8. naloga: Robni problem lastnih vrednosti

Pri študiju kemijske kinetike naletimo pri problemih z difuzijo in eksotermnimi reakcijami na Gelfand-Bratujev robni problem

$$y'' = -\delta\, \mathrm{e}^y\,, \quad 0 < x < 1\,,$$

z robnima pogojema $y(0) = y(1) = 0$. Ta problem je še posebej zanimiv z vidika enoličnosti rešitev: pri $0 < \delta < \delta_\mathrm{c} \approx 3.51$ ima naloga dve rešitvi, pri $\delta > \delta_\mathrm{c}$ pa rešitev ne obstaja. V zanimivem območju je analitična rešitev

$$y(x) = -2\ln\left[\frac{\cosh\xi(1-2x)}{\cosh\xi}\right]\,,$$

kjer ima lahko parameter ξ dve vrednosti, ki sta rešitvi transcendentne enačbe $\cosh\xi = \sqrt{8/\delta}\,\xi$. V primeru $\delta = 1$ sta to

$$\xi_1 = 0.379291149762689\,, \qquad \xi_2 = 2.734675693030527\,.$$

Nelinearne robne probleme oblike $y'' = f(x, y, y')$ kot je Bratujeva enačba numerično rešujemo na več načinov. Prva možnost je diferenčna metoda. Intervalu $[a, b]$ prireMo ekvidistantno mrežo v točkah $a = x_0, x_1, \ldots, x_N = b$, kjer je $x_j = a + jh$ in $h = (b-a)/N$. Točki x_j ustreza približna rešitev u_j. Ko diskretiziramo še odvode, dobimo diferenčno shemo oblike

$$L_h u_j = -\frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} + f\left(x_j, u_j, \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h}\right) = 0\,, \tag{1}$$

ki velja pri $j = 1, 2, \ldots, N-1$, robna pogoja pa narekujeta skrajni vrednosti $u_0 = 0$ in $u_N = 0$. Enačba (1) v matrični obliki predstavlja sistem nelinearnih enačb. Rešujemo ga z eksplicitno iterativno metodo ali z Newtonovo metodo, pri kateri moramo v vsakem koraku rešiti posebno matrično enačbo. Iterativna shema ima obliko

$$u_j^{(n+1)} = \frac{1}{1+\omega}\left[\frac{1}{2}\left(u_{j+1}^{(n)} + u_{j-1}^{(n)}\right) + \omega u_j^{(n)} - \frac{h^2}{2} f\left(x_j, u_j^{(n)}, \frac{u_{j+1}^{(n)} - u_{j-1}^{(n)}}{2h}\right)\right]\,,$$

kjer je $1 \le j \le N-1$, robni vrednosti pa ves čas ostajata $u_0 = \alpha$ in $u_N = \beta$. Iteracijo zaženemo z nekim začetnim približkom $\boldsymbol{u}^{(0)}$ (ta naj vsaj zadošča robnim pogojem), hitrost njene konvergence pa določa parameter ω.

Za reševanje z Newtonovo metodo shemo (1) prepišemo v obliko $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{0}$, kjer je $\boldsymbol{F} = (F_1(\boldsymbol{u}), F_2(\boldsymbol{u}), \ldots, F_{N-1}(\boldsymbol{u}))^\mathrm{T}$ s komponentami $F_j(\boldsymbol{u}) = \frac{1}{2}h^2(L_h u_j)$. Za sistem enačb $F(\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{0}$ pomeni Newtonova metoda iteracijo k negibni točki

$$\boldsymbol{u}^{(n+1)} = \boldsymbol{G}\big(\boldsymbol{u}^{(n)}\big)\,,$$

kjer je iteracijska funkcija definirana kot

$$\boldsymbol{G}(\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{u} - \left[\frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{u})}{\partial \boldsymbol{u}}\right]^{-1} \boldsymbol{F}(\boldsymbol{u})\,.$$

Ključni del izraza je Jacobijeva matrika

$$\frac{\partial \boldsymbol{F}(\boldsymbol{u})}{\partial \boldsymbol{u}} = \boldsymbol{J}(\boldsymbol{u}) = \begin{pmatrix} B_1(\boldsymbol{u}) & C_1(\boldsymbol{u}) & 0 & & \\ A_2(\boldsymbol{u}) & B_2(\boldsymbol{u}) & C_2(\boldsymbol{u}) & 0 & \\ & & \vdots & & \\ & 0 & A_{N-2}(\boldsymbol{u}) & B_{N-2}(\boldsymbol{u}) & C_{N-2}(\boldsymbol{u}) \\ & & 0 & A_{N-1}(\boldsymbol{u}) & B_{N-1}(\boldsymbol{u}) \end{pmatrix}$$

z matričnimi elementi

$$\begin{aligned} A_j(\boldsymbol{u}) &= -\frac{1}{2}\left[1 + \frac{h}{2}\frac{\partial f}{\partial y'}\left(x_j, u_j, \frac{u_{j+1}-u_{j-1}}{2h}\right)\right] , \\ B_j(\boldsymbol{u}) &= 1 + \frac{h^2}{2}\frac{\partial f}{\partial y}\left(x_j, u_j, \frac{u_{j+1}-u_{j-1}}{2h}\right) , \\ C_j(\boldsymbol{u}) &= -\frac{1}{2}\left[1 - \frac{h}{2}\frac{\partial f}{\partial y'}\left(x_j, u_j, \frac{u_{j+1}-u_{j-1}}{2h}\right)\right] . \end{aligned}$$

(Robna pogoja $u_0 = \alpha$ in $u_N = \beta$ vstopita tudi preko količin $\boldsymbol{B}_1(\boldsymbol{u})$, $\boldsymbol{C}_1(\boldsymbol{u})$, $\boldsymbol{A}_{N-1}(\boldsymbol{u})$, $\boldsymbol{B}_{N-1}(\boldsymbol{u})$, $\boldsymbol{F}_1(\boldsymbol{u})$ in $\boldsymbol{F}_{N-1}(\boldsymbol{u})$.) V vsakem koraku Newtonove iteracije rešujemo sistem enačb

$$\boldsymbol{J}\big(\boldsymbol{u}^{(n)}\big)\Delta\boldsymbol{u}^{(n)} = -\boldsymbol{F}\big(\boldsymbol{u}^{(n)}\big) , \tag{2}$$

z rešitvijo $\Delta\boldsymbol{u}^{(n)}$ tega sistema pa dobimo naslednjo vrednost rešitve

$$\boldsymbol{u}^{(n+1)} = \boldsymbol{u}^{(n)} + \Delta\boldsymbol{u}^{(n)} , \qquad n = 0, 1, 2, \ldots . \tag{3}$$

Iteracijo ponavljamo, dokler razlika med zaporednimi približki rešitve (merjeno v primerni normi) ne pade pod izbrano vrednost.

Naloga: Gelfand-Bratujev robni problem z $\delta = 1$ najprej reši z eksplicitno iterativno metodo s primerno izbranim konvergenčnim parametrom ω. Iz enačbe razberemo, da mora biti rešitev na intervalu $[0, 1]$ konveksna (izbočena navzgor), zato si v tem smislu izberi tudi začetni približek za iteracijo, na primer $u(x) = \mu x(1-x)$, kjer preizkusi $\mu = 1$ in $\mu = 16$. Problem nato reši še z Newtonovo metodo (2) in (3). Kaj opaziš, če spreminjaš parameter δ?

Dodatna naloga: Problem lahko rešimo tudi s tako imenovano strelsko metodo. Pri strelski metodi iščemo rešitev z integracijo diferencialne enačbe od enega konca definicijskega intervala k drugemu, na primer od $x = a$ proti $x = b$. V točki $x = a$ postavimo $y(a) = \alpha$, kot ga zahteva robni pogoj, in *uganemo* vrednost odvoda $y'(a)$. Z vrednostma $y(a)$ in $y'(a)$ poženemo neki integrator (na primer preprosto Eulerjevo metodo ali RK4) do točke $x = b$. Tam preverimo, ali rešitev zadošča robnemu pogoju $y(b) = \beta$. Če pogoju ne zadošča, spremenimo začetni "kot streljanja" $y'(a)$. To ponavljamo, dokler z izbrano natančnostjo ne dosežemo pogoja $y(b) = \beta$. Območje vrednosti $y'(a)$ lahko ožimo z bisekcijo ali kako hitrejšo metodo — izberi si svoj način in pazi na dvoličnost rešitev, omenjeno v prvem delu naloge!