

XI.  
RÓWNANIA ELIPTYCZNE

# 1 Klasyfikacja równań różniczkowych cząstkowych drugiego rzędu

Wiele problemów w fizyce opisywanych jest za pomocą równań różniczkowych cząstkowych drugiego rzędu. Ten krótki wstęp zawiera przypomnienie ogólnej klasyfikacji równań różniczkowych cząstkowych.

Dla dwóch zmiennych niezależnych  $(x, y)$  ogólna postać tych równań jest następująca:

$$a \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + d \frac{\partial \psi}{\partial x} + e \frac{\partial \psi}{\partial y} + f \psi + g = 0, \quad (1)$$

gdzie  $\psi = \psi(x, y)$  jest zmienną zależną (funkcją szukaną),  $a, b, c, d, e, f, g$  są to bądź stałe liczbowe bądź funkcje zmiennych niezależnych  $x$  i  $y$ . Jeżeli funkcje te zależą dodatkowo od  $\psi$ , to równanie (1) jest **nieliniowe**.

W celu wprowadzenia klasyfikacji równań o ogólnej postaci (1) zakładamy, że  $a, b, c, d, e, f, g$  są liczbami.

Definiujemy wielkość

$$\Delta \stackrel{def}{=} b^2 - 4ac. \quad (2)$$

Jeżeli  $\Delta < 0$ , to równanie (1) nazywamy **równaniem eliptycznym**,

jeżeli  $\Delta = 0$ , równanie (1) jest **równaniem parabolicznym**,

a jeżeli  $\Delta > 0$ , to jest to **równanie hiperboliczne**.

## 2 Zastosowanie eliptycznych równań różniczkowych cząstkowych

(1) problemy z warunkami brzegowymi, opisane równaniem Poissona

(2) niezależne od czasu równanie Schrödingera

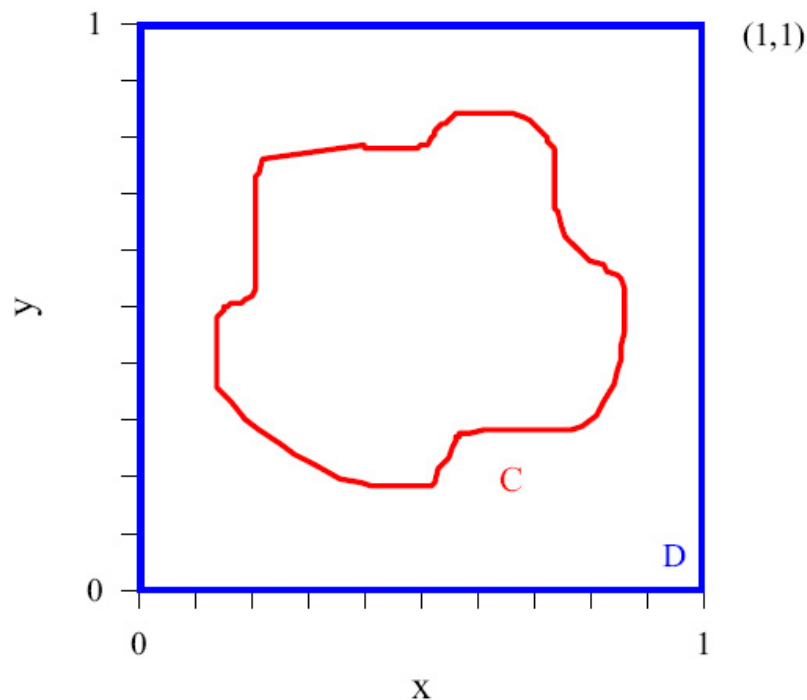
## 3 Równanie Poissona w 2D

### Równanie Poissona w 2D

W przestrzeni dwuwymiarowej (2D) wiele problemów z nałożonymi warunkami brzegowymi opisanych jest za pomocą równań eliptycznych o postaci

$$-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \varphi(x, y) = S(x, y). \quad (3)$$

Przykładowe zastosowania równania (3):



Rys. 1. Obszar  $D$  i kontur  $C$ .

(i) **Obliczanie potencjału elektrostatycznego (typowe równanie Poissona)**

W tym przypadku  $\varphi = \varphi(x, y)$  jest potencjałem elektrostatycznym, a  $S = S(x, y)$  jest funkcją źródła, określoną przez rozkład ładunku

$$S(x, y) = \varrho(x, y)/\varepsilon_0 .$$

(ii) **Równanie opisujące stacjonarny przepływ ciepła**

W tym przypadku  $\varphi(x, y) \equiv T(x, y)$  jest temperaturą w punkcie  $(x, y)$ , a  $S(x, y)$  jest szybkością ogrzewania lub chłodzenia.

Problem opisany równaniem (3) jest dobrze postawiony, jeżeli zadane są **warunki brzegowe** na brzegach obszaru  $D$  określoności funkcji  $\varphi(x, y)$ . Warunki te mogą też być zadane na dowolnej krzywej  $C$  wewnątrz obszaru  $D$ . Dla wygody dalszych rozważań wybieramy obszar  $D$  jako kwadrat jednostkowy na płaszczyźnie  $x - y$ .

Warunki brzegowe dla równania (3) można zadać w jednej z następujących postaci:

- (1) **postać Dirichleta**: zadana jest funkcja  $\varphi(x, y)$  na brzegach obszaru  $D$  i ewentualnie na krzywej  $C$ ,

- (2) **postać Neumanna**: zadane są pochodne normalne funkcji  $\varphi(x, y)$  na brzegach obszaru  $D$ ,
- (3) **postać Cauchy'ego (mieszana)**: zadana jest liniowa kombinacja funkcji  $\varphi(x, y)$  i jej pochodnych normalnych na brzegach obszaru  $D$ .

## 4 Problemy własne: równanie Schrödingera niezależne od czasu

Równanie to ma postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi(x, y) + U(x, y)\psi = E\psi(x, y). \quad (4)$$

W tym przypadku warunki brzegowe zadane są w postaci Dirichleta. Równanie (4) może być rozwiązywane podobnie do równania (3). W związku z tym w dalszym ciągu wykładu skoncentrujemy się nad metodami numerycznymi rozwiązania równania (3).

Należy jedynie zauważyć, że w równaniu Schrödingera występuje dodatkowa niewiadoma: wartość własna  $E$ , którą znajdujemy np. z warunków brzegowych nałożonych na funkcję falową.

Funkcja falowa  $\psi$  spełnia ponadto warunek unormowania

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dy |\psi(x, y)|^2 = 1. \quad (5)$$

## 5 Dyskretyzacja równania eliptycznego

Na płaszczyźnie  $x - y$  wprowadzamy sieć węzłów o stałej sieci  $h$ , która jest jednakowa w obu kierunkach (sieć węzłów jest jednorodna).

Definiujemy węzły sieci  $(x_i, y_j)$  w sposób następujący:

$$x_i = ih, \quad i = 0, 1, \dots, N,$$

$$y_j = jh, \quad j = 0, 1, \dots, N.$$

Węzły sieci będziemy oznaczać wskaźnikami  $(i, j)$ .

Definiujemy ponadto

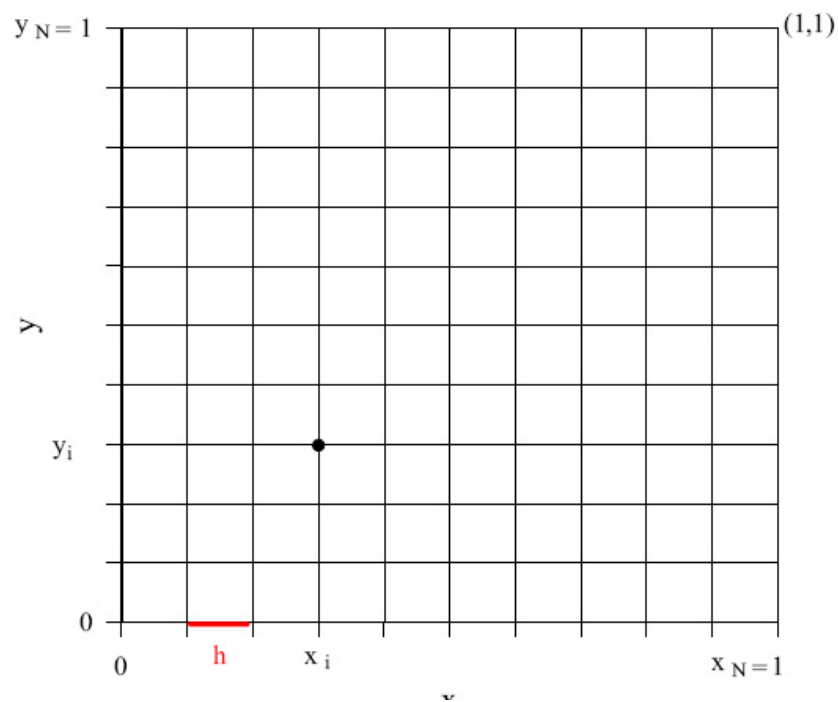
$$\varphi_{ij} \stackrel{def}{=} \varphi(x_i, y_j) \quad (6)$$

oraz

$$S_{ij} \stackrel{def}{=} S(x_i, y_j). \quad (7)$$

Stosujemy trójpunktowe przybliżenie drugiej pochodnej w każdym kierunku, czyli

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \Big|_{\substack{x_i=ih \\ y_j=jh}} \simeq \frac{\varphi_{i+1,j} - 2\varphi_{ij} + \varphi_{i-1,j}}{h^2}, \quad (8)$$



Rys. 2. Sieć węzłów w kwadracie jednostkowym na płaszczyźnie  $x - y$ .

oraz

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \Big|_{\substack{x_i=ih \\ y_j=jh}} \simeq \frac{\varphi_{i,j+1} - 2\varphi_{ij} + \varphi_{i,j-1}}{h^2}. \quad (9)$$

Otrzymujemy stąd równanie (3) w postaci różnicowej

$$-\left( \frac{\varphi_{i+1,j} - 2\varphi_{ij} + \varphi_{i-1,j}}{h^2} + \frac{\varphi_{i,j+1} - 2\varphi_{ij} + \varphi_{i,j-1}}{h^2} \right) = S_{ij}. \quad (10)$$

W celu uproszczenia zapisu definiujemy operatory różnicowe drugiego rzędu:

(i) dla wskaźnika  $i$

$$(\Delta_i^2 \varphi)_{ij} \stackrel{def}{=} \varphi_{i+1,j} - 2\varphi_{ij} + \varphi_{i-1,j}, \quad (11)$$

(ii) dla wskaźnika  $j$

$$(\Delta_j^2 \varphi)_{ij} \stackrel{def}{=} \varphi_{i,j+1} - 2\varphi_{ij} + \varphi_{i,j-1}. \quad (12)$$

Po wprowadzeniu operatorów różnicowych równanie (10) przyjmuje postać

$$-[(\Delta_i^2 \varphi)_{ij} + (\Delta_j^2 \varphi)_{ij}] = h^2 S_{ij}. \quad (13)$$

## 6 Jednowymiarowe równanie Poissona

W celu prostej ilustracji nowych metod numerycznych rozważamy równanie Poissona dla jednej zmiennej niezależnej, czyli odpowiednik równania (3) w przypadku jednowymiarowym.

$$-\frac{d^2 \varphi}{dx^2} = S(x). \quad (14)$$

Po dyskretyzacji równanie (14) przyjmuje postać

$$\varphi_{i-1} - 2\varphi_i + \varphi_{i+1} = -h^2 S_i. \quad (15)$$

Jest to układ liniowych równań algebraicznych na niewiadome  $\varphi_i$ .

## 7 Metoda macierzowa

Założmy, że zadane warunki brzegowe dla układu równań (15) mają postać

$$\varphi_0 = c_0, \quad \varphi_N = c_N. \quad (16)$$

Wtedy układ równań (15) można zapisać w postaci macierzowej

$$\mathbf{A}\Phi = \mathbf{C}. \quad (17)$$

We wzorze (17)  $\Phi$  i  $\mathbf{C}$  są  $(N + 1)$ -elementowymi macierzami jednokolumnowymi

$$\Phi = \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \varphi_1 \\ \vdots \\ \varphi_{N-1} \\ \varphi_N \end{pmatrix} \quad (18)$$

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} c_0 \\ -h^2 S_1 \\ \vdots \\ -h^2 S_{N-1} \\ c_N \end{pmatrix} \quad (19)$$

Natomiast  $\mathbf{A}$  jest macierzą kwadratową  $(N + 1) \times (N + 1)$  o postaci

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (20)$$

Układowi równań odpowiadającemu problemowi dwuwymiarowemu (13) można również nadać postać macierzową. Odpowiednia macierz będzie jednak bardziej złożona niż w przypadku jednowymiarowym.

W ten sposób problem Poissona z warunkami brzegowymi został zredukowany do zagadnienia polegającego na rozwiązywaniu układów równań liniowych o ogólnej postaci (17). Układy takie można rozwiązywać korzystając z tego, że odpowiednie macierze  $A$  są **rzadkie**, tzn. większość ich elementów jest równa zero.

Np. w przypadku jednowymiarowym jest to macierz trójprzekątniowa (20), dla której istnieją bardzo efektywne metody numeryczne.

## 8 Zasada wariacyjna

W celu lepszego zrozumienia treści fizycznej równania (3) oraz wprowadzenia metody iteracyjnej jego numerycznego rozwiązywania wyprowadzimy je jeszcze raz korzystając z zasady wariacyjnej. W celu uproszczenia zapisu rozważamy jednowymiarowy problem brzegowy (14).

Opisany jest on równaniem (14), czyli

$$-\frac{d^2\varphi}{dx^2} = S(x). \quad (21)$$

Warunki brzegowe mają postać

$$\varphi(0) = \varphi_0, \quad \varphi(1) = \varphi_N . \quad (22)$$

Definiujemy wielkość  $E$  będącą funkcjonałem funkcji  $\varphi(x)$

$$E = \int_0^1 dx \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{d\varphi(x)}{dx} \right)^2 - S(x)\varphi(x) \right] . \quad (23)$$

Zauważmy, że jedynie w pewnych przypadkach funkcjonał  $E$  posiada interpretację fizyczną.

Np. w elektrostatyce: natężenie pola elektrycznego  $E_x = -d\varphi/dx$ , a gęstość ładunku jest proporcjonalna do funkcji źródła  $S(x)$ , a zatem w tym przypadku funkcjonał  $E$  jest całkowitą energią układu pole + ładunki.

Na ogół jednak traktujemy  $E$  jako pewną użyteczną wielkość pomocniczą. Obliczmy wariację funkcjonału  $E$  względem  $\varphi$ , przy założeniu, że znikają wariacje  $\varphi$  na brzegach przedziału, czyli

$$\delta\varphi(0) = \delta\varphi(1) = 0 . \quad (24)$$

Wariację funkcjonału  $E$  (23) liczymy następująco:

$$\begin{aligned} \delta E &= \int_0^1 dx \left[ \frac{d\varphi}{dx} \delta \left( \frac{d\varphi}{dx} \right) - S\delta\varphi \right] \\ &= \int_0^1 dx \left[ \frac{d\varphi}{dx} \frac{d}{dx}(\delta\varphi) - S\delta\varphi \right] . \end{aligned} \quad (25)$$

Po wykonaniu w (25) całkowania przez części pierwszej funkcji podcałkowej i wykorzystaniu warunków brzegowych (24) otrzymujemy

$$\delta E = \int_0^1 dx \left( -\frac{d^2\varphi}{dx^2} - S \right) \delta\varphi . \quad (26)$$

Żądamy, aby funkcjonał  $E$  posiadał ekstremum, co oznacza spełnienie warunku

$$\delta E = 0 \quad (27)$$

dla dowolnych wariacji  $\delta\varphi$ .

Warunek (27) prowadzi do rozważanego równania różniczkowego (21)

$$-\frac{d^2\varphi}{dx^2} = S(x) .$$

W ten sposób pokazaliśmy więc, że równanie różniczkowe (21) spełnione jest wtedy i tylko wtedy, gdy funkcjonał (23) posiada ekstremum.

Dla dwóch zmiennych odpowiedni funkcjonal ma postać

$$E = \int_0^1 dx \int_0^1 dy \left[ \frac{1}{2} (\nabla \varphi)^2 - S\varphi \right], \quad (28)$$

gdzie

$$\nabla = \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right).$$

Warunek ekstremum funkcjonału (28) prowadzi do dwuwymiarowego równania Poissona (3). Dalsze uogólnienie na dowolną liczbę zmiennych jest trywialne.

## 9 Metoda relaksacyjna

Metoda ta bazuje na iteracyjnej procedurze rozwiązywania problemu brzegowego. Najpierw wprowadzimy tę metodę dla przypadku jednowymiarowego, a następnie uogólnimy ją na przypadek dwuwymiarowy.

Rozwiązujemy równanie (15) ze względu na  $\varphi_i$  i otrzymujemy

$$\varphi_i = \frac{1}{2}(\varphi_{i-1} + \varphi_{i+1} + h^2 S_i). \quad (29)$$

Gdyby wartości  $\varphi_{i-1}$  oraz  $\varphi_{i+1}$  były znane, to wzór (29) można by interpretować jako algorytm poprawiania przybliżeń dla  $\varphi_i$  bazujący na sąsiednich węzłach sieci. Na takim właśnie wykorzystaniu wzoru (29) polega **idea metody relaksacyjnej**.

Oznaczamy przez  $\varphi_i^{(s)}$  wartości zmiennej zależnej w  $s$ -tym kroku iteracyjnym. Wtedy

$$\varphi_i^{(s+1)} = \frac{1}{2}[\varphi_{i-1}^{(s)} + \varphi_{i+1}^{(s)} + h^2 S_i]. \quad (30)$$

Rozwiązanie startowe dla  $s = 0$ , czyli  $\varphi_i^{(0)}$ , może być wybrane w sposób dowolny. Procedura iteracyjna z użyciem wzoru (30) jest nazywana **metodą Gaussa-Seidla**.

## 10 Przyspieszenie zbieżności iteracji

Zmierzenie wartości  $\varphi_i^{(s)}$  otrzymanych w kolejnych krokach iteracji (przy rosnącym wskaźniku iteracji  $s$ ) do wartości poprawnych może być potraktowane jako pewien **proces relaksacyjny**.

W fizyce **relaksacja oznacza proces zmierzania układu do stanu równowagi**.

Szybkość zbieżności procedury iteracyjnej (szybkość relaksacji) można zmniejszać wprowadzając **parametr relaksacji**  $\omega$ , który jest odpowiedzialny za mieszanie "starych" i "nowych" rozwiązań.

W każdym kroku iteracji obliczamy  $\varphi_i^{(s+1)}$  jako kombinację liniową poprzedniej ("starej") wartości  $\varphi_i^{(s)}$  i poprawionej ("nowej") wartości funkcji szukanej, wyznaczonej zgodnie z (30), czyli

$$\varphi_i^{(s+1)} = (1 - \omega)\varphi_i^{(s)} + \frac{\omega}{2}[\varphi_{i-1}^{(s)} + \varphi_{i+1}^{(s)} + h^2 S_i]. \quad (31)$$

Wartość parametru relaksacji  $\omega$  wybieramy tak, aby uzyskać największą szybkość zbieżności procedury iteracyjnej. Wyboru tego dokonujemy metodą prób i błędów.

Można pokazać, że schemat iteracyjny (31) jest zbieżny, czyli prowadzi do poprawy rozwiązań.

Warunkiem zbieżności w przypadku 1D jest spełnienie nierówności

$$0 < \omega < 2. \quad (32)$$

Wzór (31) w zapisie wektorowym ma postać

$$\Phi^{(s+1)} = (1 - \omega)\Phi^{(s)} + \omega\Phi^{(poprawione)} = \Psi^{(s)}. \quad (33)$$

Jeżeli procedura iteracyjna jest zbieżna, to

$$\Phi^{(s)} \simeq \Phi^{(poprawione)} = \Psi^{(s)}$$

Wtedy

$$\Phi^{(s+1)} \simeq \Phi^{(s)},$$

a ponadto  $\Psi^{(s)}$  przestaje zależeć od  $\omega$ .

## 11 Metoda relaksacyjna dla problemów dwuwymiarowych

Korzystamy z różnicowej postaci równania Poissona dla dwóch zmiennych niezależnych, czyli z równania (10)

$$4\varphi_{ij} - \varphi_{i+1,j} - \varphi_{i-1,j} - \varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j-1} = h^2 S_{ij}. \quad (34)$$

Rozwiązujemy to równanie ze względu na  $\varphi_{ij}$  i otrzymujemy

$$\varphi_{ij} = \frac{1}{4}(\varphi_{i+1,j} + \varphi_{i,j+1} + \varphi_{i-1,j} + \varphi_{i,j-1} + h^2 S_{ij}). \quad (35)$$

Stosujemy uogólniony schemat iteracyjny (31)

$$\varphi_{ij}^{(s+1)} = (1 - \omega)\varphi_{ij}^{(s)} + \omega\psi_{ij}^{(s)}, \quad (36)$$

gdzie

$$\psi_{ij}^{(s)} = \frac{1}{4} \left( \varphi_{i+1,j}^{(s)} + \varphi_{i-1,j}^{(s)} + \varphi_{i,j+1}^{(s)} + \varphi_{i,j-1}^{(s)} + h^2 S_{ij} \right). \quad (37)$$

Rachunki według schematu (37) wykonujemy dla każdego węzła sieci na płaszczyźnie  $x - y$ .

Podobnie jak w przypadku 1D można pokazać, że dla parametru relaksacji  $\omega$  przyjmującego wartość z pewnego przedziału funkcjonal  $E$  (28) maleje w każdym kroku iteracyjnym. Przyspieszenie zbieżności procedury iteracyjnej można uzyskać dobierając optymalną wartość parametru relaksacji  $\omega$ .

## 12 Podsumowanie

- (i) Rozwiązanie  $\varphi_{ij}^{(0)}$  można wybrać w sposób dowolny.
- (ii) Przypadek  $\omega = 1$  odpowiada metodzie Gaussa-Seidla, która nie zawsze charakteryzuje się najszybszą zbieżnością.
- (iii) Zmierzanie wartości  $\varphi_{ij}^{(0)}$  przy rosnącym wskaźniku iteracji  $s$  do wartości poprawnych można potraktować jako proces relaksacji (proces zmierzania układu do stanu równowagi). Parametr relaksacji  $\omega$  pozwala na zmianę szybkości relaksacji (zmianę szybkości zbieżności procedury iteracyjnej).

Rozróżniamy przypadki:

- (a) **podrelaksacja** dla  $\omega < 1$ ,
- (b) **nadrelaksacja** dla  $\omega > 1$ .

**Kryterium zbieżności** procedury iteracyjnej ma postać

$$\varphi_{ij}^{(s+1)} \simeq \varphi_{ij}^{(s)} \quad \forall i, j, \quad (38)$$

przy czym symbol  $\simeq$  oznacza, że równość (38) powinna być spełniona z pewną zadaną tolerancją.

Ponadto po osiągnięciu zbieżności rozwiązanie nie powinno zależeć od  $\omega$ .