5. Metoda direcțiilor implicite alternante (ADI)

5.1. Preliminarii

Pentru modelarea unui fenomen fizic apelăm în cele mai multe cazuri la ecuațiile cu derivate parțiale. Sistemele de ecuații cu derivate parțiale se pot reduce în unele cazuri particulare, de obicei, prin simplificarea modelului matematic considerat (de exemplu cazul soluțiilor similare din teoria stratului limită), la sisteme de ecuații diferențiale ordinare sau putem găsi o soluție analitică. Această situație se întâlneşte însă destul de rar şi de obicei suntem nevoiți să apelăm la metode numerice pentru rezolvarea sistemelor de ecuații cu derivate parțiale.

Una dintre metodele cele mai cunoscute, mai eficiente şi mai uşor de aplicat este metoda diferențelor finite. Această metodă are la bază discretizarea domeniului problemei, definidu-se o rețea de puncte, şi apoi exprimarea operatorilor diferențiali cu ajutorul diferențelor finite (progresive, regresive sau centrale). În urma acestor operații putem obține scheme cu diferențe finite explicite sau implicite. Schemele explicite dau posibilitatea obținerii soluției prin intermediul unui proces iterativ, dar au dezavantajul unor restricții destul de severe, relativ la paşii rețelei de discretizare, impuse de condițiile de convergență. Schemele implicite conduc la sisteme de ecuații algebrice în rezolvarea lor aplicându-se metode specifice de rezolvare. Deşi schemele implicite sunt mai complexe, ele sunt mai avantajoase prin faptul că nu avem nici o restricție relativă la rețeaua de discretizare.

Dăm în continuare un exemplu concret de ecuație care modelează un fenomen fizic, şi anume, ecuația căldurii într-un domeniu rectangular, D = [0, X] x [0, Y] (vezi Vladimirov, 1980):

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right] \tag{1.93}$$

cu condiții pe frontieră de tip Dirichlet, adică cunoaştem valorile $u(x, y, t)\big|_{\partial D}$ şi u(x, y, 0), iar σ este un număr pozitiv constant.

Considerăm rețeaua de puncte cu pasul Δx şi Δy în direcțiile x şi y:

$$\Delta x = \frac{X}{N_x}, \quad \Delta y = \frac{Y}{N_Y}$$

unde N_x şi N_y reprezintă numărul nodurilor în direcția x, respectiv y. Aproximația soluției inițiale într-un punct (r, s) al rețelei o vom nota prin

$$U^n_{r,s} \approx u(x_r, y_s, t_n), \quad r = 0, 1, \quad ..., N_x, \quad s = 0, 1, \quad ..., N_y.$$

Utilizând aproximarea cu diferențe finite progresive pentru derivata temporală şi aproximarea cu diferențe centrale pentru derivatele spațiale, obținem următoare schemă explicită:

$$\frac{U^{n+1}_{r,s} - U^n_{r,s}}{\Delta t} = \frac{U^n_{r+1,s} - 2U^n_{r,s} + U^n_{r-1,s}}{(\Delta x)^2} + \frac{U^n_{r,s+1} - 2U^n_{r,s} + U^n_{r,s-1}}{(\Delta y)^2} \tag{1.94}$$

Observăm că valoarea necunoscută $U^{n+1}_{r,s}$ se poate calcula printr-o simplă exprimare din ecuația (1.94) deoarece toate valorile $U^n_{r,s}$ (r = 0, 1, …, N_x; s = 1, 2, …, N_y) sunt cunoscute, fapt ilustrat şi în Figura 5a.

Condiția de convergență, stabilită printr-o analiză Fourier, este dată de (vezi Morton şi Mayers, 1994):

$$\frac{\sigma \Delta t}{(\Delta x)^2} + \frac{\sigma \Delta t}{(\Delta y)^2} \le \frac{1}{2} \tag{1.95}$$

şi este o restricție severă.

Pentru obținerea unei scheme implicite aproximăm derivata temporală prin diferențe progresive, iar derivatele spațiale le vom considera la momentul n + 1 şi le aproximăm prin diferențe centrale:

$$\frac{U^{n+1}_{r,s} - U^n_{r,s}}{\Delta t} = \frac{U^{n+1}_{r+1,s} - 2U^{n+1}_{r,s} + U^{n+1}_{r-1,s}}{(\Delta x)^2} + \frac{U^{n+1}_{r,s+1} - 2U^{n+1}_{r,s} + U^{n+1}_{r,s-1}}{(\Delta y)^2} \tag{1.96}$$

Schema implicită dată de ecuația (4) este stabilă indiferent de dimensiunea paşilor spațiali şi temporal. La pasul de timp n + 1 avem 5 necunoscute legate de o singură valoare cunoscută, fapt ilustrat în Figura 5b.

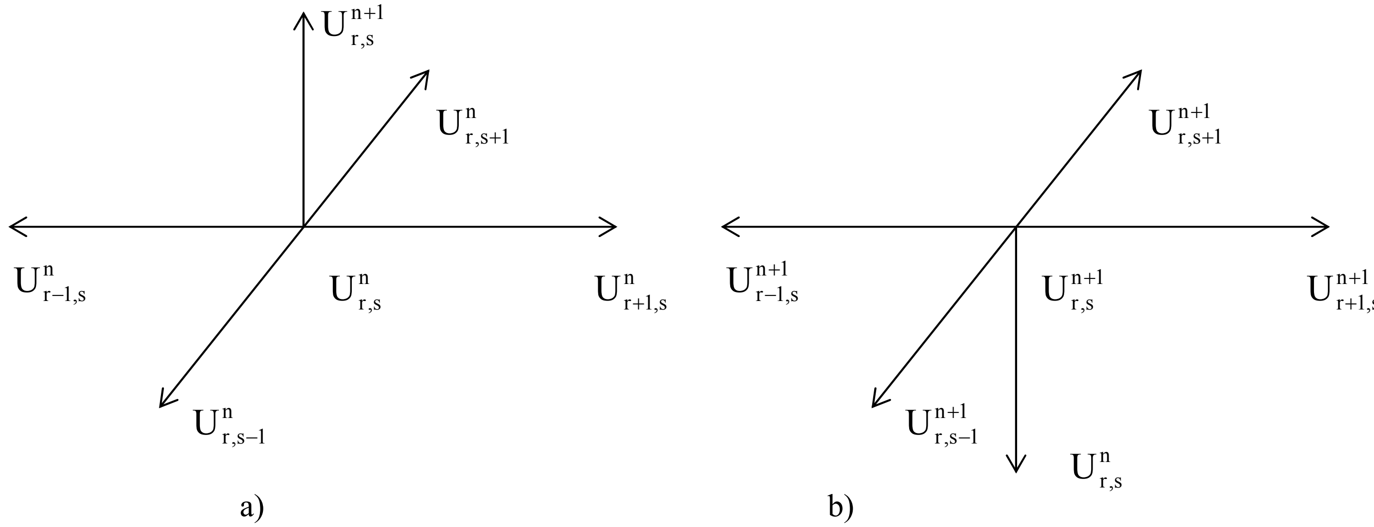

Figura 5

Dependența dintre valorile cunoscute şi necunoscute a) în cazul schemei explicite şi b) în cazul schemei implicite

Pentru aflarea valorilor necunoscute $U_{r,s}^{n+1}$ este necesară rezolvarea unui sistem algebric linear de dimensiune $(N_X - 1) \times (N_Y - 1)$, a cărui matrice este rară, iar reducerea unui astfel de sistem la un sistem cu o structură tridiagonală, rezolvabil prin metode numerice cunoscute, este dificilă şi uneori chiar imposibilă.

Trebuie remarcat faptul că putem obține o multitudine de scheme implicite în funcție de aproximările pe care le facem asupra derivatelor spațiale. Un exemplu binecunoscut este algoritmul Crank-Nicolson (vezi Morega, 1998) care aproximează derivatele spațiale astfel:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{2}\frac{U_{r+1,s}^{n+1} - 2U_{r,s}^{n+1} + U_{r-1,s}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{2}\frac{U_{r,s+1}^{n} - 2U_{r,s}^{n} + U_{r,s-1}^{n}}{(\Delta x)^2}$$

obținându-se schema:

$$\frac{U_{r,s}^{n+1}-U_{r,s}^{n}}{\Delta t}=\frac{\sigma}{2}\left[\frac{U_{r+1,s}^{n+1}-2U_{r,s}^{n+1}+U_{r-1,s}^{n+1}}{(\Delta x)^2}+\frac{U_{r,s+1}^{n+1}-2U_{r,s}^{n+1}+U_{r,s-1}^{n+1}}{(\Delta y)^2}\right]+$$
$$+\frac{\sigma}{2}\left[\frac{U_{r+1,s}^{n}-2U_{r,s}^{n}+U_{r-1,s}^{n}}{(\Delta x)^2}+\frac{U_{r,s+1}^{n}-2U_{r,s}^{n}+U_{r,s-1}^{n}}{(\Delta y)^2}\right] \tag{1.97}$$

5.2. Metoda direcțiilor implicite alternante (ADI) pentru ecuații parabolice

Deoarece schemele explicite sunt restrictive în ceea ce priveşte paşii rețelei, iar schemele implicite necesită un volum mare de calcul s-au căutat metode care să fie implicite într-o dimensiune, dar explicite în cealaltă dimensiune. O astfel de schemă, aplicată ecuației (1.93), pentru o rețea cu paşii Δx şi Δy în direcțiile x, respectiv y şi de dimensiune N_X x N_Y, ar fi:

$$\frac{U_{r,s}^{n+1}-U_{r,s}^{n}}{\Delta t}=\frac{\sigma}{2}\left[\frac{U_{r+1,s}^{n+1}-2U_{r,s}^{n+1}+U_{r-1,s}^{n+1}}{(\Delta x)^2}+\frac{U_{r,s+1}^{n}-2U_{r,s}^{n}+U_{r,s-1}^{n}}{(\Delta x)^2}\right]+$$
$$+\frac{\sigma}{2}\frac{U_{r,s+1}^{n}-2U_{r,s}^{n}+U_{r,s-1}^{n}}{(\Delta y)^2} \tag{1.98}$$

Pentru a calcula soluția, observăm că avem de rezolvat pentru fiecare pas în direcția y câte un sistem tridiagonal de ordin $N_X - 1$. Cum era de aşteptat în privința stabilității avem restricția $\frac{\sigma\Delta t}{(\Delta y)^2}\le\frac{1}{2}$, iar în ceea ce priveşte $\frac{\sigma\Delta t}{(\Delta x)^2}$ nu avem nici o restricție.

Putem obține metode eficiente combinând două astfel de metode, fiecare dintre metode fiind implicită într-o direcție. Acest principiu stă la baza metodei direcțiilor implicite alternante. Prima schemă de acest gen a fost propusă de Peaceman şi Rachford (1955) şi a fost folosită pentru rezolvarea ecuațiilor cu derivate parțiale care modelau mişcarea în rezervoarele de petrol.

Pentru ecuația (1.93) introducem un pas de timp intermediar, n + 1/2 şi avem:

$$\frac{U_{r,s}^{n+1/2}-U_{r,s}^{n}}{\Delta t}=\frac{\sigma}{2}\left[\frac{U_{r+1,s}^{n+1/2}-2U_{r,s}^{n+1/2}+U_{r-1,s}^{n+1/2}}{(\Delta x)^2}+\frac{U_{r,s+1}^{n}-2U_{r,s}^{n}+U_{r,s-1}^{n}}{(\Delta y)^2}\right] \tag{1.99a}$$

$$\frac{U^{n+1}_{r,s}-U^{n+1/2}_{r,s}}{\Delta t}=\frac{\sigma}{2}\left[\frac{U^{n+1}_{r+1,s}-2U^{n+1}_{r,s}+U^{n+1}_{r-1,s}}{(\Delta y)^2}+\frac{U^{n+1/2}_{r,s+1}-2U^{n+1/2}_{r,s}+U^{n+1/2}_{r,s-1}}{(\Delta x)^2}\right] \tag{1.99b}$$

Partea dreaptă a ecuației (1.99a) este cunoscută din pasul anterior, adică cunoaştem valorile U^n în tot domeniul şi deci, putem calcula valorile $U^{n+1/2}$, apoi putem afla din ecuația (1.99b) valorile U^{n+1}.

Pentru startul integrării avem nevoie de pentru $U^{n+1/2}$ de valorile de pe frontieră marcate cu “○”, iar pentru U^n de valorile marcate cu “□” (vezi Figura 6). Pentru fiecare ecuație (1.99a) şi (1.99b) avem de rezolvat sisteme tridiagonale de ecuații algebrice liniare. Astfel pentru un pas de timp trebuie să rezolvă $N_Y - 1$ sisteme algebrice liniare tridiagonale (pentru punctele marcate cu “λ”), fiecare de ordin $N_X - 1$, urmează apoi rezolvarea a $N_X - 1$ sisteme similare (pentru punctele marcate cu “ν”), fiecare de ordin $N_Y - 1$. Acest proces necesită mult mai puțin timp decât rezolvarea unui sistem de ordin $(N_X - 1) \times (N_Y - 1)$ a cărui structură nu este tridiagonală.

Trebuie remarcat faptul că în urma unei analize Fourier, schema este stabilă necondiționat (vezi Morton şi Mayers, 1994).

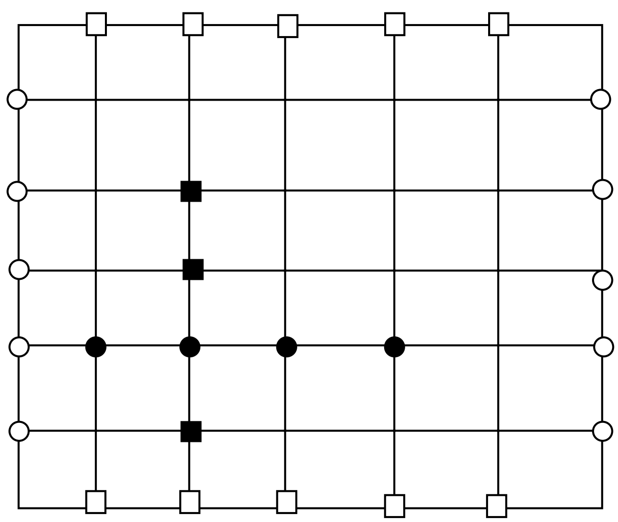

Figura 6

Punctele de pe frontieră necesare în metoda ADI

5.3. Metoda direcțiilor implicite alternante (ADI) pentru ecuații eliptice

Considerăm ecuația eliptică definită pe D = [0, X] x [0, Y]

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \qquad (1.100)$$

cu condiții pe frontieră de tip Dirichlet, independente de timp, adică $u(x, y)\big|_{\partial D}$ este cunoscută.

Folosind o rețea cu pasul Δx în direcția x şi Δy în direcția y, numărul paşilor în direcțiile x şi y fiind dat de $N_X = X/\Delta x$, respectiv $N_Y = Y/\Delta y$, discretizăm ecuația (1.100) astfel:

$$\frac{U_{r+1,s} - 2U_{r,s} + U_{r-1,s}}{(\Delta x)^2} + \frac{U_{r,s+1} - 2U_{r,s} + U_{r,s-1}}{(\Delta y)^2} = 0 \qquad (1.101)$$

Dacă în cazul ecuațiilor parabolice pasul intermediar era pas temporal, în cazul ecuației eliptice de mai sus trebuie să introducem un alt parametru de iterție, τ:

$$\frac{U^{n+1*}_{r,s} - U^{n}_{r,s}}{\tau} = -\frac{1}{2}\left[\frac{U^{n+1*}_{r+1,s} - 2U^{n+1*}_{r,s} + U^{n+1*}_{r-1,s}}{(\Delta x)^2} + \frac{U^{n}_{r,s+1} - 2U^{n}_{r,s} + U^{n}_{r,s-1}}{(\Delta y)^2}\right] \qquad (1.102a)$$

$$\frac{U^{n+1}_{r,s} - U^{n+1*}_{r,s}}{\tau} = -\frac{1}{2}\left[\frac{U^{n+1}_{r+1,s} - 2U^{n+1}_{r,s} + U^{n+1}_{r-1,s}}{(\Delta y)^2} + \frac{U^{n+1*}_{r,s+1} - 2U^{n+1*}_{r,s} + U^{n+1*}_{r,s-1}}{(\Delta x)^2}\right] \qquad (1.102b)$$

Cunoscând valorile din membrul drept al ecuației (1.102a) putem calcula valorile intermediare U^{n+1*}, apoi din ecuația (1.102b) aflăm valoarea U^{n+1}. Se observă că parametrul de iterație τ poate fi variabil de la un pas la altul. Schema (1.102) este convergentă pentru orice parametru de iterație τ > 0 (vezi Morega, 1998), iar procesul iterativ se încheie când este îndeplinită condiția (vezi Mitchell şi Griffiths, 1980):

$$\left|U^{n+1}_{r,s} - U^{n}_{r,s}\right| < \varepsilon \qquad (1.103)$$

unde ε este eroarea cu care dorim să aproximăm.

O descriere amănunțită, într-un limbaj matricial, a metodelor ADI putem găsi în cartea lui Morega (1998).