# VÝBĚR METODY PRO ŘEŠENÍ ÚLOH S POHYBLIVOU HRANICÍ METODOU PŘÍMEK S VYUŽITÍM ALGORITMŮ MATLABU

*Jakub Slovan*
Západočeská univerzita v Plzni
Fakulta aplikovaných věd

## 1 Problém s pohyblivou hranicí

Problémy s pohyblivou hranicí jsou úlohy, kdy oblast, na které je problém definován, mění svůj tvar. Součástí řešení takové úlohy je nejen neznámá funkce samotná, ale zároveň i neznámá hranice oblasti nebo její část.

Zaměříme se na následující problém

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= 0, \quad x \in (0, s(t)),\ t > 0, & (1)\\
\frac{\partial u}{\partial x}(0,t) &= -\mathrm{e}^t, \quad t > 0, & (2)\\
u(s(t),t) &= 0, \quad t > 0, & (3)\\
\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}(t) &= -\frac{\partial u}{\partial x}(s(t),t), \quad t > 0, & (4)\\
s(0) &= 0. & (5)
\end{aligned}$$

Hledáme funkci $u(x,t)$ definovanou na intervalu $(0, s(t))$, přičemž poloha pravého krajního bodu intervalu $s(t)$ zde představuje neznámou část hranice a patří mezi hledané veličiny.

Řešením soustavy (1) až (5) myslíme dvojici $\{u(x,t),\ s(t)\}$ vyhovující všem rovnicím. Analytickým řešením této soustavy, použitým později pro porovnání metod, je dvojice

$$\begin{aligned}
u(x,t) &= \mathrm{e}^{t-x} - 1, \quad x \in (0,t),\ t > 0, & (6)\\
s(t) &= t, \quad t > 0. & (7)
\end{aligned}$$

Naším cílem je nelineární soustavu (1) až (5) řešit metodou přímek, tj. aproximovat ji vhodnou semidiskrétní metodou a s využitím MATLABu výslednou soustavu obyčejných rovnic vyřešit.

## 2 Numerické řešení

Způsobů zohlednění pohyblivé hranice je mnoho a čtenář se s nimi může seznámit v [2]. V zásadě se diskretizace skládá ze tří kroků, a to

- způsob aproximace pohyblivé hranice $s(t)$,

- diskretizace v prostorové proměnné,
- diskretizace v časové proměnné.

V tomto článku jsme zvolili způsob zahrnutí pohyblivé hranice ze třídy tzv. metod fixované hranice a pro diskretizaci v proměnné $x$ jsme zvolili konzervativní metodu integrálních identit.

Princip spočívá v tom, že nejprve vhodně transformujeme proměnné tak, aby se proměnná oblast $(0, s(t))$ zobrazila na pevnou úsečku $(0,1)$, čímž se nám pohyblivá hranice zobrazí do pevného bodu. Změní se ale i rovnice. Transformovanou soustavu řešíme metodou přímek, tj. diskretizujeme v prostorové proměnné a získanou semidiskrétní soustavu rovnic řešíme vhodnou metodou pro řešení počátečních úloh. Tím získáme řešení transformovaných rovnic v transformovaných proměnných. Nakonec transformujeme řešení zpět do původních proměnných.

Definujeme transformaci $(x,t) \mapsto (\xi, t)$ předpisem

$$\xi = \frac{x}{s(t)}, \ t = t, \quad t > 0 \tag{8}$$

a veličinu $\tilde{u}(\xi, t)$ předpisem

$$u(x,t) \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{u}(\frac{x}{s(t)}, t), \quad \forall x \in (0, s(t)), t > 0. \tag{9}$$

Z (8) a (9) vyplývá:

$$\begin{aligned} u_x(x,t) &= \frac{1}{s(t)}\tilde{u}(\frac{x}{s(t)}, t) = \frac{1}{s(t)}\tilde{u}_\xi(\xi, t), & (10) \\ u_t(x,t) &= -\tilde{u}_\xi(\frac{x}{s(t)}, t) \cdot \frac{xs'(t)}{s^2(t)} + \tilde{u}_t(\frac{x}{s(t)}, t) = \tilde{u}_t(\xi, t) - \frac{s'(t)}{s(t)}\xi\tilde{u}_\xi(\xi, t), & (11) \end{aligned}$$

kde $s'(t)$ značí derivaci funkce $s(t)$ podle $t$ a indexy značí derivaci podle příslušných proměnných.

Dosadíme-li vztahy (10) a (11) do původní rovnice, dostáváme transformovanou soustavu:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} - \frac{s'}{s}\xi\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \xi} - \frac{1}{s^2}\frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial \xi^2} &= 0, \quad \xi \in (0,1), \ t > 0, & (12) \\ \frac{1}{s}\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \xi}(0,t) &= -\mathrm{e}^t, \quad t > 0, & (13) \\ \tilde{u}(1,t) &= 0, \quad t > 0, & (14) \\ \frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t} &= -\frac{1}{s(t)}\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \xi}(1,t), \quad t > 0, & (15) \\ s(0) &= 0. & (16) \end{aligned}$$

Zavedeme síť $\{\xi_i = i \cdot h;\ h = \frac{1}{N},\ N \in \mathbb{N}\}$ pro vhodně zvolené $N$. Symboly $\xi_{i\pm 1/2}$ označíme hodnoty $\xi_i \pm h/2$ a symboly $x_{i\pm 1/2}$ označíme $s(t)\xi_{i\pm 1/2}$. Rovnici (12) aproximujeme metodou integrálních identit.

Nejprve integrujeme na intervalu $(\xi_{i-1/2}, \xi_{i+1/2})$:

$$\int_{\xi_{i-1/2}}^{\xi_{i+1/2}} \left[\tilde{u}_t - \frac{s'}{s}\xi\tilde{u}_\xi\right] s\ \mathrm{d}\xi - \frac{\mathrm{Fo}}{s}\Big[\tilde{u}_\xi\Big]_{\xi_{i-1/2}}^{\xi_{i+1/2}} = 0.$$

Druhý člen v integrálu integrujeme per partes, a základem další diskretizace je pak identita

$$\int_{\xi_{i-1/2}}^{\xi_{i+1/2}} \tilde{u}_t\, s\ \mathrm{d}\xi + \int_{\xi_{i-1/2}}^{\xi_{i+1/2}} \tilde{u}\, s'\ \mathrm{d}\xi - \left[s'\xi\tilde{u} + \frac{\mathrm{Fo}}{s}\tilde{u}_\xi\right]_{\xi_{i-1/2}}^{\xi_{i+1/2}} = 0. \tag{17}$$

Numericky funkci $\tilde{u}(\xi, t)$ aproximujeme lineárním splajnem s uzly $(\xi_i, \tilde{u}(\xi_i, t))$. Přibližné řešení funkce $\tilde{u}(\xi_i, t)$ pak označíme $\tilde{U}_i(t)$, přibližné řešení funkce $s(t)$ označíme $S(t)$. V dalším textu budeme pro přehlednost proměnnou $t$ vynechávat, tj. budeme psát $\tilde{U}_i$ a $S$.

Hodnoty v (17) nahradíme vztahy

$$\begin{aligned}
\tilde{u}_\xi(\xi_{i+1/2}, t) &\approx \frac{\tilde{U}_{i+1} - \tilde{U}_i}{h},\\
\tilde{u}(\xi_{i+1/2}, t) &\approx \frac{\tilde{U}_{i+1} + \tilde{U}_i}{2},\\
\int_{\xi_{i-1/2}}^{\xi_{i+1/2}} \tilde{u}\ \mathrm{d}\xi &\approx \frac{h}{8}\left(\tilde{U}_{i-1} + 6\tilde{U}_i + \tilde{U}_{i+1}\right),
\end{aligned}$$

a získáme tak semidiskrétní soustavu rovnic

$$\begin{aligned}
\frac{1}{8}\left[(\tilde{U}_{i-1})_t + 6(\tilde{U}_i)_t + (\tilde{U}_{i+1})_t\right] = \tilde{U}_{i-1}.\left[\frac{S'}{S}(-\frac{i-1/2}{2} - \frac{1}{8}) + \frac{\mathrm{Fo}}{S^2h^2}\right] +\\
+\tilde{U}_i\left[-\frac{S'}{4S} - \frac{2\mathrm{Fo}}{S^2h^2}\right] + \tilde{U}_{i+1}\left[\frac{S'}{S}(\frac{i+1/2}{2} - \frac{1}{8}) + \frac{\mathrm{Fo}}{S^2h^2}\right], \quad 1 \le i \le N-1,
\end{aligned} \tag{18}$$

s okrajovými podmínkami

$$\frac{1}{8}\left[3(\tilde{U}_0)_t + (\tilde{U}_1)_t\right] = \tilde{U}_0\left[-\frac{S'}{8S} - \frac{1}{h^2S^2}\right] + \tilde{U}_1\left[\frac{S'}{8S} + \frac{1}{h^2S^2}\right] + \frac{\mathrm{e}^t}{h\,S}, \tag{19}$$

$$\tilde{U}_N = 0, \tag{20}$$

pro neznámé funkce proměnné $t$ $\tilde{U}_0$, $\tilde{U}_1$,…, $\tilde{U}_{N-1}$.

Protože aproximace $\tilde{u}(\xi, t)$ lineárním splajnem nám neumožňuje aproximovat derivaci $\tilde{u}_\xi(1, t)$ s chybou druhého řádu, aproximujeme ji pomocí kvadratického interpolačního polynomu, dosadíme do (4)

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t}(1, t) = -\frac{1}{2S\,h}\left(\tilde{U}_{N-2} - 4\tilde{U}_{N-1}\right) \tag{21}$$

a doplníme počáteční podmínkou

$$S(0) = \varepsilon, \quad \varepsilon > 0. \tag{22}$$

Důvodem pro (22) je to, že hodnota $S$ se vyskytuje ve jmenovateli rovnic (18) až (21).

Soustavu (18) až (22) pak řešíme vhodně zvolenou metodou pro řešení počátečních úloh. Nakonec symbolem $U_i$ označíme výsledek v původních proměnných

$$U_i = \tilde{U}_i \approx u(\xi_i S, t).$$

# 3 Výběr metody pro počáteční úlohu

Metodu vybíráme ze skupiny ODE řešičů MATLABu pro úlohy s velkým tlumením, tj. `ode15s`, `ode23s`, `ode23t` a `ode23tb`. Parametry metod `MassConstant`, `JPattern` a `Vectorized`, pak umožňují využití speciálních vlastností soustavy (18) až (22).

## 3.1 Chyba řešení

Za chybu řešení budeme považovat rozdíl $U_i - u(\xi_i S, t)$ přibližně vypočítané hodnoty $U_i$ situované do bodu $\xi_i S$ a analytické hodnoty $u(\xi_i S, t)$ řešení v tom samém bodě. Pro chybu řešení tedy platí:

$$u(\xi_i S, t) - U_i = u(\xi_i S, t) - u(\xi_i s(t), t) + u(\xi_i s(t), t) - U_i.$$

Ovšem přibližná hodnota $U_i$ funkční hodnoty $u(x_i, t)$ je zároveň přibližnou hodnotou $\tilde{U}_i$ funkční hodnoty $\tilde{u}(\xi, t)$. Stejně tak je funkční hodnota $u(\xi s(t), t)$ stejná jako funkční hodnota $\tilde{u}(\xi, t)$, což plyne z (9). Celý vztah pro chybu se tedy dá též zapsat jako

$$u(\xi S, t) - U_i = u(\xi_i S, t) - u(\xi_i s(t), t) + \tilde{u}(\xi, t) - \tilde{U}_i.$$

Předpokládáme-li malé chyby $S - s(t)$, lze chyba vyjádřit přibližně vztahem

$$\Delta u \doteq \xi u_x(\xi \cdot s(t), t)\Delta s + \Delta\tilde{u} = \xi \tilde{u}_\xi \delta s + \Delta\tilde{u}. \tag{23}$$

Hodnoty $\xi \tilde{u}_\xi$ můžeme odhadnout z přibližného řešení. Ze vzorce (23) je vidět, že absolutní chyba řešení se zesiluje s rostoucí relativní chybou $\delta s$ s konstantou úměrnosti zjistitelnou aposteriorně.

Pro účely hodnocení metod zavedeme pojmy a symboly:

**$\delta s(t)$:** časový průběh relativní odchylky $\delta s(t) = |\frac{S(t) - s(t)}{s(t)}|$,

**$\|\Delta\tilde{u}\|(t)$:** časový průběh maximální absolutní odchylky na $(0, 1)$, $\|\Delta\tilde{u}\|(t) = \max\limits_{\xi \in (0,1)} |\tilde{u}(\xi, t)|$

**$\|\Delta u\|$:** celková míra chyby, $\|\Delta u\| = \max\limits_t\{\|\xi \tilde{u}_\xi\|(t) \cdot \delta s(t), \|\Delta \tilde{u}\|(t)\}$,

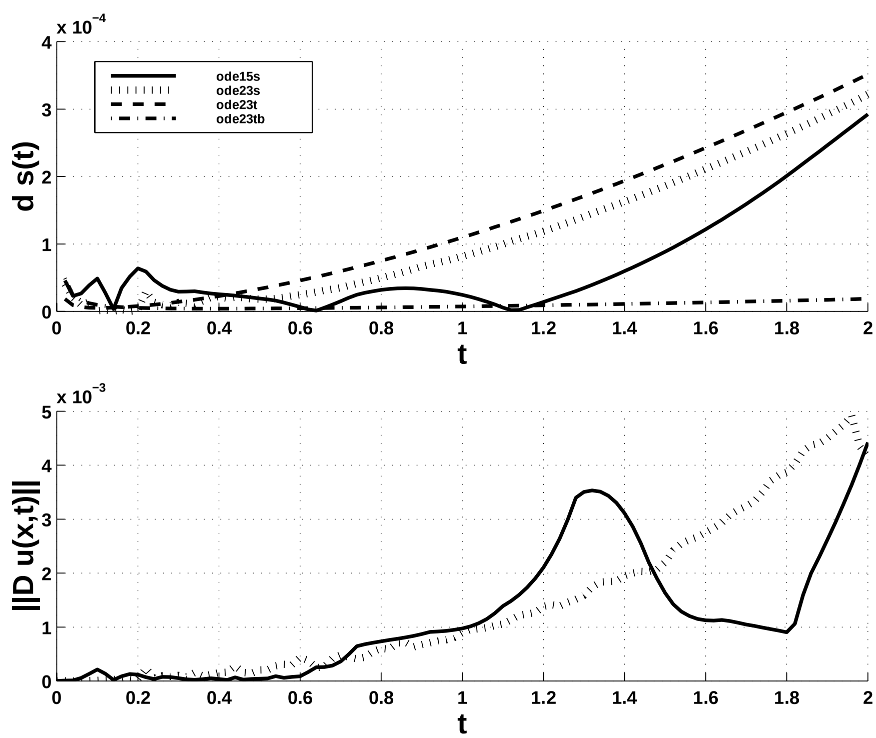
**$\tau$:** výpočetní čas, zjištěný jako střední hodnota z dob deseti po sobě jdoucích výpočtech,

**$\tau\|\Delta u\|$:** rozhodovací kriterium náročnosti a nepřesnosti výpočtu.

Tyto ukazatele budeme vyhodnocovat při použití každé metody, a na jejich základě rozhodneme o vhodné volbě.

## 3.2 Experimenty

Specifikace výpočtů: Výpočty byly prováděny na počítači AMD Athlon, 1 050 MHz, 0,5 GB paměti, v MATLABu v. 5.2.1. Počet intervalů diskretizace je 30, výsledky jsou uchovávány v časech 0; 0,02; 0,04; …; 2, počáteční hodnoty jsou $\tilde{U}_i = 0$, $s(0) = 10^{-6}$. Hodnoty `AbsTol` a `RelTol` byly ponechány přednastavené, tj. $10^{-6}$ a $10^{-3}$. Volba `BDF` byla vypnuta. Ve všech případech bylo využito předvoleb `MassConstant`, `JPattern` a `Vectorized`.




Obrázek 1: Časové průběhy relativní odchylky $s(t)$ a absolutní odchylky $\|\Delta \tilde{u}\|(t)$.

Porovnání odchylek je znázorněno na obrázku 1. Absolutní odchylky metod `ode23t` a `ode23tb` byly natolik vysoké, že by zakryly rozdíly mezi ostatními, proto nejsou zařazeny do grafu.

| metoda | výpočetní čas | celková chyba | čas·celková chyba |
|---|---|---|---|
| `ode15s` | 0,42 | $4{,}4\cdot 10^{-3}$ | $1{,}8\cdot 10^{-3}$ |
| `ode23s` | 1,61 | $4{,}9\cdot 10^{-3}$ | $7{,}9\cdot 10^{-3}$ |
| `ode23t` | 12,9 | $8{,}8\cdot 10^{-2}$ | 1,1 |
| `ode23tb` | 0,23 | 4,4 | 1,0 |

Tabulka 1: Výsledky experimentů

Výsledky v dalších ukazatelích jsou v tabulce 1, přičemž měřené veličiny byly popsány v části 3.1.

Experimenty jednoznačně ukazují na nevhodnost metod `ode23t` a `ode23tb` lze-li užít metody jiné. Výsledky upřednostňují metodu `ode15s`, ale jak je vidět z grafu, odchylky se chovají nepravidelně, což může vést ke zkreslování odhadů chyb.

# 4 Závěr

Za vhodné metody pro řešení úloh pocházejících z metody přímek aplikované na problém s volnou hranicí lze na základě zkušeností tohoto článku doporučit `ode15s` a `ode23s`. Je nutné mít na paměti, že popsaná úloha je nelineární, a proto nelze jednoduše zobecňovat, zejména kvůli nelineární vazbě mezi složkami řešení $U_i$ a $S(t)$.

Kontakt: jslovan@kma.zcu.cz

# Reference

[1] V. Alexiades; A. D. Solomon. *Mathematical modeling of melting and freezing processes.* Hemisphere Publishing Corp., Washington–Philadelphia–London, 1993. ISBN 1-56032-125-3.

[2] J. Crank. *Free and Moving Boundary Problems.* Clarendon Press, Oxford, 1996. ISBN 0 19 853370 5.

[3] R. M. Furzeland. A comparative study of numerical methods for moving boundary problems. *J. Inst. Maths. Applics.*, **26**:411–429, 1980.