét az

$$y^{n+1} = X_0^{-1} X_1 y^n + X_0^{-1} X_2 y^{n-1} \tag{119}$$

alakot kapjuk.

A véges differenciás közelítéssel felírt sémát átrendezve kapjuk az

$$y_j^{n+1}\left(1 + \frac{2\tau}{h^2}\right) = y_{j-1}^n \frac{2\tau}{h^2} + y_{j+1}^n \frac{2\tau}{h^2} + y_j^{n-1}\left(1 - \frac{2\tau}{h^2}\right) \tag{120}$$

alakot, amely átírható

$$y_j^{n+1}(1 + 2q) = 2q y_{j-1}^n + 2q y_{j+1}^n + y_j^{n-1}(1 - 2q) \tag{121}$$

alakban.

A térbeli diszkretizációnál a sémához a következő

$$X_0 = diag\,[1 + 2q]\,, \qquad X_0^{-1} = diag\left[\frac{1}{1+2q}\right] \tag{122}$$

mátrixokat kapjuk, az iteráció során tehát az alábbi mátrixokat nyerjük:

$$X_1 = tridiag\,[2q, 0, 2q]\,, \tag{123}$$

$$X_2 = diag\,[1 - 2q]\,. \tag{124}$$

A séma globális nemnegativitásához a (36) és (37) feltételeket kell megvizsgálunk.

A (37) szerint az X_1 és X_2 mátrix minden elemének nemnegatívnak kell lennie.

Az ehhez szükséges feltétel

$$1 - 2q \geq 0 \tag{125}$$

egyenlőtlenség, azaz

$$q \leq \frac{1}{2}. \tag{126}$$

A Du Fort-Frankel séma globális nemnegativitási tartományára tehát a

$$\text{GNT} = \left\{ q \in R : q \leq \frac{1}{2} \right\} \tag{127}$$

eredményt kaptuk.

A lokális nemnegativitás teljesüléséhez az alábbi egyenlőtlenséget kell

$$2qy_{j-1}^{n} + 2qy_{j+1}^{n} + (1-2q)y_j^{n-1} \geq 0. \tag{128}$$

megvizsgálnunk.

Innen a

$$2q\left(y_{j-1}^{n} + y_{j+1}^{n} - y_j^{n-1}\right) + y_j^{n-1} \geq 0 \tag{129}$$

egyenlőtlenséget kapjuk.

Becsüljük a tagokat az alábbi módon

$$y_{min}^{n} = \min y_j^{n} \tag{130}$$

$$y_{max}^{n-1} = \max y_j^{n-1}. \tag{131}$$

Ekkor a

$$4qy_{min}^{n} - 2qy_{max}^{n-1} + y_{max}^{n-1} \geq 0 \tag{132}$$

elégséges feltételt nyerjük.

A (128) egyenlőtlenségből kapjuk, ha

$$q \leq \frac{1}{2}, \tag{133}$$

akkor (129) mindig teljesül.

Tegyük fel, hogy $q > \frac{1}{2}$.
Ekkor (129) egy elégséges feltétele

$$4qy_{min}^{n} + (1-2q)y_{max}^{n-1} \geq 0. \tag{134}$$

A (128) átalakívásával kapjuk a

$$2q\left(2y_{min}^{n} - y_{max}^{n-1}\right) + y_{max}^{n-1} \geq 0 \tag{135}$$

alakot.

A (128) egyenlőtlenség vizsgálatánál két eset lehetséges.
1. Ha $2y_{min}^n - y_{max}^{n-1} \geq 0$, azaz $2y_{min}^n \geq y_{max}^{n-1}$, akkor teljesül a nemnegativitás megőrzés.

2. Ha $2y_{min}^n < y_{max}^{n-1}$, akkor

$$q \leq \frac{y_{max}^{n-1}}{4y_{max}^{n-1} - 2y_{min}^n} \tag{136}$$

feltételt kapjuk.

Tehát, ha $2y_{min} \geq y_{max}$, akkor minden lépésében nemnegativitás megőrző sémát kapunk.

4.4. Összefoglalás

A többlépéses módszerek közül három kétlépéses módszert vizsgáltunk meg.
A MADE séma időben és térben is másodrendű séma, de ugyanakkor instabil.
A nemnegativitás vizsgálatánál azt az eredményt kaptuk, hogy globálisan nem lehet nemnegativitás megőrző, de egy lépésben igen.
A lokális nemnegativitásra a

$$q_n \leq \frac{y_j^{n-1}}{2(y_{j-1}^n - 2y_j^n + y_{j+1}^n)} \tag{137}$$

feltételt kaptuk.
Az instabilitás javítására a következő vizsgált séma, a MADE séma volt. A módszer érdekessége, hogy a térbeli approximációhoz több időréteget is felhasznál. A nemnegativitás során azt az eredményt kaptuk, hogy tetszőleges q esetén teljesül a globális nemnegativitás eredménye, ebből következik, hogy a lokális nemnegativitás is.
Az utolsó vizsgált séma, a Du Fort-Frankel séma. Az térbeli approximációhoz három időréteget is felhasznál, tovább stabil séma. A nemnegativitás során a globális nemnegativitásra a

$$q \leq \frac{1}{2} \tag{138}$$

feltételt kaptuk.
A módszer lokális nemnegativitási tartománya

$$q_n \leq \frac{y_{max}^{n-1}}{4y_{max}^{n-1} - 2y_{min}^n} \tag{139}$$

eredményt kaptuk.

4.5. Számítógépes eredmények

Összefoglalásként a három többlépéses módszerre a következő eredményeket kaptuk.

	Globális nemnegativitási tartomány
explicit Richardson	$\oslash$
MADE	$q \in R$
Du Fort-Frankel	$q \leq \frac{1}{2}$

A módszerek számítógépes vizsgálatánál tekintsük az $I = (0, 3)$ intervallumon adott feladatot

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= x, \quad x \in I, \quad t \in (0,1) \\ u(0,x) &= (x-1.5)^2 \quad x \in I, \\ u(t,0) &= 2.25 + 2t \quad t \in (0,1), \\ u(t,3) &= 2.25 + 5t, \quad t \in (0,1). \end{aligned}$$

A feladat megoldása az $u(t,x) = (x-1.5)^2 + (x+2)t$ függvény. A számítógéges kísérletek során vizsgáljuk meg a megoldás explicit Richardson, MADE és Du Fort-Frankel módszerekkel való közelítését. Minden módszernél a közelítés minimum értéket, vagyis hogy a módszer nemnegativitás megőrző lesz-e az adott paraméterek mellett. A példák azt mutatják, hogy a globális nemnegativitási feltétel nem minden $y^0 \geq 0$ esetén szükséges feltétel.

1. Példa

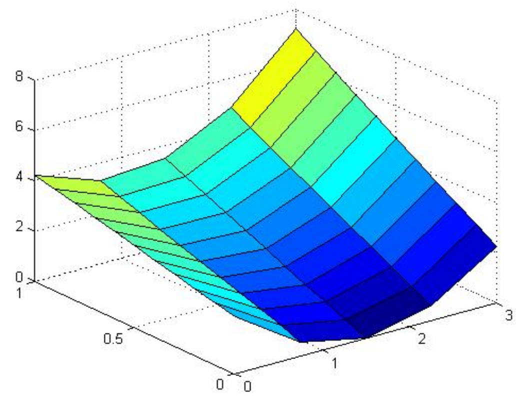
Az alábbi táblázat a $h = 0.75$, $\tau = 0.1$, azaz $q = 0.13$ paraméterek mellett kapott eredményeket mutatja. Az explicit Richardson sémára azt kaptuk, hogy minden $y^0 \geq 0$ mellett nem lesz nemnegativitás megőrző.
A $h = 0.75$ paraméter mellett, a

$$[2.25, 0.5625, 0, 0.5625, 2.25] \tag{140}$$

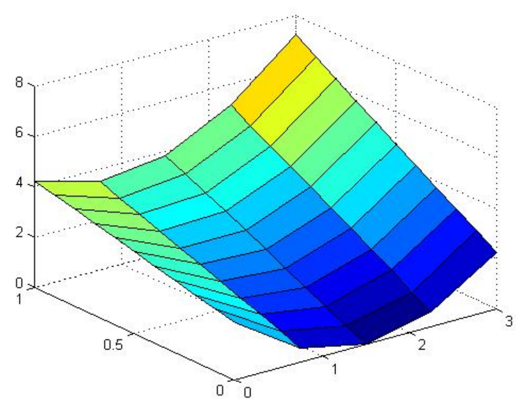
kezdeti vektort kapjuk.
A lokális nemnegativitás feltétele alapján azt kaptuk a kezdeti vektorból, hogy a nemnegativitás mégis teljesül, ugyanis fennáll, hogy $y^0_{j-1} - 2y^0_j + y^0_j > 0$.

	Minimum érték	Nemnegativitás megőrzés
explicit Richardson	0	teljesül
MADE	0	teljesül
Du Fort-Frankel	0	teljesül

A következő ábrák a kapott eredményeket szemléltetik.



1. ábra. Az ábra az explicit Richardson sémával kapott közelítő megoldást ábrázolja.



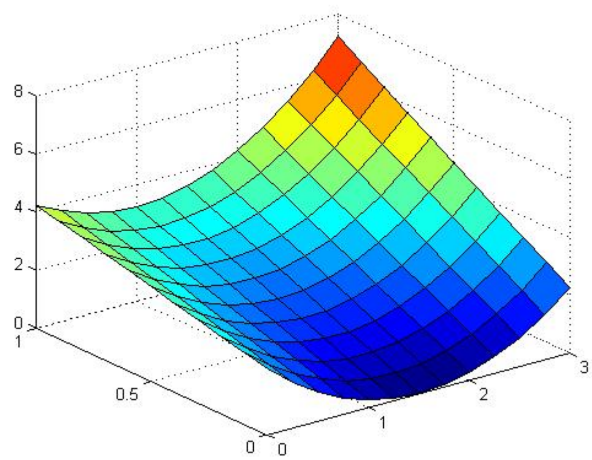
2. ábra. Az ábra a Du Fort-Frankel sémával kapott közelítő megoldást ábrázolja.

2. Példa

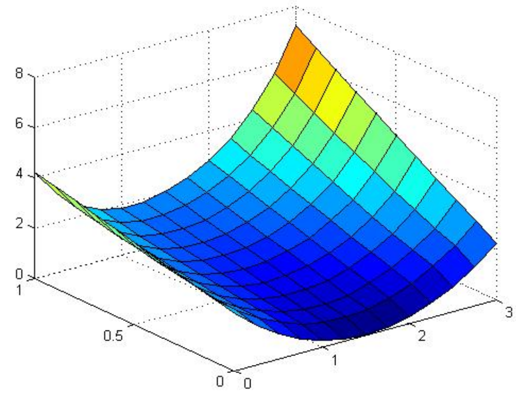
Az alábbi táblázat a $h = 0.25$, $\tau = 0.1$, azaz $q = 1.6$ paraméterek mellett kapott eredményeket mutatja.
Az Du Fort-Franekl sémára azt kaptuk, hogy minden $y^0 \geq 0$ mellett nem lesz nemnegativitás megőrző. A feltétel a q paraméterre: $q \leq \frac{1}{2}$.
A lokális nemnegativitás feltétele alapján azt kaptuk a kezdeti vektorból, hogy $2y^1_{min} - y^0_{max} > 0$, azaz teljesül rá a nemnegativitás megőrzés.

	Minimum érték	Nemnegativitás megőrzés
explicit Richardson	0	teljesül
MADE	0	teljesül
Du Fort-Frankel	0	teljesül

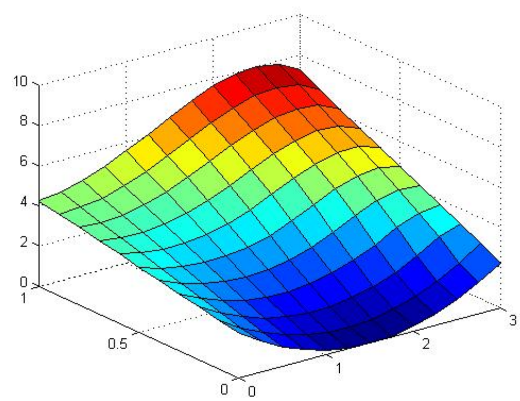
A következő ábrák a kapott eredményeket szemléltetik.



3. ábra. Az ábra az explicit Richardson sémával kapott közelítő megoldást ábrázolja.



4. ábra. Az ábra a MADE sémával kapott közelítő megoldást ábrázolja.



5. ábra. Az ábra a Du Fort-Frankel sémával kapott közelítő megoldást ábrázolja.

5. Összefoglalás

A dolgozatban az

$$X_0(q)y^{n+1} = X_1(q)y^n + b^n \tag{141}$$

alakú iteráció nemnegativitását viszgáltuk meg.

Különbséget tettünka globális és lokális nemnegativitás mellett. A globális nemnegativitás azt jelentette, hogy tetszőleges nemnegatív kezdeti érték esetén az iteráció nemnegatív lesz. A lokális nemnegativitás pedig konkrét kezdeti értékek esetén egy lépésben biztosítja a negmnegativitást. Mindkét esetben adhatóak elégséges feltételek.

A kapott eredményeket pedig a hővezetési egyenlet egy kvalitatív tulajdonsága, a nemnegativitás megőrzés megvizsgálásához használtuk fel. Azt szerettük volna belátni, hogy, milyen feltételek mellett őrzi meg a numerikus megoldás is ezt a tulajdonságot.

A közelítő megoldást egylépéses és többlépéses módszerek segítségével vizsgáltuk meg.
Az egylépéses módszerek esetén a $\Theta-$módszert vizsgáltuk meg. A többlépéses módszerek közül három kétlépéses sémát: explicit Richardson, MADE és a Du Fort-Frankel módszereket. A módszerek közötti különbség, hogy az időrendei deriváltat más időrétegeken approximálja.

A numerikus megoldást számítógépes eredmények szemléltetik. Eredményként azt kaptuk, hogy konkrét kezdeti vektorok esetén nem minden esetben szükségesek a globális nemnegativitási feltételek. A lokális nemnegativitási feltételek segítségével új elégséges feltételeket kaphatunk a nemnegativitásra.
További tervünk, hogy a nemnegativitási feltételt nem a tetszőleges $u_0(x)$ illetve $g(t,x)$ kiegészítő feltétlet leíró függvényekre határozzuk meg, hanem ezen adott függvények valamely speciális tulajdonsága mellett.

Köszönetnyilvánítás

Szeretném megköszönni témavezetőmnek, Faragó Istvánnak a sok türelmet és segítséget, hogy mindig tudott rám időt szakítani és hasznos tanácsokat adni. Hálás vagyok Szüleimnek, Nagybátyámnak és férjemnek: Viktornak, hogy mindig mindenben támogattak és segítettek.

Irodalomjegyzék

[1] Faragó István, Horváth Róbert: A review of reliable models for three-dimensional linear parabolic problems, Int. J. Numer. Meth. Engng., 70 (2007) 25-55.

[2] Faragó István, Horváth Róbert: Numerikus módszerek, Typotex, 2011.

[3] Horváth Róbert, Izsák Ferenc, Karátson János: Parciális differenciálegyenletek numerikus módszerei számítógépes alkalmazásokkal, 2013

[4] Abraham Bouwer: The Du Fort and Frankel fininte difference shceme applied to and adapted for a class of finance problems, 2008

[5] Abraham Berman, Robert J. Plemmons: Nonnegative Matrices in the Mathematical Sciences, Academic Press, 1979

Nyilatkozat

Név:

ELTE Természettudományi Kar, szak:

Neptun azonosító:

Szakdolgozat cím:

A szakdolgozat szerzőjeként fegyelmi felelősségem tudatában kijelentem, hogy a dolgozatom önálló munkám eredménye, saját szellemi termékem, abban a hivatkozások és idézések standard szabályait következetesen alkalmaztam, mások által írt részeket a megfelelő idézés nélkül nem használtam fel.

Budapest,

a hallgató aláírása