

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
ALKALMAZOTT ANALÍZIS ÉS SZÁMÍTÁSMATEMATIKAI
TANSZÉK

DIFFERENCIÁLEGYENLETEK DISZKRETIZÁCIÓI ÉS
NEMNEGATIVITÁSI TULAJDONSÁGAIK

MSc Diplomamunka

Készítette:

Kiss Franciska

Alkalmazott matematika mesterszakos hallgató

Témavezető:

Faragó István

Egyetemi tanár



Budapest

2018

Tartalomjegyzék

Bevezetés	3
1. Elméleti összefoglaló	4
1.1. A Laplace-operátor és a gyenge alak	4
1.2. A maximum - minimum elv parabolikus egyenletre	5
1.3. M-mátrixok	7
1.4. Lineáris többlépéses módszerek	8
2. A feladat bevezetése	16
2.1. A hővezetési egyenlet bevezetése [1]	16
2.2. A numerikus megoldás	19
3. Nemnegativitás öröklődése - Egylépéses módszerek	22
3.1. Véges elemes módszerrel	23
3.2. Véges differenciák módszere	25
4. Nemnegativitás öröklődése – LTM	27
4.1. BDF2 módszer	27
4.2. BDF2 módszer speciális kezdeti közelítéseken	30
4.3. Numerikus kísérletek és sejtések	32
4.4. A numerikus kísérletek tapasztalatainak elméleti belátása	34
Összegzés	37
Irodalomjegyzék	38
Köszönetnyilvánítás	39

Bevezetés

A hővezetés az a jelenség, amely során egy testben a magasabb hőmérsékletű helyről az energia alacsonyabb hőmérsékletű helyre áramlik. Az úgynevezett hővezetési egyenlet alatt azt a matematikai modellt értjük, amely a fenti jelenség leírására szolgál.

A hővezetési egyenletnek olyan kvalitatív tulajdonságai vannak, melyek valójában fizikai tulajdonságokat takarnak, a matematikai modellnek pedig fontos ezeket tükröznie. Ezért a numerikus megoldásnak az a legalapvetőbb kritériuma, hogy ezek a kvalitatív tulajdonságok öröklődjenek. Egyik legfontosabb tulajdonság a nemnegativitás, azaz ha a kezdeti függvényünk nemnegatív, akkor a megoldás is nemnegatív lesz. A fizikában nagyon sok modellben, például az abszolút hőmérséklet esetében, a megoldás nem lehet negatív.

A dolgozat első részében lefektetjük azokat az elméleti alapokat, melyeket a későbbiekben felhasználunk. Bevezetjük a maximum-minimum elvet parabolikus egyenletekre, definiáljuk a Laplace-operátort és a gyenge alakot. Felírjuk az M -mátrixok definícióját és a rájuk vonatkozó legfontosabb tételeket, illetve bevezetjük a lineáris többlépéses módszereket. Az ezt követő fejezetben felírjuk a feladatot, azaz magát a hővezetési egyenletet mellékfeltételekkel, majd a numerikus megoldást, amivel a fenti feladatot közelítjük.

Ezután rátérünk a már elért eredmények tárgyalására az egy lépéses módszerek témakörében. Felírjuk azokat a szükséges és elégséges feltételeket, amelyek mellett a θ -módszerre teljesül a nemnegativitás öröklődése. Ezt először véges elemes esetben, majd a véges differenciák módszerrel tesszük meg és a térbeli osztásrészek függvényében megadjuk a nemnegativitás megőrzését biztosító idődiszkretizációs lépésköz nagyságát.

Az utolsó fejezetben rátérünk a nemnegativitás öröklődésének vizsgálatára lineáris többlépéses módszerek keretein belül, ahol a kétlépéses BDF (Backward Differentiation Formula) módszert vizsgáljuk és a módszerre készített numerikus kísérlet segítségével felírjuk sejtéseinket a feltételekre. Ezután a sejtéseinket fogjuk belátni, majd összegezzük eredményeinket.

A dolgozatot összefoglalással és az irodalomjegyzék megadásával zárjuk.

1. fejezet

Elméleti összefoglaló

Ebben a fejezetben bevezetjük azokat a szükséges fogalmakat, tételeket, melyekre a dolgozat későbbi fejezeteiben hivatkozni fogunk.

1.1. A Laplace-operátor és a gyenge alak

1.1. Definíció. Legyen $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ egy korlátos tartomány, $h \in C^2(\Omega)$ adott függvény. A Laplace-operátor jelenti a h függvény tiszta második parciális deriváltjainak összegét, azaz

$$\Delta h = \sum_{j=1}^d \frac{\partial^2 h}{\partial x_j^2}.$$

A hővezetési jelenség leírására szolgáló feladat klasszikus megoldása mellett szükségünk lesz a gyenge alak felírására is. Ez egydimenzióban a következőt jelenti. Tekintsük a

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad x \in (0, 1), \quad t > 0 \quad (1.1)$$

egyenletet, melynek klasszikus megoldása az $u(x, t) \in C^{2,1}(Q_T)$. (A Q_T tér-idő tartományt később pontosan definiáljuk.) Legyen

$$v \in C_0^1(0, 1) := \{v \in C^1(0, 1) \cap C[0, 1], v(0) = v(1) = 0\}$$

az úgynevezett próbafüggvény.

Ezzel a próbafüggvénnyel beszorozzuk az egyenletünket és integráljuk $(0, 1)$ intervallumon, akkor a következő alakot kapjuk:

$$\int_0^1 \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) \cdot v(x) dx = \int_0^1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) \cdot v(x) dx, \quad \forall v \in C_0^1(0, 1). \quad (1.2)$$

Ha u klasszikus megoldása a (1.1) egyenletnek, akkor minden $v \in C_0^1(0, 1)$ próbafüggvényre teljesül (1.2). Parciális integrálás segítségével a jobb oldalra az

$$\int_0^1 \frac{\partial u}{\partial x^2}(x, t) \cdot v(x) dx = \left[\frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \cdot v(x) \right]_{x=0}^1 - \int_0^1 \frac{\partial u}{\partial x} \cdot v'(x) dx$$

egyenlőtlenséget kapjuk. Itt az első tag kinullázódik, hiszen a v függvényt úgy választottuk meg, hogy az $x = 0$ és az $x = 1$ pontban nulla értéket vegyen fel. Így az (1.2) integrálegyenlet a

$$\int_0^1 \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) \cdot v(x) dx = - \int_0^1 \frac{\partial u}{\partial x} \cdot v'(x) dx, \quad \forall v \in C_0^1(0, 1) \quad (1.3)$$

alakban írható fel. Tehát olyan $u(x, t)$ függvényt keresünk, amely egy tetszőleges t rögzített érték esetén minden $v \in C_0^1(0, 1)$ mellett az (1.3) egyenletet is kielégíti. Ezt az alakot nevezzük gyenge alaknak, és az ilyen tulajdonságú u függvényt pedig gyenge megoldásnak. Ha u klasszikus megoldása az egyenletnek és (1.3) teljesül, akkor u gyenge megoldás is. Ekkor elegendő, ha minden rögzített t esetén x -ben egyszer folytonosan deriválható és folytonos, t -ben pedig folytonosan deriválható a függvény. Ezt Szoboljev-térnek nevezzük és $H_0^1(0, 1)$ -gyel jelöljük.

Ha $u \in H_0^1$ -beli gyenge megoldás és elég sima, akkor klasszikus megoldás is.

1.2. Megjegyzés. Több dimenzióban hasonlóképp tudjuk definiálni a gyenge megoldást. Ebben az esetben a gyenge alak a divergencia és a gradiens segítségével, a Green-, és a Gauss – Osztrogradszkij-tétellel írható fel [1].

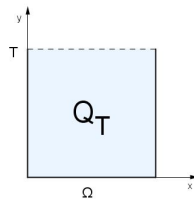
1.2. A maximum - minimum elv parabolikus egyenletre

Legyen $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ korlátos, sima peremű tartomány, $T \in \mathbb{R}^+$ adott szám, és jelölje

$$Q_T := \{(x, t), x \in \Omega, t \in (0, T]\} = \Omega \times (0, T]$$

$\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^+$ -beli halmazt. Ennek parabolikus határa a következő halmaz:

$$\Gamma_T := \{(x, 0), x \in \bar{\Omega}\} \cup \{(x, t), x \in \partial\Omega, t \in [0, T]\}.$$



A következő fejezetekben bevezetjük a hővezetési egyenletet, mely a vizsgált hővezetési jelenséget modellezi. Ebből következik, hogy vannak olyan tulajdonságai, melyeket a numerikus módszerünknek örökölnie szükséges.

Az egyik legfontosabb ilyen tulajdonság a nemnegativitás megőrzése, azaz ha a megoldásfüggvény a parabolikus peremen nemnegatív, akkor ebből következik, hogy $u(x, t) \geq 0$ Q_T -n. Ennek belátásához a maximum-elvet használjuk, amely a következőt mondja ki:

1.3. Tétel. (Maximum-elv) Tegyük fel, hogy $u \in C^{2,1}(Q_T) \cap C(\overline{Q_T})$ -beli olyan függvény, amelyre

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = 0, \quad (x, t) \in Q_T. \quad (1.4)$$

Ekkor az u függvény a maximumát a parabolikus peremen felveszi, azaz

$$\max_{\overline{Q_T}} u(x, t) = \max_{\Gamma_T} u(x, t).$$

1.4. Tétel. (Minimum-elv) Az előző tétel feltételeivel az u függvény minimumát a parabolikus peremen veszi fel, azaz

$$\min_{\overline{Q_T}} u(x, t) = \min_{\Gamma_T} u(x, t). \quad (1.5)$$

A következőkben bebizonyítjuk a tételt, majd megmutatjuk, hogy ennek következményeként a minimum-elv is közvetlenül belátható.

Bizonyítás. (Maximum-elv) Ha u függvény konstans, akkor az állítás nyilvánvalóan igaz. Tehát tegyük fel, hogy u nem konstans függvény. Jelölje $M := \max_{\Gamma_T} u$.

Indirekt módon tegyük fel, hogy létezik olyan $(x_0, t_0) \in Q_T$ pont, amelyre teljesül az

$$u(x_0, t_0) = \mu > M \quad (1.6)$$

egyenlőtlenség. Vezessük be a következő függvényt:

$$v(x, t) := u(x, t) + \frac{\mu - M}{2T} \cdot (t_0 - t).$$

Ez a függvény $C^{2,1}(Q_T) \cap C(\overline{Q_T})$ -beli, azaz a Weierstrass-tétel értelmében létezik $\max_{\overline{Q_T}} v$. Mivel minden $(x, t) \in \Gamma_T$ esetén

$$v(x, t) \leq M + \frac{\mu - M}{2} = \frac{\mu + M}{2} < \mu,$$

és $v(x_0, t_0) = u(x_0, t_0) = \mu$, ezért v a maximumát nem Γ_T -n veszi fel, azaz csak Q_T -n veheti fel. Ennek a maximumnak legyen $(x^*, t^*) \in Q_T$ a helye. Mivel ez egyben lokális szélsőérték is

(hiszen belső pont), ezért

$$\frac{\partial v}{\partial t}(x^*, t^*) = 0 \quad \text{és} \quad \frac{\partial^2 v}{\partial x_i^2}(x^*, t^*) \leq 0 \quad \forall i \text{ esetén,}$$

azaz $\Delta v(x^*, t^*) \leq 0$. Így teljesül a következő egyenlőtlenség is:

$$\frac{\partial v}{\partial t}(x^*, t^*) - \Delta v(x^*, t^*) \geq 0.$$

(Ha $t^* = T$, akkor $\frac{\partial v}{\partial t}(x^*, t^*) \geq 0$.) Ebből pedig az következik, hogy

$$\frac{\partial v}{\partial t}(x^*, t^*) - \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}(x^*, t^*) \geq 0. \quad (1.7)$$

Másrészt minden $(x, t) \in Q_T$ pontban

$$\frac{\partial v}{\partial t}(x, t) - \Delta v(x, t) = \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - \Delta u(x, t) - \frac{\mu - M}{2T} < 0,$$

hiszen az első két tag különbsége nulla, mert u függvényre (1.4) igaz. Így az indirekt feltétel miatt a harmadik tag negatív lesz. Ez viszont ellentmond az (1.7) $(x^*, t^*) \in Q_T$ pontbeli egyenlőtlenségnek. \square

1.5. Következmény. Ha u függvénynek a $-u$ függvényt választjuk meg, akkor a fenti bizonyítás a minimum-elveket bizonyítja, hiszen a $-u$ függvény maximuma megegyezik a eredeti u függvény minimumával. (A linearitás miatt a $-u$ függvény szintén kielégíti a (1.4) egyenletet.)

Ezért érvényes a következő egyenlőtlenség

$$\min_{\Gamma_T} u(x, t) \leq u(x, t) \leq \max_{\Gamma_T} u(x, t), \quad \forall (x, t) \in Q_T, \quad (1.8)$$

amelyet maximum-minimum-elveknek nevezünk és az ismeretlen megoldásfüggvény kétoldali becslését jelenti.

1.3. M-mátrixok

1.6. Definíció. Az olyan $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ mátrixokat, melyek főátlón kívüli elemei nempozitívak, nonszingulárisak és inverzük nemnegatív, M-mátrixoknak nevezzük. Egy A mátrix nemnegatív, azaz $A \geq 0$, ha $\forall i, j$ esetén $a_{ij} \geq 0$.

Az M -mátrix nevében az M betű a koordinátáinként monoton rendezésre utal. Ugyanis ha egy A mátrix M -mátrix, akkor az

$$Ax \geq Ay \Rightarrow x \geq y$$

implikáció igaz.

Az M -mátrixokra érvényesek a következő tételek [4]:

1.7. Tétel. *Egy M -mátrix főátlója pozitív elemeket tartalmaz.*

A definícióban szereplő feltételeket általában nem könnyű ellenőrizni, mert ezekhez ismerünk kellene az A mátrix inverzét. A következő tétel egy olyan szükséges és elégséges feltételt fogalmaz meg, amely könnyen ellenőrizhető feltételt ad egy mátrixra.

1.8. Tétel. *Legyen az $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ mátrix olyan, hogy a főátlóján kívüli elemek nem pozitívak. Ekkor A pontosan akkor M -mátrix, ha van olyan $g \in \mathbb{R}^N$ pozitív vektor, mellyel $Ag > 0$, ahol " $>$ " azt jelöli, hogy a vektor minden koordinátája szigorúan nagyobb, mint nulla.*

Ekkor a g és az Ag vektorok segítségével becslést tudunk adni az A^{-1} mátrix maximumnormájára.

1.9. Tétel. *Legyen A M -mátrix és $g > 0$ egy olyan \mathbb{R}^N -beli vektor, melyre $Ag > 0$ teljesül. Ekkor*

$$\|A^{-1}\|_{\infty} \leq \frac{\|g\|_{\infty}}{\min_i (Ag)_i}. \quad (1.9)$$

1.10. Következmény. Ha A diagonálisan domináns, megfelelő előjeltulajdonságú mátrix, akkor M -mátrix. Ugyanis, a $g = e = (1, 1, \dots, 1)$ vektorral az 1.8 tétel feltételei teljesülnek. Ekkor az (1.9) becslés

$$\|A^{-1}\|_{\infty} \leq \frac{1}{\min_i \sum_{j=1}^N a_{ij}}$$

alakban írható fel.

1.4. Lineáris többlépéses módszerek

Tekintsünk a

$$\begin{aligned} w'(t) &= f(t, w(t)) \\ w(0) &= w_0 \end{aligned} \quad (1.10)$$

közönséges differenciálegyenletet, amelyet Cauchy - feladatnak vagy kezdeti érték feladatnak nevezünk. Itt w_0 az adott kezdeti értékünk. Feltesszük, hogy az egyenletnek létezik egyértelmű megoldása, amely a szükséges simasággal rendelkezik. Például, ha f második változójában Lipschitz tulajdonságú és folytonos függvény, akkor egyértelműen létezik megoldás. Ha $f \in C^k$, akkor a megoldás C^{k+1} -beli. Célunk, hogy közelítő megoldást konstruáljunk az (1.10) feladat megoldására.

Osszuk fel a $[0, T)$ intervallumot rácspontokkal a következő módon:

$$\omega_\tau = \{n \cdot \tau, n = 0, 1, \dots\}, \quad (1.11)$$

ahol $\tau > 0$ adott paraméter, ezt ekvidisztáns rácshálónak nevezzük. Olyan $y_\tau : \omega_\tau \rightarrow \mathbb{R}$ rácsfüggvényt szeretnénk meghatározni, amely az adott rácshálóbeli pontokban jól közelíti a $w(t)$ megoldásfüggvényt, azaz $y_\tau(t_n) \sim w(t_n)$. Jelölje y_n az y_τ függvény t_n pontban felvett értékét, azaz $y_\tau(t_n)$ -t. A rácsfüggvény meghatározása a következő ötleten alapul. Mivel

$$w'(t_n) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{w(t_n) - w(t_{n-1})}{\tau}, \quad (1.12)$$

ezért kis τ esetén

$$w'(t_n) \approx \frac{y_n - y_{n-1}}{\tau}, \quad n = 0, 1, \dots$$

Az (1.10) egyenlet jobb oldalának közelítése a $t = t_n$ pontban az

$$f(t_n, w(t_n)) \sim f(t_n, y_n)$$

alakban írható fel. Ezért az (1.10) egyenlet $t = t_n$ pontbeli egyenlősége alapján felírhatók a numerikus sémák.

Az egylépéses módszerek speciális alakjai :

- Explicit Euler módszer:

$$y_n = y_{n-1} + \tau f(t_{n-1}, y_{n-1}).$$

- Implicit Euler módszer:

$$y_n = y_{n-1} + \tau f(t_n, y_n)$$

- Trapéz módszer:

$$y_n = y_{n-1} + \frac{\tau}{2} (f(t_{n-1}, y_{n-1}) + f(t_n, y_n))$$

A többlépéses módszerek esetén az egylépéses módszerekkel ellentétben nemcsak y_{n-1} értékből, hanem több előző értékből számítjuk y_n értéket. A módszerek általános alakja a következő módon írható fel:

$$a_0 y_n + a_1 y_{n-1} + \dots + a_k y_{n-k} = h[b_0 f_n + b_1 f_{n-1} + \dots + b_k f_{n-k}],$$

ahol $n = k, k+1, \dots$ és $f_k := f(t_k, y_k)$. A módszert meghatározó paraméterek $a_0, a_1, \dots, a_k, b_0, b_1, \dots, b_k$, ahol $a_0 = 1$. A többlépéses módszer alkalmazhatóságának két feltétele van. Az első, hogy $a_0 \neq 0$, hiszen, ha a_0 nulla értékű lenne, y_n nem meghatározható a fenti egyenletből. A másik feltétel, hogy y_0, y_1, \dots, y_{k-1} adottak legyenek. Ha $b_0 = 0$, explicit, ha $b_0 \neq 0$, akkor implicit módszerről beszélünk. A módszer alkalmazása során az y_0, y_1, \dots, y_{k-1} értékeket általában egy jól megválasztott egylépéses módszerrel határozzuk meg. Az együtthatók jó megválasztása esetén magasabb rendű konzisztenciát kaphatunk, mégpedig $p = 2k$ az implicit és $p = 2k - 1$ az explicit módszerek esetében.

Tekintsük az (1.10) egyenletet az (1.11) rácshálón. Legyen

$$\omega_\tau^0 = \omega_\tau \{t_l, l = 0, 1, 2, \dots, k-1\}.$$

Ekkor jelölje $\mathbb{F}(\omega_\tau)$ az $\omega_\tau \rightarrow \mathbb{R}$ függvények vektorterét és $\mathbb{F}(\omega_\tau^0)$ az $\omega_\tau^0 \rightarrow \mathbb{R}$ függvények vektorterét.

Jelölje $\mathcal{N}_\tau : \mathbb{F}(\omega_\tau) \rightarrow \mathbb{F}(\omega_\tau)$ a következő operátor:

$$(\mathcal{N}_\tau z_\tau)(t_n) = \begin{cases} \frac{1}{\tau} \sum_{j=0}^k a_j z_\tau(t_{n-j}) - \sum_{j=0}^k b_j f_{n-j} & \forall t_{n-j} \in \omega_\tau^0 \\ z_\tau(t_n) & t_n \in \{t_l, l = 0, 1, 2, \dots, k-1\}. \end{cases} \quad (1.13)$$

ahol $z_\tau \in \mathbb{F}(\omega_\tau)$.

1.11. Definíció. (0-stabilitás) Azt mondjuk, hogy az $\mathcal{N}_\tau : \mathbb{F}(\omega_\tau) \rightarrow \mathbb{F}(\omega_\tau)$ operátor 0-stabil, ha léteznek olyan $K, \tau_0 > 0$ állandók, hogy $\forall \tau < \tau_0$ esetén tetszőleges $c_\tau, d_\tau \in \mathbb{F}(\omega_\tau)$ rácsfüggvényekre érvényes az alábbi becslés.

$$|c_\tau(t_n) - d_\tau(t_n)| \leq K \cdot \left(\sum_{j=0}^{k-1} |c_\tau(t_j) - d_\tau(t_j)| + \max_{k \leq n \leq N} \left| \frac{1}{\tau} A_k - B_k \right| \right), \quad \forall n = k, k+1, \dots,$$

ahol A_k és B_k a következőket jelenti.

$$A_k = \sum_{j=0}^k a_j (c_\tau(t_j) - d_\tau(t_j)) \text{ és } B_k = \sum_{j=0}^k b_j (f(t_{n-j}, c_\tau(t_{n-j})) - f(t_{n-j}, d_\tau(t_{n-j}))).$$

Azaz, ha megfelelően közeli értékeket vesznek fel a c_τ és a d_τ rácsfüggvények az első k pontban, és ezen rácsfüggvények \mathcal{N}_τ képei $\mathbb{F}(\omega_\tau)$ -ban is közel vannak egymáshoz, akkor ebből következik, hogy c_τ és d_τ is közel vannak egymáshoz $\mathbb{F}(\omega_\tau)$ -ban.

1.12. Megjegyzés. A speciális $k = 1$ esetben, azaz az egylépéses módszerek esetén, ez a definíció megegyezik a szokásos zéró-stabilitás fogalmával [2].

Speciális esetben a módszerek alakjai a következők:

1. Adams - típusú módszerek, azaz $a_0 = 1, a_1 = -1, a_2 = a_3 = \dots = a_k = 0$.

Alakjuk a következő:

$$\frac{y_n - y_{n-1}}{h} = b_0 f_n + b_1 f_{n-1} + \dots + b_k f_{n-k}, \quad n = k, k+1, \dots$$

Ha $b_0 = 0$, akkor a kapott explicit módszert Adams – Bashfort (AB) módszernek, ha $b_0 \neq 0$, akkor az így kapott módszert Adams – Moulton (AM) módszernek nevezzük.

Belátható, hogy a k -lépéses Adams-módszerek $k+1$ -ed rendben konzisztensek.

1.13. Megjegyzés. Az egylépéses Adams – Moulton módszer $b_0 = 1$ és $b_1 = 0$ megválasztással az implicit Euler módszert jelenti.

2. Retrográd módszerek : BDF (Backward Differentiation Formula)

Retrográd módszerek esetén $b_0 \neq 0$ és $b_1 = b_2 = \dots = b_k = 0$. Így alakjuk:

$$y_n + a_1 y_{n-1} + \dots + a_k y_{n-k} = h b_0 f_n, \quad n = k, k+1, \dots$$

A BDF módszerek együtthatóit az egyes esetekben az 1.1 táblázat tartalmazza.

A táblázatban p jelöli a rendet. A $k = 6$ -nál több lépéses módszerek már nem lesznek 0-stabilak, így konvergensek sem. Ezért ezekkel nem foglalkozunk. Ha tekintjük a Dahlquist - féle

$$u' = \lambda u, \quad \lambda \in \mathbb{C} \text{ (vagy } \mathbb{R}) \tag{1.14}$$

$u(0)$ adott

tesztegyenletet, és alkalmazzuk rá a lineáris többlépéses módszer általános alakját, a következő írható fel:

$$\sum_{j=0}^k a_j y_{n-j} - \tau \cdot \sum_{j=0}^k b_j \lambda y_{n-j}, \tag{1.15}$$

p	k	b_0	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
1	1	1	1	-1					
2	2	$\frac{2}{3}$	1	$-\frac{4}{3}$	$\frac{1}{3}$				
3	3	$\frac{6}{11}$	1	$-\frac{18}{11}$	$\frac{9}{11}$	$-\frac{2}{11}$			
4	4	$\frac{12}{25}$	1	$-\frac{48}{25}$	$\frac{36}{25}$	$-\frac{16}{25}$	$\frac{3}{25}$		
5	5	$\frac{60}{137}$	1	$-\frac{300}{137}$	$\frac{300}{137}$	$-\frac{200}{137}$	$\frac{75}{137}$	$-\frac{12}{137}$	
6	6	$\frac{60}{147}$	1	$-\frac{360}{147}$	$\frac{450}{147}$	$-\frac{400}{147}$	$\frac{225}{147}$	$-\frac{72}{147}$	$\frac{10}{147}$

1.1. táblázat. A BDF módszer lépésszámai, optimális paramétereit és a rendek kapcsolata

amely $y_j = \xi^j$ helyettesítési értékkel

$$\Pi(\xi) = \sum_{j=0}^k a_j \xi^{n-j} - \tau \cdot \lambda \sum_{j=0}^k b_j \xi^{n-j},$$

alakot ölti, ahol

$$\begin{aligned} \rho(\xi) &= \sum_{j=0}^k a_j \xi^{n-j} \\ \sigma(\xi) &= \sum_{j=0}^k b_j \xi^{n-j}. \end{aligned} \tag{1.16}$$

Ekkor $\Pi(\xi)$ egyenletet a lineáris többlépéses módszer karakterisztikus polinomjának, $\rho(\xi)$ k -adfokú polinomot az első karakterisztikus polinomjának, $\sigma(\xi)$ polinomot pedig a második karakterisztikus polinomjának nevezzük.

1.14. Definíció. (Gyökkritérium) Ha $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$ a $\rho(\xi) = 0$ algebrai egyenlet gyökei, akkor $|\xi_l| \leq 1, \forall l = 1, 2, \dots, k$ és $|\xi_l| = 1$ esetén ξ_l egyszeres gyök.

1.15. Állítás. Egy lineáris többlépéses módszer pontosan akkor 0-stabil, ha az első karakterisztikus polinomjára teljesül a gyökkritérium.

1.16. Állítás. (Dahlquist -féle első rendkorlát) Egy k -lépéses lineáris többlépéses módszer 0-stabilitásának maximális rendje

$$p \leq k + 1, \text{ ha } k \text{ páratlan}$$

$$p \leq k + 2, \text{ ha } k \text{ páros.}$$

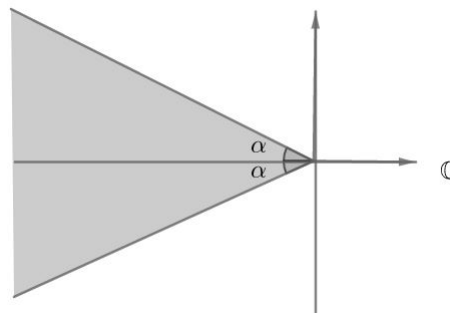
1.17. Definíció. (Stabilitási tartomány) Egy lineáris többlépéses módszer stabilitási tartományának nevezzük az

$Z := \{z \in \mathbb{C} : \text{amelyekre a } z = \lambda\tau \text{ esetén a } \Pi(\xi) \text{ polinom gyökeire teljesül a gyökkritérium}\}$
halmazt.

1.18. Definíció. Egy lineáris többlépéses módszert abszolút stabilnak nevezünk (azaz A-stabil), ha $\mathbb{C}_0^- \subset Z$.

1.19. Definíció. ($A(\alpha)$ -stabilitás) Azt mondjuk, hogy egy lineáris többlépéses módszer $A(\alpha)$ -stabil, ha

$$Z \supset \{z \in \mathbb{C} : z \in 0 \cup |\arg(z)| \leq \alpha\}.$$



1.20. Megjegyzés. Egy módszer, ha A-stabil, ekvivalens azzal, hogy $A(\frac{\pi}{2})$ -stabil.

1.21. Megjegyzés. A BDF módszerek A-stabilak $k = 1, 2$ esetben, $2 < k \leq 6$ esetben pedig $A(\alpha)$ -stabilak az alábbi táblázatban szereplő α szögekkel.

k	1	2	3	4	5	6
α	90°	90°	86°	73°	51°	17°

1.2. táblázat. A BDF módszer lépésszámai és az $A(\alpha)$ -stabilitású tartománya

1.22. Állítás. (Dahlquist - féle második rendkorlát)

- Az explicit lineáris többlépéses módszerek nem A-stabilak.
- Egy A-stabil lineáris többlépéses módszer rendje $p \leq 2$.

1.23. Megjegyzés. A Dahlquist - féle második rendkorlát alapján nem érdemes másodrendűnél magasabb rendű módszert alkalmazni, hiszen $p > 2$ esetén már nem lesznek A-stabilak a módszerek. Ezért a dolgozat során a BDF2-t, azaz a kétlépéses BDF módszert fogjuk vizsgálni.

1.24. Megjegyzés. Az egy lépéses BDF módszer az implicit Euler módszer.

A retrográd módszerek nagyon jól használhatóak merev rendszerek közelítésére.

1.25. Megjegyzés. A BDF módszerek maximális rendje k lépéses módszerek esetén k .

Ha egy feladat megoldása olyan, hogy két függvény összegeként áll elő és az egyik viszonylag gyorsan kioltódik (nullához tart), akkor merev feladatról beszélünk.

Tekintsük a Shampine - Gear egyenletet, amely egy merev rendszert ad meg:

$$y'(t) = \lambda y(t) - \lambda F(t) + F'(t), \quad (1.17)$$

ahol $F(t)$ egy adott lassan változó függvény (azaz $F'(t)$ kicsi) és λ egy adott szám. Ekkor megmutatható, hogy az (1.17) rendszer megoldása

$$y(t) = F(t) + e^{\lambda t} [y(0) - F(0)].$$

Ha tekintjük az y megváltozását egy adott t_0 értékben, akkor felírható a

$$y(t + t_0) = F(t + t_0) + e^{\lambda t} e^{\lambda t_0} [y(0) - F(0)]$$

egyenlet. Ha a $Re\lambda$ érték nagyságrendileg sokkal kisebb, mint nulla, azaz $Re\lambda \ll 0$, akkor $y(t + t_0) \approx F(t + t_0)$, azaz minden $\varepsilon > 0$ -hoz létezik $t^* > 0$, amelyre

$$|y(t) - F(t)| < \varepsilon, \quad \forall t \geq t^*.$$

Így ebben az egyenletben $F(t)$ a nem merev összetevő, $e^{\lambda t} [y(0) - F(0)]$ pedig a merev összetevő.

A közönséges differenciálegyenletek sok esetben felírhatóak lineáris egyenletrendszer alakban, azaz

$$y'(t) = Ay(t), \quad (1.18)$$

ahol $y \in \mathbb{R}^d$ és $A \in \mathbb{R}^{d \times d}$ -beli mátrix. A fenti egyenletet tekintve, ha meghatározzuk az A mátrix sajátértékeit, és teljesül rájuk, hogy $\lambda_{max} < 0$ és $\lambda_{min} < 0$, akkor a rendszer megoldása $d = 2$ esetén felírható

$$y(t) = c_1 e^{\lambda_{max} t} + c_2 e^{\lambda_{min} t}$$

alakban, azaz nagyon eltérő lambda értékek esetén merev megoldást szolgáltat. Ez alapján érthető, hogy általában, lineáris rendszerek esetén bevezethető a merevség ismérve a következő módon.

Tekintsük az előző, (1.18) differenciálegyenletet. Jelölje

$$S := \frac{\max_j |Re\lambda_j|}{\min_j |Re\lambda_j|} \quad (1.19)$$

hányadost, ahol $\lambda_j, j = 1, 2, \dots, d$ az A mátrix sajátértékeit jelöli.

1.26. Definíció. Azt mondjuk, hogy a fenti rendszer merev, ha $\forall j \quad Re\lambda_j \leq 0$ és $S = O(10)$ (azaz 10-es nagyságrendű).

A merev rendszerek numerikus megoldása speciális megközelítést igényel. Ilyen lesz a hővezetési egyenlet szemidiszkrétizációja is (később belátjuk), ezért a továbbiakban így fogunk eljárni.

2. fejezet

A feladat bevezetése

2.1. A hővezetési egyenlet bevezetése [1]

Legyen $\Phi(x, t)$ az egységnyi idő alatt egységnyi térfogaton (keresztmetszeten) áthaladó anyag mennyisége, azaz a fluxus. Jelölje $F(x, t)$ a forrást, azaz az egységnyi idő alatt, egységnyi térfogaton keletkező anyagot.

Ekkor

$$Q_1 = \int_{t_1}^{t_2} A(\Phi(x_1, t) - \Phi(x_2, t))dt$$

az $[x_1, x_2]$ pontokkal határolt szakaszon a $[t_1, t_2]$ időintervallumban, egy A nagyságú keresztmetszeten a (beáramló - kiáramló anyag) tömegváltozást jelenti, melyet felírhatunk

$$Q_1 = \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x}(A\Phi(x, t))dxdt \quad (2.1)$$

alakban is. A forrás általi anyagváltozás:

$$Q_2 = \int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} AF(s, \tau)d\tau ds,$$

ahol $F(x, t)$ jelöli az x helyen, t időpontban keletkező (elnyelődő) anyag sűrűségét.

Másik oldalról a tömegváltozás az $u(x, t)$ anyagi sűrűségre:

$$Q_3 = \int_{x_1}^{x_2} A(u(s, t_2) - u(s, t_1))ds = \int_{x_1}^{x_2} \int_{t_1}^{t_2} A \frac{\partial}{\partial t}(s, t)dt ds.$$

A mérlegegyenlet alapján:

$$Q_1 + Q_2 = Q_3,$$

amely egyenletbe az előző átalakítások beírhatóak:

$$\int_{t_1}^{t_2} \int_{x_1}^{x_2} \left[\frac{\partial}{\partial x} A\Phi(x, t) + AF(x, t) \right] dx dt = \int_{x_1}^{x_2} \int_{t_1}^{t_2} A \frac{\partial u}{\partial t} ds dt,$$

Ebből integráláttalalkítással $[t_1, t_2]$ és $[x_1, x_2]$ tetszőlegessége és A keresztmetszet állandósága miatt a

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial x} = F \quad (2.2)$$

egyenletet nyerjük, amelyet általános transzport egyenletnek nevezünk. Ha Fick-törvény alapján határozzuk meg a fluxust, amely kimondja, hogy az anyagáramlás sűrűsége egyenesen arányos a koncentráció gradiensevel és ellentétes irányú, akkor

$$\Phi(x, t) = -k(x, t) \frac{\partial u}{\partial x}(x, t), \quad (2.3)$$

ahol $k(x, t)$ az arányossági tényező. A (2.3) egyenletet behelyettesítve (2.2) egyenletbe,

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} \right) = F(x, t)$$

egyenletet kapjuk. Ha k értékét állandónak választjuk meg, akkor a forrásos hővezetési egyenletet kapjuk meg. Ha emellett feltesszük, hogy $F = 0$, akkor a dolgozatban vizsgált hővezetési egyenletet kapjuk.

Egydimenzióban homogén anyagparaméterek mellett a hővezetési egyenletet a következőképp lehet értelmezni: tekintsünk egy L hosszúságú, henger alakú rudat. A rúd pontjait x -el jelöljük, ahol $x \in [0, L]$. Legyen $u(x, t)$ az a függvény, amely megadja a rúd hőmérsékletét az x pontban a t időpillanatban. A következő egyenletet kapjuk:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = F. \quad (2.4)$$

A dolgozat során az d -dimenziós egyenlet következő alakját fogjuk használni: legyen $d \in \mathbb{N}^+$, ekkor tekintsük a térben az d -dimenziós homogén, forrásmentes hővezetési egyenletet, amelynek alakja

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2}; (x, t) \in Q_T, \quad (2.5)$$

ahol $u \in C^{2,1}(Q_T) \cap C(\overline{Q_T})$.

A parciális differenciálegyenlethez meg kell adnunk a szükséges mellékfeltételeket, hiszen az egyenlet egy fizikai jelenséget modellez, így szükségünk van a kezdeti feltételre és a peremfeltételekre.

Tekintsük a (2.5) egyenletet az

$$u(x, t) = g(x, t), \quad (x, t) \in \Gamma_T \quad (2.6)$$

mellékfeltétellel, ahol $g : \Gamma_T \rightarrow \mathbb{R}$ adott folytonos függvény. A (2.6) feltétel $t = 0$ pontjaiban

$$u(x, 0) = g(x, 0) := u_0(x) \quad (2.7)$$

az úgynevezett kezdeti feltétel, ami kezdeti hőmérsékletet jelöl, míg az

$$u(x, t) = g(x, t), \quad x \in \partial\Omega \quad (2.8)$$

a peremfeltétel.

Ha az $u(x, t)$ függvény a térbeli peremen állandó értéket vesz fel, azaz $g \equiv \text{const}$, akkor minden $u_0(x)$ esetén

$$\lim_{t \rightarrow \infty} u(x, t) = u^*(x),$$

amely megoldása az

$$Lu^* = 0$$

egyenletnek. Ezt a megoldást nevezzük stacionárius hőeloszlásnak. Például egydimenzióban, $u(0, t) = \mu_0$ és $u(1, t) = \mu_1$ esetén

$$u^*(x) = x\mu_0 + (1 - x)\mu_1.$$

Erre felírható az $(u^*)''(x) = 0$ egyenlet.

Jelölje $L : C^2(0, 1) \cap C[0, 1] \rightarrow C[0, 1]$ a következő operátort:

$$(Lp)(x) = p''(x), \quad \text{ahol } \text{dom}L := \{p \in C^2(0, 1) \cap C[0, 1], p(0) = p(1) = 0\}. \quad (2.9)$$

2.1. Definíció. Egy $p \in \text{dom}L$ függvényt az L operátor sajátfüggvényének nevezzük, ha

$$p(x) \neq 0 \quad \text{és} \quad \exists \lambda \in \mathbb{R} : (Lp)(x) = \lambda p(x).$$

A $\lambda \in \mathbb{R}$ számot az operátor sajátértékének nevezzük.

Megmutatható, hogy a (2.9) L operátor sajátfüggvényei és sajátértékei

$$p_k(x) = \sin k\pi x, \\ \lambda_k = -k^2\pi^2. \quad k = 1, 2, \dots$$

2.2. A numerikus megoldás

A továbbiakban az egydimenziós, lineáris parabolikus típusú feladat numerikus megoldását keressük. Ezt a következő módon állítjuk elő. Első lépésként generálunk egy ω_h rácshálót $\bar{\Omega}$ -ban. Ha $\bar{\Omega} := [0, L] \subset \mathbb{R}^1$ (egydimenziós probléma), akkor

$$\omega_h := \left\{ x_i = ih, i = 0, 1 \dots N + 1, h = \frac{L}{N + 1} \right\}. \quad (2.10)$$

Jelölje $u_N(x, t)$ a térbeli diszkretizációt, az ún. szemidiszkretizációt. Ez N db függvényt jelent, amelyet a gyenge alakból állítunk elő. Ebben az esetben a térben diszkretizált, úgynevezett szemidiszkret megoldást a következő alakban keressük

$$u_N(x, t) = \sum_{i=1}^N \alpha_i^N(t) \varphi_i^N(x), \quad (2.11)$$

ahol $\varphi_i^N(x)$ ($i = 1 \dots N$) valamely $H_N = \text{span} \{ \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N \}$ -beli véges elemes lineáris bázisfüggvény-rendszer. (Itt H_N a $H_0^1(0, L)$ halmaz egy alkalmas véges dimenziós részhalmaza.) A perempontokat nem vesszük bele a szemidiszkretizációba, hiszen ezekben a pontokban a függvény értéke rögzített. Az ismeretlen $\alpha_i^N(t)$ vektorfüggvényeket a gyenge alak segítségével kaphatjuk meg, a bázisfüggvényekkel skalárisan szorozva őket a következő közönséges differenciálegyenlet-rendszer megoldásaival állítható elő:

$$M \frac{d\alpha^N(t)}{dt} = Q \alpha^N(t) = 0, t > 0 \quad (2.12)$$

$$\alpha(0) = \alpha^0,$$

ahol M és Q adott, $N \times N$ méretű konstans mátrixok, lineáris véges elemek esetén alakjuk pedig a következő:

$$M = (1/6) \begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 4 & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 & 4 \end{bmatrix} \quad \text{és} \quad Q = (1/h^2) \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & & -2 \end{bmatrix}$$

Itt $\alpha_i^0 = u_0(x_i)$ adott vektor.

Ha M^{-1} -gyel beszorozzuk balról a (2.12) egyenletet, a következő alakra hozhatjuk a formulát:

$$w'_N(t) = f(t, w_N(t)), \quad (2.13)$$

ahol $w_N : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^N$ és $f(t, w_N(t))$ ebben az esetben $M^{-1}Q\alpha^N(t)$ alakú. Ennek numerikus megoldására a $[0, T)$ intervallumon egy

$$\omega_\tau := \{t_j = j\tau, \quad j = 0, 1, \dots\} \quad (2.14)$$

idő szerinti rácshálón valamilyen numerikus módszert alkalmazunk. A továbbiakban y_i^j jelöli az $\omega_{h,\tau} := \omega_h \times \omega_\tau$ rácshálón az u megoldásfüggvény közelítését a (x_i, t_j) pontban és ezt nevezzük numerikus megoldásnak.

Vizsgáljuk meg a kapcsolatot az L operátor és a Q mátrix sajátértékei és sajátvektorai között.

A Q mátrixra felírható a

$$Qv = \lambda v$$

sajátérték-feladat, ahol $v \in \mathbb{R}^{N+2}$ és $v_0 = v_{N+1} = 0$ sajátvektor és λ sajátérték. Q képlete alapján ekkor a következő egyenletek igazak:

$$\frac{1}{h^2}(v_{i-1} - 2v_i + v_{i+1}) = \lambda v_i, \quad i = 1, 2, \dots, N.$$

Ezt átrendezve a

$$v_{i-1} - (2 + \lambda h^2)v_i + v_{i+1} = 0, \quad \forall i = 1, 2, \dots, N \quad (2.15)$$

egyenleteket kapjuk.

Ekkor válasszuk meg a sajátvektorokat $v_i = \sin \alpha x_i$ alakúnak, ahol az $x_i = ih$ rácspontok és keressük α -t. Ezt behelyettesítve (2.15) egyenletbe, felírhatjuk a

$$\sin \alpha x_{i-1} - (2 + \lambda h^2) \sin \alpha x_i + \sin \alpha x_{i+1} = 0$$

összefüggést. Trigonometrikus azonosságokat alkalmazva és átalakítva ekkor a

$$v_i [2 \cos \alpha h - (2 + \lambda h^2)] = 0, \quad \forall i = 1, 2, \dots, N$$

kifejezést kapjuk. Mivel legalább egy indexre $v_i \neq 0$, hiszen v_i sajátvektor nem lehet az azonosan nulla vektor, ezért

$$2 \cos \alpha h = 2 + \lambda h^2$$

írható fel, mely segítségével λ -t kifejezve a következő összefüggést kapjuk:

$$\lambda = \frac{2 \cos \alpha h - 2}{h^2} = -\frac{2}{h^2}(1 - \cos \alpha h) = -\frac{4}{h^2} \sin^2 \left(\frac{\alpha h}{2} \right).$$

A fenti egyenletbe a $v_0 = v_{N+1} = 0$ feltételeket belevéve kapjuk, hogy

$$\alpha_k = k\pi, \quad k = 1, 2, \dots$$

hiszen

$$v_0 = \sin(\alpha x_0) = \sin 0 = 0,$$

$$v_{N+1} = \sin(\alpha x_{N+1}) = \sin \alpha = 0.$$

Ebből pedig kapjuk a sajátértékekre, hogy

$$\lambda_k = -\frac{4}{h^2} \sin^2 \frac{kh\pi}{2}, \quad k = 1, 2, \dots, N \quad (2.16)$$

a sajátvektorokra pedig

$$v_k = [\sin \alpha x_i]_{i=1}^N, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (2.17)$$

Vizsgáljuk meg az így kapott rendszerünket a 1.26 Definíció alapján. Az látszik, hogy minden sajátérték valós és negatív, így csak a második feltételt kell ellenőriznünk, azaz, hogy a maximális és a minimális sajátérték hányadosa milyen nagyságrendű.

Írjuk fel S képletét a mostani rendszerre.

$$S = \frac{\max_j \lambda_j}{\min_j \lambda_j} = \frac{-\lambda_{N-1}}{-\lambda_1} = \frac{\sin^2 \left(\frac{(N-1)h\pi}{2} \right)}{\sin^2 \left(\frac{\pi h}{2} \right)} = \frac{\sin^2 \left(\frac{(1-h)\pi}{2} \right)}{\sin^2 \left(\frac{\pi h}{2} \right)} = \frac{\sin^2 \left(\frac{\pi}{2} - \frac{h\pi}{2} \right)}{\sin^2 \left(\frac{h\pi}{2} \right)} = \frac{\cos^2 \frac{\pi h}{2}}{\sin^2 \frac{\pi h}{2}} = \cot^2 \left(\frac{\pi h}{2} \right)$$

Ekkor legyen $z = \frac{\pi h}{2}$. Tekintsük ennek a függvénynek a határértékét:

$$\lim_{z \rightarrow 0} \cot z = \infty$$

Azaz $S \sim O \left(\frac{1}{(\frac{\pi h}{2})^2} \right) = S \sim O \left(\frac{1}{h^2} \right)$. Tehát a rendszerünk merev.

2.2. Következmény. A-stabil módszerre van szükségünk a hővezetési egyenlet numerikus megoldásához. A BDF2 jó módszer lesz, hiszen ez a módszer A-stabil, mint azt korábban megmutattuk.

3. fejezet

Nemnegativitás öröklődése - Egylépéses módszerek

Ebben a fejezetben a korábban bevezetett feladatot felírjuk egylépéses módszerekre és ismer-tetjük a témakörben született eredményeket [3]. Az előző fejezetben definiált (2.12) feladatot egylépéses módszerrel az

$$M \frac{\alpha^{j+1} - \alpha^j}{\tau} = Q(\theta \alpha^{j+1} + (1 - \theta) \alpha^j) \quad (3.1)$$

lineáris algebrai egyenletrendszerrel oldhatjuk meg numerikusan, ahol $0 \leq \theta \leq 1$ és $\alpha^0 \geq 0$ adottak. Ezt a módszert θ -módszernek nevezzük.

Speciális esetekben:

1. $\theta = 0$ esetben a módszer

$$M \frac{\alpha^{j+1} - \alpha^j}{\tau} = Q \alpha^j$$

alakú, amely az explicit Euler módszert jelenti.

2. $\theta = 1$ esetben az implicit Euler módszert kapjuk, melynek alakja:

$$M \frac{\alpha^{j+1} - \alpha^j}{\tau} = Q \alpha^{j+1}.$$

3. $\theta = \frac{1}{2}$ esetben pedig a trapéz módszer kapható, amely

$$M \frac{\alpha^{j+1} - \alpha^j}{\tau} = Q \left(\frac{1}{2} \alpha^{j+1} + \frac{1}{2} \alpha^j \right) \quad (3.2)$$

alakú.

3.1. Véges elemes módszerrel

Ha a szemidiszkretizációt véges elemes módszerrel hajtjuk végre, akkor az (2.12) egyenlet numerikus megoldása (3.1) alakú. Vezessük be a következő jelöléseket:

$$X_1 := (M + \tau\theta Q);$$

$$X_2 := M - \tau(1 - \theta)Q.$$

Feladatunk, hogy meghatározzuk, milyen feltételeket kell felállítanunk τ -ra és h -ra, hogy a nemnegativitás öröklődjön. A tulajdonság öröklődésének szükséges és elégséges feltétele, hogy az

$$X := X_1^{-1} \cdot X_2 \quad (3.3)$$

mátrix nemnegatív legyen, azaz $X \geq 0$. Jelölje

$$q = \frac{\tau}{h^2}. \quad (3.4)$$

Ha felhasználjuk az előző fejezetben M és Q definícióját, akkor X_1 -et és X_2 -t felírhatjuk

$$\begin{aligned} X_1 &= \text{tridiag} \left[\frac{h}{6} + \tau\theta\frac{1}{h}, \frac{4}{6}h - \tau\theta\frac{2}{h}, \frac{h}{6} + \tau\theta\frac{1}{h} \right]; \\ X_2 &= \text{tridiag} \left[\frac{h}{6} - \tau(1 - \theta)\frac{1}{h}, \frac{4}{6}h + \tau(1 - \theta)\frac{2}{h}, \frac{h}{6} - \tau(1 - \theta)\frac{1}{h} \right] \end{aligned} \quad (3.5)$$

alakban.

Ezek után előállítjuk az X mátrixot. Jelölje

$$\gamma = \text{arch}(\rho/2),$$

ahol $\rho = \frac{2+2\theta q}{\theta q - \frac{1}{6}}$, és tegyük fel, hogy $N \geq 3$. Ekkor X_1^{-1} elemei a következőképp írhatók fel:

$$(X_1^{-1})_{i,j} = \begin{cases} \theta_{i,j}, & \text{ha } i \leq j \\ \theta_{j,i}, & \text{ha } i > j \end{cases}$$

ahol

$$\theta_{i,j} = \frac{\text{sh}(i\gamma) \cdot \text{sh}(N+1-j)\gamma}{(q\theta - \frac{1}{6}) \cdot \text{sh}(\gamma) \cdot \text{sh}(N+1)\gamma}$$

az ún. egypárú mátrix.

Azaz X szimmetrikus mátrix, és elemei:

$$\begin{aligned} (X)_{i,j} &= (\theta_{i,j-1} + \theta_{i,j+1})\left(\frac{1}{6} + q(1 - \theta)\right) + \theta_{i,j}\left(\frac{2}{3} - 2q(1 - \theta)\right), \quad \text{ha } i < j \\ (X)_{i,i} &= (\theta_{i-1,i} + \theta_{i,i+1})\left(\frac{1}{6} + q(1 - \theta)\right) + \theta_{i,i}\left(\frac{2}{3} - 2q(1 - \theta)\right), \quad \text{ha } i < j. \end{aligned}$$

Ha az X mátrix struktúráját vizsgáljuk és feltesszük, hogy $N \geq 2$, akkor a következő lemma mondható ki:

3.1. Lemma. Ha valamely $q > 0$ és $\theta \in [0, 1]$ esetén

$$q\theta \geq \frac{1}{6}$$

egyenlőtlenség teljesül, akkor az X mátrix valamennyi főátlón kívüli eleme pozitív.

3.2. Lemma. Ha valamely $q > 0$ és $\theta \in [0, 1]$ esetén a

$$q\theta \geq \frac{1}{6}$$

egyenlőtlenség teljesül és az X mátrix diagonális elemei közül az első nemnegatív, akkor valamennyi diagonális eleme nemnegatív.

Az előző két lemma segítségével megfogalmazható a lineáris véges elemes séma adott rögzített felosztása mellett a nemnegativitás öröklődésének szükséges és elégséges feltétele.

3.3. Tétel. *Legyen $N \in \mathbb{N}$ egy rögzített felosztásszám. Ekkor tetszőlegesen nemnegatív kezdeti függvény esetén a numerikus megoldás pontosan akkor marad nemnegatív, amikor $(X)_{1,1} \geq 0$, azaz teljesül az*

$$\frac{sh(N-1)\gamma}{sh(N\gamma)} \geq -\frac{\frac{2}{3} - 2q(1-\theta)}{\frac{1}{6} + q(1-\theta)}, \text{ ha } N \geq 2,$$

$$\frac{2}{3} - 2q(1-\theta) \geq 0, \text{ ha } N = 1$$

reláció.

Viszont ez a feltétel a gyakorlatban kevésbé használható, mert a numerikus megoldás egy rácsháló sorozaton zajlik, így az N rögzítése nem valós körülmény. Így egy olyan feltétel megadása lenne célszerű, amely a megválasztandó lépésközre ad korlátozást.

A következő tétel mondja ki a fenti elvárásokkal felírt feltételt.

3.4. Tétel. *Tetszőleges $N \in \mathbb{N}$ és kezdeti közelítés esetén a lineáris véges elemes séma nemnegativitásának a*

$$\frac{1}{6\theta} \leq q \leq \frac{1}{3(1-\theta)}, \theta \in \left[\frac{1}{3}, 1\right] \quad (3.6)$$

egyenlőtlenség szükséges és elégséges feltétele.

A tétel jelentése, hogy minden N érték esetén a nemnegativitás akkor fog öröklődni, ha X_1 M-mátrix, X_2 pedig nemnegatív mátrix lesz, illetve a nemnegativitást a $\theta \geq \frac{1}{3}$ sémák őrzik meg, hiszen ha az előző egyenlőtlenségben azt az esetet tekintjük, hogy mindkét oldalon egyenlőség áll, akkor $\frac{1}{6\theta} = \frac{1}{3(1-\theta)}$. Ebből θ -t kifejezve kapjuk, hogy $\theta = \frac{1}{3}$.

3.5. Megjegyzés. A fenti tételek $N \geq 2$ esetén tovább finomíthatóak:

3.6. Tétel. *Tetszőleges $N \geq 2$ és kezdeti közelítés esetén a lineáris véges elemes séma nemnegativitásának a*

$$\frac{1}{6\theta} \leq q \leq \frac{3(-1 + 2\theta) + \sqrt{9 - 16\theta(1 - \theta)}}{12\theta(1 - \theta)}$$

elégséges feltétele.

3.2. Véges differenciák módszere

A feladat közelítésére először a véges differenciák módszerét alkalmazzuk. Ekkor az (2.12) egyenletben M mátrix az egységmátrix lesz. A következő egyenletben megkaphatjuk a pontos megoldás y_i^{n+1} közelítését a következő lineáris algebrai egyenletrendszer megoldásával:

$$\begin{aligned} \frac{y_i^{n+1} - y_i^n}{\tau} &= \theta \frac{y_{i+1}^{n+1} - 2y_i^{n+1} + y_{i-1}^{n+1}}{h^2} + (1 - \theta) \frac{y_{i+1}^n - 2y_i^n + y_{i-1}^n}{h^2}, \\ i &= 1, 2, \dots, N; n = 0, 1, \dots; \\ y_i^0 &= u_0(x_i); i = 1, 2, \dots, N; \\ y_0^n &= y_{N+1}^n = 0, n = 0, 1, \dots \end{aligned} \tag{3.7}$$

Jelölje y^n a n -edik időréteghez tartozó közelítések vektorát (N dimenziós oszlopvektor), azaz $(y^n)_i = y_i^n, i = 1, 2, \dots, N$. Ekkor a fenti egyenlet felírható

$$X_1 y^{n+1} = X_2 y^n; n = 0, 1, 2, \dots \tag{3.8}$$

alakban, ahol y^0 adott és X_1 és X_2 az alábbi mátrixok:

$$\begin{aligned} X_1 &= \text{tridiag}[-\tau\theta/h^2; 1 + 2\tau\theta/h^2; -\tau\theta/h^2]; \\ X_2 &= \text{tridiag}[(1 - \theta)\tau/h^2; 1 - 2\tau(1 - \theta)/h^2; (1 - \theta)\tau/h^2]. \end{aligned} \tag{3.9}$$

A véges elemes módszerhez hasonlóan itt is az lesz a nemnegativitás öröklődésének elégséges feltétele, hogy $X \geq 0$, ahol X a véges elemes módszernél definiált (3.3) mátrix.

Ahhoz, hogy az X mátrix nemnegatív legyen, egy elégséges feltétel, ha $X_1^{-1} \geq 0$ és $X_2 \geq 0$. Az első feltétel teljesül, ha X_1 M-mátrix.

Így a (első fejezetbeli) tételek alapján X_1 struktúrájából adódik, hogy M-mátrix, azaz jó előjelstruktúrájú és diagonálisan domináns. Az $X_2 \geq 0$ teljesüléséhez szükség van a következő feltételre:

$$q \leq \frac{1}{2(1-\theta)}, \text{ ha } \theta \in [0, 1);$$

$$q \text{ tetszőleges, ha } \theta = 1.$$
(3.10)

Így ez a feltétel lesz az elégséges feltétel a nemnegativitás öröklődésére. Egy nagyobb felső korlát is megadható elégséges feltételként. Ha megengedjük a nemnegativitást az X_2 mátrix főátlójában lévő elemekre, akkor $n \geq 2$ esetén a fenténél élesebb becslés adható a séma nemnegativitására. Ugyanis nem szükséges az X_2 nemnegativitása, elegendő az X mátrix nemnegativitása, azaz, hogy $X_1^{-1}X_2 \geq 0$.

$$q \leq \frac{-1 + 2\theta + \sqrt{1 - \theta(1 - \theta)}}{3\theta(1 - \theta)}, \text{ ha } \theta \in (0, 1);$$

$$q \leq \frac{1}{2}, \text{ ha } \theta = 0;$$

$$q \text{ tetszőleges, ha } \theta = 1.$$
(3.11)

Még tovább erősíthetjük a feltételünket a következő tétellel:

3.7. Tétel. *Létezik olyan N_0 szám, amelyre a véges differenciák módszerével minden $n \geq N_0$ -re a nemnegativitás öröklődik, ha*

$$\frac{1}{2(1-\theta)} < q < \frac{1 - \sqrt{1-\theta}}{\theta(1-\theta)}.$$
(3.12)

Ha q -ra teljesül a fenti feltétel, akkor öröklődik a módszerre a nemnegativitás.

3.8. Megjegyzés. A fenti korlátok speciális, $\theta = \frac{1}{2}$ esetben:

- (3.10) feltétel $\theta = \frac{1}{2}$ esetben:

$$q \leq 1.$$

- (3.11) feltétel $\theta = \frac{1}{2}$ esetén:

$$q \leq \frac{2\sqrt{5}}{3}.$$

- (3.12) feltétel $\theta = \frac{1}{2}$ esetben:

$$1 < q < 4 - 2\sqrt{2}.$$

4. fejezet

Nemnegativitás öröklődése - Lineáris többlépéses módszerek

A továbbiakban a szemidiszkretizáció továbbra is rögzített (véges differenciák módszere), de a (2.12) közönséges differenciálegyenlet-rendszert megoldó módszert nem egy lépéses, hanem többlépéses módszerek választjuk.

4.1. BDF2 módszer

A dolgozat során a kétlépéses BDF módszert, azaz a BDF2 módszer nemnegativitását vizsgáljuk az

$$u'(t) = f(t, u(t))$$

egyenletre. A módszer

$$\frac{3y_n - 4y_{n-1} + y_{n-2}}{2\tau} = f(t_n, y_n) \quad (4.1)$$

alakban írható fel. Itt a bal oldal az egyenlet approximációja, míg a jobb oldal az egyenlet jobb oldalának approximációja. A fenti (4.1) egyenletet átalakításokkal

$$y_n - \frac{4}{3}y_{n-1} + \frac{1}{3}y_{n-2} = \frac{2}{3}\tau f(t_n, y_n), \quad (4.2)$$

alakba írhatjuk át, ahol $y_n \in \mathbb{R}^N$. A (2.12) egyenlet alapján a (4.2) módszer a mi esetünkben az alábbi feladatot jelenti:

$$y_n - \frac{4}{3}y_{n-1} + \frac{1}{3}y_{n-2} = \frac{2}{3}\tau M^{-1}Qy_n. \quad (4.3)$$

Ebből y_n kiemelésével és rendezéssel az

$$\left(I - \frac{2}{3}\tau M^{-1}Q\right)y_n = \frac{4}{3}y_{n-1} - \frac{1}{3}y_{n-2} \quad (4.4)$$

alakot kapjuk, ahol $M, Q \in \mathbb{R}^{N \times N}$ és I az N -dimenziós egységmátrix. A (4.4) egyenlet felírható egylépéses vektoriális alakban is, bevezetve a

$$Y_n = \begin{bmatrix} y_{n-1} \\ y_n \end{bmatrix}$$

hipervektort és az

$$X_1 = \begin{bmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{bmatrix}, X_2 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{3}B & \frac{4}{3}B \\ 0 & I \end{bmatrix}$$

hipermátrixokat, ahol $B = \left(I - \frac{2}{3}M^{-1}Q\tau\right)^{-1}$. Ekkor (4.4) a következő alakban írható fel:

$$X_1 Y_n = X_2 Y_{n-1}.$$

Azaz a mátrixos alak a következő:

$$\begin{bmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{n-1} \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{3}B & \frac{4}{3}B \\ 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{n-2} \\ y_{n-1} \end{bmatrix}. \quad (4.5)$$

Célunk a nemnegativitás vizsgálata, azaz, ha $Y_{n-1} \geq 0$, akkor ebből mikor következik, hogy $Y_n \geq 0$. Ha $y_{n-2}, y_{n-1} \geq 0$, azaz $Y_{n-1} \geq 0$ koordinátánként, akkor ebből következik, hogy $Y_n \geq 0$, ha teljesül a következő feltétel:

$$X_1^{-1}X_2 \geq 0.$$

Jelölje $X = X_1^{-1}X_2$. Mivel X_1 mátrix inverze:

$$\begin{bmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{bmatrix},$$

így ezzel az inverz mátrixszal balról szorozva X_2 mátrixot, az

$$X = \begin{bmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{1}{3}B & \frac{4}{3}B \\ 0 & I \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & I \\ -\frac{1}{3}B & \frac{4}{3}B \end{bmatrix}$$

összefüggést kapjuk. Ezért az $X \geq 0$ feltétel azt jelenti, hogy

$$\begin{bmatrix} 0 & I \\ -\frac{1}{3}B & \frac{4}{3}B \end{bmatrix} \geq 0.$$

Ez egy ellentmondásos elégséges feltétel, hiszen egyidejűleg nem teljesülhet B -re a nemnegativitás és a nempozitivitás (csak a $B = 0$ mátrix esetén, amely nyilvánvalóan nem lehetséges).

Ezért bármely y_{n-1} és y_{n-2} esetén nem fog teljesülni a feltétel.

Tekintsük az $Y_n = XY_{n-1}$ egy lépéses iterációt. Mátrixos alakban ez a következőképp írható fel:

$$\begin{bmatrix} y_{n-1} \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & I \\ -\frac{1}{3}B & \frac{4}{3}B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{n-2} \\ y_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{n-1} \\ -\frac{1}{3}By_{n-2} + \frac{4}{3}By_{n-1} \end{bmatrix}.$$

Ebből pedig következik, hogy a nemnegativitás akkor öröklődik $y_{n-2}, y_{n-1} \geq 0$ esetén, ha

$$\frac{4}{3}By_{n-1} - \frac{1}{3}By_{n-2} \geq 0 \text{ és } y_{n-1} \geq 0. \quad (4.6)$$

Ekkor a következő állítás fogalmazható meg:

4.1. Állítás. Ha $B \geq 0$, és y_{n-2}, y_{n-1} olyan vektorok, amelyekre

$$4y_{n-1} \geq y_{n-2} \geq y_{n-1} \geq 0, \quad (4.7)$$

és y_n a BDF2-vel számított eredmény, akkor teljesül a

$$4y_n \geq y_{n-1} \geq y_n \geq 0 \quad (4.8)$$

egyenlőtlenség is.

Mint láttuk, tetszőleges (y_n) vektorsorozatra nem igaz a (4.7) és a (4.8) tulajdonság. Ugyanakkor, ha a sorozat elemei speciális tulajdonságokkal rendelkeznek, akkor ez a tulajdonság biztosítható. Ez a speciális tulajdonság a vektorok konkávitása, amely a következőt jelenti.

4.2. Definíció. Legyen u a következő vektor:

$$u = \begin{bmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_N \\ u_{N+1} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N+2},$$

ahol $u_0 = u_{N+1} = 0$, és jelölje

$$\vec{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^N.$$

Ekkor egy \vec{u} vektort konkáv vektornak nevezünk, ha $Q\vec{u} \leq 0$, ahol Q a (2.12) egyenletben definiált mátrix.

Megjegyezzük, hogy a fenti definícióban Q mátrix a második derivált közelítését határozza meg, ezért ez a definíció természetes analógiája a folytonos fogalomnak.

4.3. Tétel. *Ha y_{n-2} -t és y_{n-1} konkáv vektorok, azaz $Qy_{n-2} \leq 0$ és $Qy_{n-1} \leq 0$, akkor a 4.1 Állítás igaz, azaz az y_n megoldás nemnegatív.*

4.2. BDF2 módszer speciális kezdeti közelítéseken

Ahhoz, hogy a 4.1 Állítás feltételeit beláthassuk, két dolgot kell megmutatni. Az egyik a B mátrix nemnegativitása, a másik, hogy a (4.7) és a (4.8) feltétel minden n esetén érvényes.

Először a B mátrix nemnegativitását mutatjuk meg.

Véges differenciákkal való közelítés esetén a fenti B mátrix a következőképp írható fel. Mivel itt $M = I$, ezért $B = (I - \frac{2}{3}\tau Q)^{-1}$, így a fenti összefüggés alapján felírhatjuk, hogy $I - \frac{2}{3}\tau Q = \text{tridiag}[-\frac{2}{3}\frac{\tau}{h^2}, 1 + \frac{4}{3}\frac{\tau}{h^2}, -\frac{2}{3}\frac{\tau}{h^2}]$. A h és τ is nemnegatív számok, így a véges differenciák esetében $I - \frac{2}{3}\tau Q$ mátrix minden esetben M-mátrix lesz, mert diagonálisan domináns és jó előjelstruktúrájú. Így inverze nemnegatív, azaz

$$B \geq 0$$

és ez tetszőleges paraméter-megválasztás mellett igaz.

Tekintsünk a

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \text{ ahol } x \in (0, 1), \\ u(x, 0) &= u_0(x), \\ u(0, t) &= 0, u(1, t) = 1 \end{aligned} \tag{4.9}$$

feladatot, ahol feltesszük, hogy u_0 konkáv függvény, azaz $u_0''(x) \leq 0$ és a kezdeti függvény a két végpontban

$$u_0(0) = 0, \quad u_0(1) = 1.$$

Legyen $u_p(x) = x$. Ekkor felírható

$$\frac{\partial u_p}{\partial t} - \frac{\partial^2 u_p}{\partial x^2} = 0,$$

$$u_p(0) = 0,$$

$$u_p(1) = 1.$$

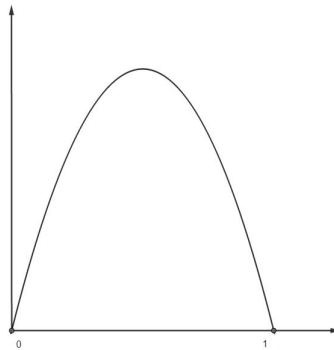
Ekkor az $u^*(x, t) = u(x, t) - u_p(x)$ függvényre a (4.9) a következő alakú:

$$\frac{\partial u^*}{\partial t} = \frac{\partial^2 u^*}{\partial x^2},$$

$$u^*(x, 0) = u_0(x) - x, \tag{4.10}$$

$$u^*(0, t) = 0 = u^*(1, t) = 0.$$

Ekkor az $u_0(x) - x$ kezdeti függvény is konkáv, hiszen második deriváltja nem pozitív. Emellett a függvény nemnegatív is, ugyanis az x tengely $[0, 1]$ szakasza az $u_0(x) - x$ függvény húrja.



Jelölje \tilde{y}_i^n az u^* függvény közelítését a rácsháló pontjaiban, azaz $\tilde{y}_i^n \sim u^*(x_i, t_n)$, ebből következik, hogy $u(x_i, t_n) \sim \tilde{y}_i^n + u_p(x_i) = \tilde{y}_i^n + x_i = y_i^n$. Ekkor ha \tilde{y}_i^n nemnegatív, akkor y_i^n is az.

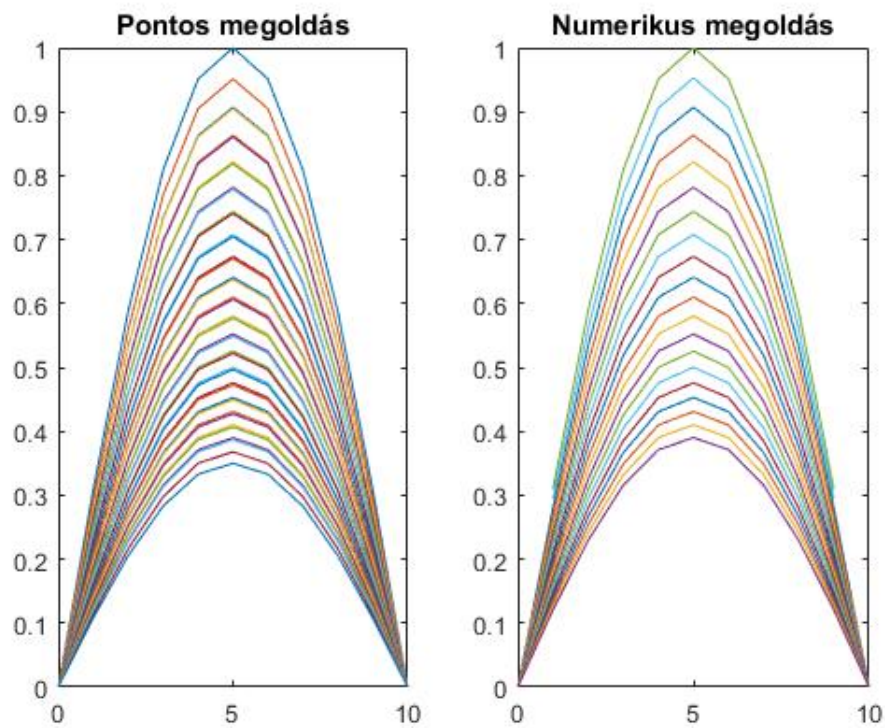
Az előző egyenletben $y_0 \in \mathbb{R}^N$, $(y^0)_i = u_0(x_i)$. A (4.10) egyenletben pedig $y_0 \in \mathbb{R}$, $(y_0)_i = u_0(x_i) - x_i$. Így a továbbiakban elegendő a homogenizált peremfeltételre vizsgálnunk (4.7) feltétel érvényességét, vagyis azt, hogy a (4.7) tulajdonság átöröklődik-e n index növelésével. (Az y_0 és y_1 "jóságával" most nem foglalkozunk, mert ezt elérhetjük az alkalmasan megválasztott egy lépéses módszerrel.)

Kulcskérdésünk, hogy az n -edik közelítési érték, azaz y_n megőrzi-e az előző numerikus értékek jó tulajdonságait.

4.3. Numerikus kísérletek és sejtések

A fenti elméleti megállapítások igazolására írtunk egy MATLAB programot, mely eredménye alátámasztotta sejtéseinket. A program bemeneti paraméterei a következők: T , amely az időintervallumot, n , ami az időbeli felbontást és N , ami a térbeli felbontást jelöli. A programban y_1 -et Implicit Euler módszerrel közelítettük. Több kezdeti függvényt is kipróbáltunk, ezekre mutatunk pár példa esetet.

- Az első esetben a kezdeti függvény $\sin x$. Futtatási bemenetek: $T = 1$, $q = 0,506$, $\tau = \frac{1}{20}$ és $h = \frac{\pi}{10}$.



Az ábrán a vízszintes tengely a térbeli felosztást, a függőleges tengely pedig az időbeli felosztást mutatja.

A futtatás során ellenőriztük a 4.1 Állítás és a 4.3 Tétel feltételeit, melyek minden lépésben teljesültek. A futtatásunk tizenkilencedik lépésének eredményeit a 4.1 táblázat szemlélteti. Az egyes sorokban a feltételekből készített vektorok szerepelnek, míg az oszlopokban az adott vektorok egyes koordinátái láthatóak.

Koordináták	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$4y_{19} - y_{18}$	0.3737	0.7108	0.9783	1.1501	1.2093	1.1501	0.9783	0.7108	0.3737
$y_{19} - y_{18}$	-0.00641	-0.0123	-0.0169	-0.0198	-0.0209	-0.0198	-0.0169	-0.0123	-0.0064
Qy_{19}	-0.1257	-0.2390	-0.3290	-0.3868	-0.4067	-0.3868	-0.3290	-0.2390	-0.1257

4.1. táblázat. A 19-edik lépésben az egyes feltételek értékei

Láthatjuk, hogy mindegyik feltétel teljesül, azaz (y_n) monoton csökkenő, konkáv sorozat, amely teljesíti a $4y_n \geq y_{n-1}$ feltételt.

Koordináták	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Qy_1	-0.2780	-0.5288	-0.7278	-0.8556	-0.8996	-0.8556	-0.7278	-0.5288	-0.2780
Qy_2	-0.2646	-0.5032	-0.6926	-0.8143	-0.8562	-0.8143	-0.6926	-0.5032	-0.2646
Qy_3	-0.2518	-0.4789	-0.6591	-0.7749	-0.8147	-0.7749	-0.6591	-0.4789	-0.2518
Qy_4	-0.2396	-0.4557	-0.6272	-0.73749	-0.7753	-0.7374	-0.6272	-0.4557	-0.2396
Qy_5	-0.2280	-0.4337	-0.5969	-0.7017	-0.7378	-0.7017	-0.5969	-0.4337	-0.2280

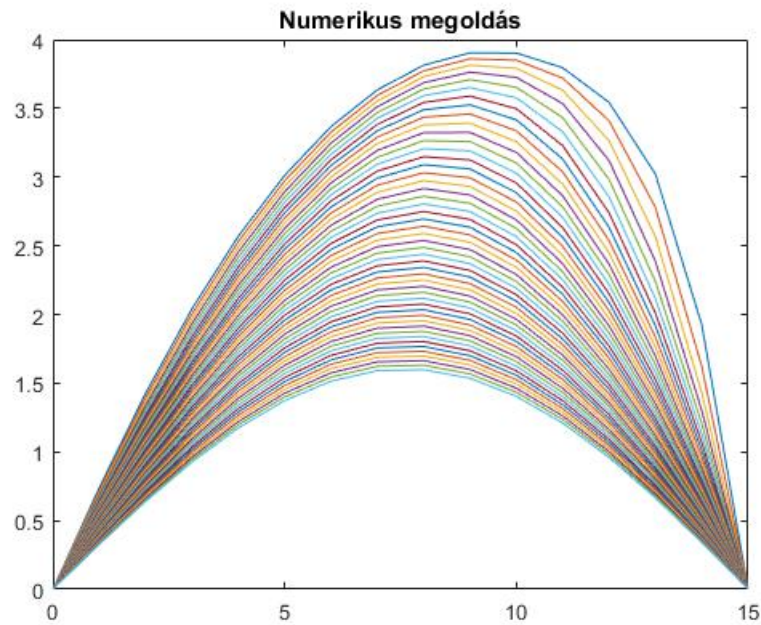
4.2. táblázat. Qy_i értékei az első öt lépésben

A 4.1 és a 4.2 táblázatok azt is mutatják, hogy a módszer megőrzi a konkávitást, sőt a Qy_i vektorra teljesül a

$$Qy_1 \geq Qy_2 \geq \dots \geq Qy_{n-2} \geq Qy_{n-1}$$

monotonitási reláció.

- A második esetben a kezdeti függvény $(x - 2)^2 + 4$. Futtatási bemenetek: $T = 1$, $q = 0,4559$, $\tau = \frac{1}{50}$ és $h = \frac{1}{5}$.



A feltételek az előző esethez hasonlóan itt is teljesültek.

A numerikus kísérletek során megfigyeltünk egy szükséges feltételt, miszerint a 4.1 Állítás és a 4.3 Tétel feltételei csak akkor teljesülnek, ha $\tau \leq \frac{1}{2}$. A fenti kísérletek alapján a következő sejtés fogalmazható meg.

4.4. Sejtés. A korábbiakban definiált y_n vektorra teljesülnek a következő tulajdonságok:

1. (y_n) monoton csökken,
2. $4y_n \geq y_{n-1}$,
3. $(Qy_n) \leq 0$,
4. (Qy_n) monoton csökken.

4.4. A numerikus kísérletek tapasztalatainak elméleti belátása

Tegyük fel, hogy $4y_{n-1} \geq y_{n-2} \geq y_{n-1} \geq 0$. Mutassuk meg, hogy ekkor a BDF2-vel számolt y_n esetén teljesül

$$4y_n \geq y_{n-1} \geq y_n \geq 0. \quad (4.11)$$

Először a 4.4 sejtés első állítását ellenőrizzük, azaz hogy az (y_n) sorozat monoton csökkenő. Nyilvánvalóan

$$y_{n-1} - y_n = y_{n-1} - \left(\frac{4}{3}By_{n-1} - \frac{1}{3}By_{n-2}\right) = y_{n-1} - By_{n-1} + \frac{1}{3}B(y_{n-2} - y_{n-1}).$$

Ez tovább alakítható

$$(I - B)y_{n-1} + \frac{1}{3}B(y_{n-2} - y_{n-1}) \geq 0 \quad (4.12)$$

alakba, ahol tudjuk, hogy

$$y_{n-2} - y_{n-1} \geq 0,$$

így a (4.12) nemnegativitásához elég belátni, hogy

$$(I - B)y_{n-1} \geq 0.$$

Ezt a feltételt ellenőrizve kapjuk, hogy

$$I - B = I - \left(I - \frac{2}{3}\tau Q\right)^{-1} = \left(I - \frac{2}{3}\tau Q - I\right)\left(I - \frac{2}{3}\tau Q\right)^{-1} = -\frac{2}{3}\tau QB \quad (4.13)$$

4.5. Megjegyzés. Legyenek A_1 és A_2 két tetszőleges mátrix. Ekkor

$$A_1 \cdot A_2 = A_2 \cdot A_1,$$

akkor és csak akkor, ha a sajátvektor-rendszerük megegyezik.

Ha A_1 és A_2 mátrixok egyenletesen kontinuánsok (azaz tridiagonális mátrixok), akkor sajátvektoraik megegyeznek, hiszen (2.17) alapján a sajátvektorok nem függenek a tridiagonális mátrixban szereplő elemektől, csak a bázisvektoroktól.

Mivel Q is és B is tridiagonális mátrixok, ezért egymással kommutálnak, azaz $QB = BQ$.

Így, ha

$$-\frac{2}{3}\tau BQy_{n-1} \geq 0, \quad (4.14)$$

akkor teljesül a feltétel.

A B mátrix nemnegativitása a fenti bizonyítás alapján minden τ és h értékre teljesül, Qy_{n-1} -ről pedig sejtésünkben feltettük, hogy konkáv (azaz ≤ 0), így (4.14) feltétel mindig teljesül.

Tehát a 4.4 Sejtés első állítását beláttuk.

Most tekintsük a konkávitás öröklődését, azaz a 4.4 Sejtés harmadik állítását. Azt kell belátnunk, hogy ha $Qy_{n-2} \leq 0$ és $Qy_{n-1} \leq 0$ akkor ebből következik, hogy $Qy_n \leq 0$, azaz

$$Qy_{n-1} \leq 0 \implies Qy_n \leq 0. \quad (4.15)$$

Mivel Q és B kommutálnak, így (4.6) miatt

$$Qy_n = QB \left[\frac{4}{3}y_{n-1} - \frac{1}{3}y_{n-2} \right] = BQ \left[\frac{1}{3}(y_{n-1} - y_{n-2}) + y_{n-1} \right] = B \left[\frac{1}{3}Q(y_{n-1} - y_{n-2}) \right] + BQy_{n-1}, \quad (4.16)$$

ahol $BQy_{n-1} \leq 0$.

A 4.4 Sejtés negyedik állítását feltéve (amelyet a numerikus kísérletek alátámasztanak) a konkáv vektorok sorozata monoton csökken. Ekkor $0 \geq Qy_{n-1} \geq Qy_n$. Nyilvánvalóan elég csak a második egyenlőtlenséget megmutatni, azaz belátandó

$$Qy_{n-1} - Qy_n \geq 0.$$

Ezt tovább alakítva

$$\begin{aligned} Qy_{n-1} - Qy_n &= Qy_{n-1} - Q \left(\frac{4}{3}By_{n-1} - \frac{1}{3}By_{n-2} \right) = Qy_{n-1} - Q \left[\frac{1}{3}By_{n-1} - \frac{1}{3}By_{n-2} + By_{n-1} \right] = \\ &= Qy_{n-1} - \frac{1}{3}QB(y_{n-1} - y_{n-2}) - QB y_{n-1} = (I - B)Qy_{n-1} - \frac{1}{3}B [Q(y_{n-1} - y_{n-2})]. \end{aligned}$$

Mivel $I - B = -\frac{2}{3}\tau QB$ (4.13) alapján, ezért

$$Qy_{n-1} - Qy_n = -\frac{2}{3}\tau QB(Qy_{n-1}) - \frac{1}{3}B [Qy_{n-1} - Qy_{n-2}]$$

alakban írható fel.

Mivel feltettük, hogy $Qy_{n-2} \geq Qy_{n-1}$, ezért az egyenlet második tagja nemnegatív lesz. Az első tagban $Qy_{n-1} \leq 0$, azaz a korábbi függvény konkávitása megőrződik az iteráció során. Feltesszük, hogy a Q -val való szorzás is megőrzi a konkávitást, azaz $Q^2y_n \leq 0$. (Ezt a numerikus kísérleteink is alátámasztják.) Így az első tag is nemnegatív, azaz a fenti korlátozó feltevés mellett a 4.4 Sejtés negyedik állítása is érvényes. Ezzel együtt a 4.4 Sejtés harmadik állítását is beláttuk.

Összegezve: Megmutattuk, hogy a 4.4 Sejtés négy állítása mellett a BDF2 megfelelő konkáv kezdeti vektorokkal nemnegatív y_n vektort állít elő.

Összegzés

A dolgozat során a motiváció felírása után bevezettük a szükséges elméleti fogalmakat, azaz a Laplace-operátort, a gyenge megoldást. Bebizonyítottuk a maximum-minimum elvet parabolikus egyenletekre. Felírtuk az M -mátrixok definícióját és a rájuk vonatkozó legfontosabb tételeket, definiáltuk a lineáris többlépéses módszereket.

Ezek után magát a hővezetési egyenletet vezettük be, majd a feladat numerikus megoldását.

Ismertettük az egy lépéses módszerek körében eddig elért eredményeket először véges elemes esetben, majd a véges differenciák módszerére.

Ezután rátértünk a nemnegativitás öröklődésére a BDF2 módszerrel. A módszer alakjából előállítottuk azokat a feltételeket, amelyekkel a nemnegativitás öröklődik. A elméleti megállapítások ellenőrzésére írt MATLAB programot is bemutattuk, ennek segítségével pedig felállítottunk egy sejtést, amely mellett teljesül a nemnegativitás. Ezek után a sejtés egyes feltételeit elméletileg is beláttuk.

Irodalomjegyzék

- [1] Besenyei Ádám, Komornik Vilmos, Simon László : Parciális differenciálegyenletek (2013)
- [2] Faragó István, Horváth Róbert: Numerikus módszerek (2013)
- [3] Faragó István, Haróten Hariton, Komáromi Nándor, Pfeil Tamás: A hővezetési egyenlet és numerikus megoldásának kvalitatív tulajdonságai I. Az elsőfokú közelítések nemnegativitása (1993)
- [4] Abraham Berman, Robert J. Plemmons : Nonnegative Matrices in the Mathematical Sciences (1994)

Köszönetnyilvánítás

Szeretném megköszönni témavezetőmnek, Faragó Istvánnak szakmai támogatását, mindenkor pozitív hozzáállását, amellyel hozzájárult a dolgozat elkészüléséhez. Köszönöm iránymutatását és azt, hogy szívvel-lélekkel segítette munkámat.

Köszönöm szüleimnek, akik életem során mindig támogattak, így eljuthattam idáig. Köszönet a családomnak, barátomnak, és barátaimnak, akik mindig mindenben mellettem álltak.