A Lamm-féle parciális differenciálegyenlet megoldása

Szepesvári István

Koncentráció vizsgálatnál lép fel a következő ún. Lamm-féle differenciálegyenlet:

$$\frac{\partial c(r,t)}{\partial t} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[rD\frac{\partial c(r,t)}{\partial r} - S\omega^2 r^2 (r,t)\right]$$

a

$$c = c_0 \qquad (r_1 \leq r \leq r_2\,, \quad t = 0)$$

kezdeti feltétel, és a

$$D\frac{\partial c(r,t)}{\partial r} = S\omega^2 r_1 c(r,t) \qquad (r = r_1,\ t > 0)$$

$$D\frac{\partial c(r,t)}{\partial r} = S\omega^2 r_2 c(r,t) \qquad (r = r_2,\ t > 0)$$

határfeltételek mellett. A képletekben $c(r,t)$ a koncentrációfüggvény, r a forgási centrumtól mért távolság, t az idő, $D = D_0(1+kc)$ ill. $S = \frac{S_0}{1+k_1 c}$ a diffuziós ill. a szedimentációs együttható, mindkettő függhet a koncentrációtól. c_0 a kezdeti koncentráció, D_0 a diffuziós, S_0 a szedimentációs együttható, ω a szögsebesség, k, k_1, r_1 és r_2 konstansok.

Vezessük be a következő dimenzió nélküli paramétereket:

$$\left(\frac{r}{r_1}\right)^2 = x\,; \qquad \tau = 2\omega^2 S_0 t\,; \qquad \Theta(x,\tau) = \frac{c(r,t)}{c_0}\,;$$

$$\varepsilon = \frac{2D_0}{S_0\omega^2 r_1^2}\,; \qquad kc_0 = \beta\,; \qquad k_1 c_0 = \alpha$$

A Lamm-egyenlet ezekkel a jelölésekkel:

$$\frac{\partial\Theta}{\partial\tau} = \frac{\partial}{\partial x}\left\{x\left[\varepsilon(1+\beta\Theta)\frac{\partial\Theta}{\partial x} - \frac{\Theta}{1+\alpha\Theta}\right]\right\} \tag{1}$$

kezdeti feltétel:

$$(x, 0) = 1 \qquad \left(1 \le x \le \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^2\right)$$

határfeltételek:

$$(2) \qquad \varepsilon(1+\beta\Theta)\frac{\partial\Theta}{\partial x} = \frac{\Theta}{1+\alpha\Theta} \qquad (x = 1,\ \tau > 0)$$

$$(3) \qquad \varepsilon(1+\beta\Theta)\frac{\partial\Theta}{\partial x} = \frac{\Theta}{1+\alpha\Theta} \qquad \left(x = \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^2,\ \tau > 0\right)$$

$\Theta(x,\tau)$ valamely Γ határú G tartományon van értelmezve, ahol $1+\alpha\Theta \neq 0$. Feltesszük, hogy (1)-nek (adott $\alpha, \beta, \varepsilon$ esetén) létezik egyetlen – a kémiai jelenségnek megfelelő – legalább a negyedik rendig folytonos parciális deriváltakkal rendelkező megoldása. A fenti egyenlet csak közelítőleg oldható meg: esetünkben célszerű volt a véges differenciák módszerének alkalmazása.

A számításhoz tekintsük az alábbi két – koordináta tengelyekkel párhuzamos – egyenessereget:

$$x = x_0 + ih \qquad (i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

$$\tau = \tau_0 + j\ell \qquad (j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots).$$

Ezen egyenesek metszéspontjait rácspontoknak nevezzük. Két rácspont szomszédos, ha távolságuk x illetve τ irányban h illetve ℓ. Csak azokat a rácspontokat tekintjük, amelyek hozzátartoznak a $G+\Gamma$ halmazhoz, és a keresett $\Theta(x,\tau)$ függvénynek ezekben a rácspontokban adjuk meg értékeit. A rácspontok közül azokat, amelyeknek mind a négy szomszédos rácspontja benne fekszik ebben a halmazban, belső rácspontnak nevezzük. A belső rácspontok halmaza a hálótartomány, és G^*-gal jelöljük. Azokat a rácspontokat, amelyeknek legalább egy szomszédos rácspontja nem tartozik a G halmazához, határrácspontoknak nevezzük, és Γ^*-gal jelöljük. Minden $(x_0 + ih, \tau_0 + j\ell)$ rácspontban a differenciálhányadost differenciahányadossal közelítjük. A belső pontokban a következőképp:

$$\left(\frac{\partial\Theta}{\partial x}\right)_{i,j} \approx \frac{\Theta_{i+1,j} - \Theta_{i-1,j}}{2h}; \qquad \left(\frac{\partial\Theta}{\partial\tau}\right)_{i,j} \approx \frac{\Theta_{i,j+1} - \Theta_{i,j}}{\ell}$$

$$\left(\frac{\partial^2\Theta}{\partial x^2}\right)_{i,j} \approx \frac{\Theta_{i+1,j} - 2\Theta_{i,j} + \Theta_{i-1,j}}{h^2}$$

A határpontokban pedig így:

$$\left(\frac{\partial\Theta}{\partial\tau}\right)_{i,j} \approx \frac{\Theta_{i,j+1} - \Theta_{i,j}}{\ell} \quad (i = 0 \text{ vagy } n); \quad \left(\frac{\partial\Theta}{\partial x}\right)_{i,j} \approx \frac{\Theta_{i+1,j} - \Theta_{i,j}}{h}$$

$(i = 0$ vagy $n-1)$

Ezekkel a helyettesítésekkel (a differenciálások elvégzése után) a következőképp alakul az (1) egyenlet:

$$\Theta_{i,j+1} = \Theta_{i,j} + \ell\left\{\varepsilon(1+\beta\Theta_{i,j})x_i \frac{\Theta_{i+1,j} - 2\Theta_{i,j} + \Theta_{i-1,j}}{h^2} + \right.$$

(1*)

$$+\left[\varepsilon(1+\beta\Theta_{i,j}) - \frac{x_i}{(1+\alpha\Theta_{i,j})^2}\right]\frac{\Theta_{i+1,j} - \Theta_{i-1,j}}{2h} -$$

$$\left. - \frac{\Theta_{i,j}}{1+\alpha\Theta_{i,j}} + \varepsilon\beta x_i \left(\frac{\Theta_{i+1,j} - \Theta_{i-1,j}}{2h}\right)^2\right\}$$

A peremfeltételek így változnak:

(2*) $$\varepsilon(1+\beta\Theta_{0,j})\frac{\Theta_{1,j} - \Theta_{0,j}}{h} = \frac{\Theta_{0,j}}{1+\alpha\Theta_{0,j}}$$

(3*) $$\varepsilon(1+\beta\Theta_{n,j})\frac{\Theta_{n,j} - \Theta_{n-1,j}}{h} = \frac{\Theta_{n,j}}{1+\alpha\Theta_{n,j}}$$

Ismerve a $\Theta_{i,j}$ (j rögzített, $i = 0,1,\dots,n$) értékeket (tehát esetünkben kiindulva a $\Theta(ih,0) = 1$ értékekből) az (1*) egyenlet segítségével meghatározhatók a $\Theta_{i,j+1}$ $(i = 1,2,\dots,n-1)$ értékek, a (2*) és (3*) egyenletből pedig a $\Theta_{0,j+1}$ és $\Theta_{n,j+1}$ értékek. Ha $\beta \neq 0$, $\alpha \neq 0$; akkor a (2*) és (3*) egyenlet harmadfokú, amely például Newton módszerrel megoldható.

A kémiai kisérleteknek megfelelően nálunk a $G+\Gamma$ halmaz téglalap $(1 \leq x \leq 1{,}4;\ 0 \leq \tau \leq L)$. Különösen fontos a különböző $\varepsilon, \alpha, \beta$ értékekre számolt $\Theta(x,\tau)$ függvény viselkedése az $x = 1$ határvonal közelében, ezért a lépésköz az $1 \leq x \leq 1{,}05$ intervallumban $h_1 = 0{,}005$, $\ell_1 = \frac{1}{2}h_1^2$; az $1{,}05 \leq x \leq 1{,}4$ szakaszon $h_2 = 0{,}025$, $\ell_2 = 0{,}02 \cdot h_2^2 = \ell_1$.

A számitásokhoz az MTA Számitástechnikai Központjában készült program EFT autókódban, amely az URAL-2 számológépen futott le.

A továbbiakban az alkalmazott numerikus eljárás hibájának becslését adjuk meg. A véges differenciák módszere esetén a differenciálegyenletet differenciaegyenlettel közelítettük. Attól függően, hogy milyen különbségi formulákat használunk különböző pontosságú közelítéseket kapunk.

Keressük az

(4) $$Lu = f$$

differenciálegyenlet G tartománybeli megoldását a következő peremfeltételekkel:

(5) $$\ell_i(u) = \varphi_i \qquad (i = 1,2,\dots,m),$$

ahol f a G-n, φ_i a Γ_i határon adott függvény, L és ℓ_i differenciáloperátorok. Az L operátort a G^* hálótartományon értelmezett u_h függvényekre ható R_h differenciaoperátorral helyettesítjük:

(6) $$R_h u_h = f_h,$$

ahol R_h valamely $G_0^* \subset G^*$ halmazon van értelmezve, f_h a G_0^*-on van adva, és G_0^* pontjaiban megegyezik f-el. A megfelelő különbségi határfeltételek:

(7) $$r_{ih}(u_h) = \varphi_{ih} \qquad (i = 1,2,\dots,m),$$

ahol r_{ih} a Γ_i^*-on adott u_h függvényekre hat. és valamely $\Gamma_{i0}^* \subset \Gamma_i^*$ halmazon van értelmezve, a φ_{ih} függvények pedig a φ_i függvényeknek valamilyen módon megfeleltetett Γ_{i0}^*-on értelmezett függvények. A megfeleltetés módja attól függ, hogyan vittük át a határfeltételeket Γ_i-ről Γ_i^*-ra.

Legyen U és F a $G-n$, Φ_i $(i = 1,2,\dots,m)$ pedig a Γ_i-n értelmezett olyan függvényosztály, hogy $u \in U$ esetén értelmezve legyen $L(u)$ és $\ell_i(u)$, ekkor $L(u) \in F$ és $\ell_i(u) \in \Phi_i$. Feltesszük, hogy minden egyes függvényosztályban létezik a szokásos tulajdonságokkal rendelkező norma.

Jelöljük ezeket így: $\|u\|_U$, $\|f\|_F$, $\|\varphi_i\|_{\Phi_i}$. Legyen a G^*-on adott u_h függvényekre értelmezve az $\|u_h\|_{U_h}$, a G_0^*-on adott f_h függvényekre az $\|f_h\|_{F_h}$, és a Γ_{i0}^*-on adott φ_{ih} függvényekre a $\|\varphi_{ih}\|_{\Phi_{ih}}$ norma. A G-n értelmezett $u \in U$, $f \in F$ függvények G^*-on is értelmezve vannak, így értelmesek az $\|u\|_{U_h}$, $\|f\|_{F_h}$ normák, az R_h alkalmazható az U elemeire stb. Feltesszük, hogy az $\|\ \|_{U_h}$, $\|\ \|_{F_h}$, $\|\ \|_{\Phi_{ih}}$ normák olyanok, hogy bármely $u \in U$, $f \in F$ és $\varphi_i \in \Phi_i$ esetén léteznek az alábbi határátmenetek: $\|u\|_{U_h} \longrightarrow \|u\|_U$; $\|f\|_{F_h} \longrightarrow \|f\|_F$; $\|\varphi_{ih}\|_{\Phi_{ih}} \longrightarrow \|\varphi_i\|_{\Phi_i}$ $(i = 1,2,\dots,m)$ $h \longrightarrow 0$ esetén. Ebben az esetben azt mondjuk, hogy a megfelelő normák összeegyeztethetők.

Azt mondjuk, hogy a (6) különbségi egyenlet a (7) határfeltételekkel approximálja a (4) differenciálegyenletet az (5) peremfeltételekkel az U függvényosztályon, ha bármely $u \in U$ függvényre $h \to 0$

esetén $\| Lu - R_h u \|_{F_h} \to 0$

$$\| [l_i(u)]_{i,h} - r_{i,h}(u) \|_{\Phi_{i,h}} \to 0 \qquad (i = 1, 2, \dots, m),$$

ahol $[l_i(u)]_{i,h}$ -val jelöljük azt az operátort, amelyet akkor kapunk, ha a határfeltételeket Γ_i-ről Γ_i^*-ra átvisszük.

Továbbá: a különbségi approximáció rendje k, ha bármely $u \in U$ függvényre, és $0 < h < h_0$ esetén teljesül

$$\| Lu - R_h u \|_{F_h} \leq h^k M$$

$$\| l_i(u)_{i,h} - r_{i,h}(u) \|_{\Phi_{i,h}} \leq h^k M_i \qquad (i = 1, 2, \dots, m),$$

ahol M és M_i nem függ h -tól.

Használjuk a következő egyenlőségeket:

$$\frac{\Theta(x_i + h, \tau_k) - \Theta(x_i - h, \tau_k)}{2h} = \Theta'_x(x_i, \tau_k) + \frac{h^2}{6} u'''_{x^3}(y_1, \tau_k),$$

ahol $(x_i - h < y_1 < x_i + h)$,

$$\frac{\Theta(x_i + h, \tau_k) - 2\Theta(x_i, \tau_k) + \Theta(x_i - h, \tau_k)}{h^2} = \Theta''_{x^2}(x_i, \tau_k) + \frac{h^2}{12} \Theta^{IV}_{x^4}(y_2, \tau_k)$$

$(x_i - h < y_2 < x_i + h)$,

$$\frac{\Theta(x_i + h, \tau_k) - \Theta(x_i, \tau_k)}{h} = \Theta'_x(x_i, \tau_k) + \frac{h}{2} \Theta''_{x^2}(y_3, \tau_k)$$

$(x_i < y_3 < x_i + h)$,

$$\frac{\Theta(x_i,\tau_k)-\Theta(x_i-h,\tau_k)}{h} = \Theta'_x(x_i,\tau_k)-\frac{h}{2}\Theta''_{x^2}(y_4,\tau_k)$$

$$(x_i-h<y_4<x_i)$$

$$\frac{\Theta(x_i,\tau_k+\ell)-\Theta(x_i,\tau_k)}{\ell} = \Theta'_\tau(x_i,\tau_k)+\ell\,\Theta''_{\tau^2}(x_i,z_1)$$

$$(\tau_k<z_1<\tau_k+\ell)$$

amelyeket könnyen megkaphatunk, ha a bal oldalakat Taylor sorba fejtjük. Ezeket használva az (1*), (2*) és (3*) egyenlet esetében (a továbbiakban csak a $\beta = 0$ esetre számolunk, de ugyanígy kapnánk hasonló becsléseket $\beta \neq 0$ -ra):

$$R_h\Theta_{ik} = -\frac{\partial}{\partial\tau}\Theta(x_i,\tau_k)-\ell\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}\Theta(x_i,z_1)+\varepsilon x_i\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Theta(x_i,\tau_k)+$$

$$+\frac{h^2}{12}\frac{\partial^4}{\partial x^4}\Theta(y_2,\tau_k)+\left(\varepsilon-\frac{x_i}{(1+\alpha\Theta_{ik})^2}\right)\frac{\partial}{\partial x}\Theta(x_i,\tau_k)+$$

$$+\frac{h^2}{6}\frac{\partial^3}{\partial x^3}\Theta(y_1,\tau_k)-\frac{\Theta_{ik}}{1+\alpha\Theta_{ik}} = [L\Theta]_{i,k}+D_{ik},$$

és $\quad |D_{ik}| \le h^2\left(\alpha M_2+\frac{\varepsilon}{12}\cdot a\cdot M_4+\frac{1}{6}b\cdot M_3\right),$

ahol $\quad \alpha = \dfrac{\ell}{h^2}, \qquad M_2 = \max\limits_{\bar G}\left|\dfrac{\partial^2\Theta}{\partial x^2}\right| \qquad$ ($\bar G$ a G lezártja)

$$M_3 = \max_{\bar G}\left|\frac{\partial^3\Theta}{\partial x^3}\right|; \qquad M_4 = \max_{\bar G}\left|\frac{\partial^4\Theta}{\partial x^4}\right|; \qquad a = \max_{\bar G}|x|$$

$$b = \max_{\bar{G}} \left| \varepsilon - \frac{x}{(1+\alpha\Theta)^2} \right| .$$

$$\varepsilon\left[\frac{\partial}{\partial x}\Theta(x_i,\tau_k) \pm \frac{h}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Theta(y_3,\tau_k)\right] - \frac{\Theta_{ik}}{1+\alpha\Theta_{ik}} = 0$$

$$r_{ih} = [\ell_i\Theta]_{i,k} \pm d_1,$$

ahol $|d_1| \leq h\frac{\varepsilon}{2}M_2$.

Igy, mivel esetünkben $\| \quad \|_{F_h} = \max_{G^*} |R_h\Theta|$, $\| \quad \|_{\Phi_{ih}} = \max_{\Gamma^*} |r_{ih}\Theta|$, ezért a közelítés rendje a G^* tartományban másodrendű, a határon pedig elsőrendű.

Az előbbiek alapján a megoldás hibáját is becsülni tudjuk. Legyen ugyanis Θ a pontos, Θ_h a közelítő megoldás: $\Theta_h = \Theta + \varepsilon_h$. ε_h közelíthető így: $\varepsilon_h \approx k(x,\tau)h^n$, ahol n az approximáció rendje, $k(x,\tau)$ nem függ h -tól, és feltesszük, hogy $k(x,\tau)$ legalább másodrendben differenciálható. Ekkor, mivel $R_h\Theta_h = L\Theta = 0$

$$\| L\Theta - R_h\Theta \|_{F_h} = \| R_h\Theta_h - R_h\Theta \|_{F_h} = \| P_h(\Theta) \|_{F_h} h^n \leq Mh^2,$$ ahol M

konstans, és

$$P_h(\Theta) = \frac{k_{i,j+1} - k_{i,j}}{\ell} + x_i \frac{k_{i+1,j} - 2k_{i,j} + k_{i-1,j}}{h^2} +$$

$$+ \varepsilon \frac{k_{i+1,j} - k_{i-1,j}}{2h} - \frac{k_{i+1,j} - k_{i-1,j}}{2h} \cdot \frac{x_i}{[1+\alpha(\Theta_{i,j} + k_{i,j}h^n)]^2} +$$

$$+ x_i \frac{2\alpha k_{i,j}(1+\alpha\Theta_{i,j}) + \alpha^2 k_{i,j}^2 h^n}{[[1+\alpha(\Theta_{i,j} + k_{i,j}h^n)](1+\alpha\Theta_{i,j})]^2} \cdot \frac{\Theta_{i+1,j} - \Theta_{i-1,j}}{2h} -$$

$$-\frac{k_{i,j}}{1+\alpha(\Theta_{i,j}+k_{i,j}h^n)}+\frac{\alpha k_{i,j}\Theta_{i,j}}{(1+\alpha\Theta_{i,j})[1+\alpha(\Theta_{i,j}+k_{i,j}h^n)]} .$$

Ha h (és ℓ) $\longrightarrow 0$, akkor $P_h(\Theta) \longrightarrow K$, ahol K konstans, vagyis $\| P_h(\Theta) \|_{F_h}$ korlátos. Ezért, minthogy $|h| < 1$,csakis $n \geq 2$ lehet. Igy tehát a hiba rendjére a G^*-on: $n \geq 2$
Ugyanilyen módon:

$$\| [\ell_i\Theta]_{i,h} - r_{i,h} \|_{\Phi_{i,h}} = \| r_{i,h}\Theta_h - r_{i,h}\Theta \|_{\Phi_{i,h}} = \| P_h(\Theta) \|_{\Phi_{i,h}} h^n \leq h M_1$$

és kapjuk, hogy $n \geq 1$ a Γ^*-on.

A továbbiakban a Runge-elvet alkalmazzuk. Legyen $\Theta_h(x,\tau)$ illetve $\Theta_{2h}(x,\tau)$ h illetve $2h$ lépésközzel kapott közelítő megoldás. Ekkor, ha $\Theta(x,\tau)$ a pontos megoldás, akkor

$$\Theta_h(x,\tau) = \Theta(x,\tau)+\varepsilon_h(x,\tau), \qquad \Theta_{2h}(x,\tau) = \Theta(x,\tau)+\varepsilon_{2h}(x,\tau)$$

vagy $\Theta_h - \Theta_{2h} = \varepsilon_h - \varepsilon_{2h}$.

Mivel $\varepsilon_h(x,\tau) \approx k(x,\tau)h^n$, azért $\varepsilon_{2h} \approx k(x,\tau)2^n h^n \approx 2^n \varepsilon_h(x,\tau)$.

Igy $\Theta_h - \Theta_{2h} \approx [2^n-1]\,\varepsilon_h(x,\tau)$, ahonnan

$$\varepsilon_h(x,\tau) = \frac{\Theta_h - \Theta_{2h}}{2^n-1} .$$

Feladatunkban a legnagyobb hiba általában $\varepsilon \approx 0{,}01$ a G^*-on, $\varepsilon \approx 0{,}03$ a Γ^*-on.

Irodalom

Березин–Жидков: Методы вычислений II.

Summary

Solution of Lamm's partial differential equation.

The paper deals with the solution of the Lamm-type nonlinear parabolic differential equation by the method of the finite differences. The error of this approximative method is also estimated.

Резюме

Решение уравнения Ламма в частных производных

Статья занимается решением нелинейного параболического дифференциального уравнения типа Ламм методом сеток. Рассматривается оценка погрешности этого приближенного метода.