

Metoda różnic skończonych dla cząstkowych równań różniczkowych

na laboratorium rozwiązywać będziemy typowe równania:

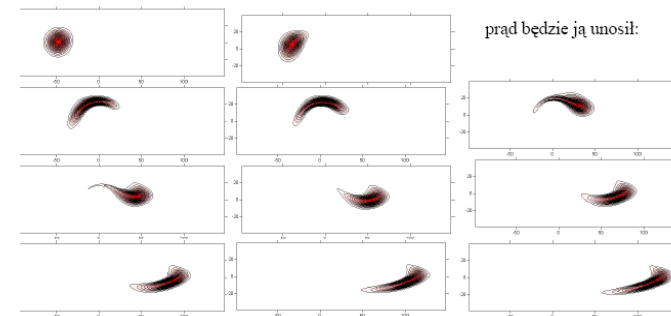
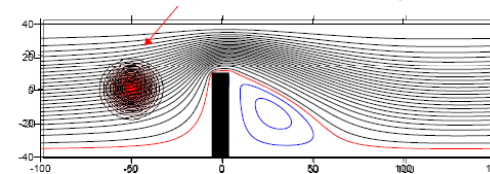
$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla^2 u \quad \left| \begin{array}{l} \text{dyfuzji (również przewodnictwo cieplne)} \\ \text{paraboliczne} \end{array} \right.$$

$$\nabla^2 u = f \quad \left| \begin{array}{l} \text{równanie Poissona (np. pole elektrostatyczne,} \\ \text{rozkład temperatury w stanie ustalonym, eliptyczne)} \end{array} \right.$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \nabla^2 u \quad \left| \begin{array}{l} \text{równanie falowe (mechanika, elektrodynamika,} \\ \text{hiperboliczne)} \end{array} \right.$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{V}u) \quad \left| \begin{array}{l} \text{adwekcji (unoszenia wielkości skalarnej} \\ \text{u przez pole wektorowe } \mathbf{V}) \\ \text{w 1D nazywane równaniem falowym 1 rzędu} \end{array} \right.$$

adwekcja:



adwekcja rzadko występuje w formie czystej
przeważnie: łącznie z dyfuzją

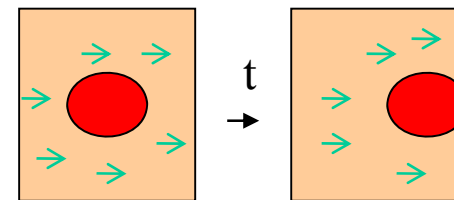
na razie znamy tylko dyfuzję numeryczną

dziś: dyfuzja prawdziwa

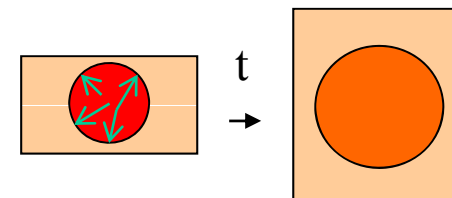
dyfuzja+adwekcja: występuje

w problemach transportu masy i energii

adwekcja=unoszenie (efekt kinetyczny)



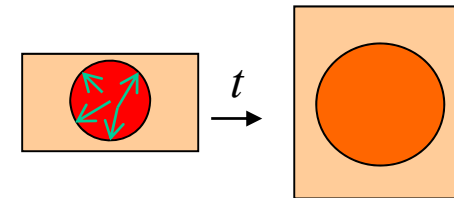
dyfuzja=znoszenie gradientu koncentracji
(efekt o podłożu stochastycznym)



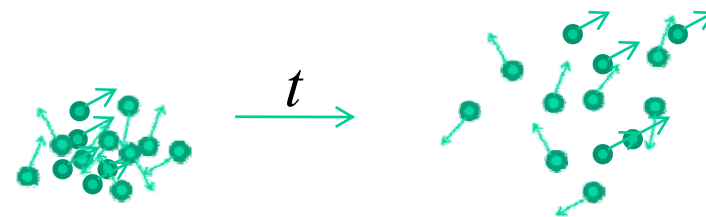
adwekcja-dyfuzja pyłu (materii) :



adwekcja-dyfuzja pyłu (materii) :



dyfuzja: wg opisu zachowania cząstek pyłu:




każda z cząstek porusza się z prędkością, którą możemy uznać za zmienną losową.
Średnia gęstość cząstek w przestrzeni będzie dążyć do stałej w przestrzeni średniej wartości.

Prawo Ficka:
strumień cząstek proporcjonalny do gradientu ich gęstości i przeciwnie skierowany

$$\mathbf{j} = -k(\mathbf{r})\nabla\rho(\mathbf{r}, t)$$

dyfuzja dla materii:
z równania ciągłości:
dla zachowanej wielkości skalarnej ρ

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$$



strumień wielkości ρ

dyfuzja dla materii:

z równania ciągłości:

dla zachowanej wielkości skalarnej ρ

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$$

unoszenie:

$$\mathbf{j} = \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r})$$



$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot [\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r})] = 0$$

równanie adwekcji

dyfuzja dla materii:
z równania ciągłości:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$$

unoszenie:

$$\mathbf{j} = \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r})$$



$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot [\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r})] = 0$$

równanie adwekcji

prąd związany z wyrównywaniem
stężeń (prawo Ficka – odpowiednik Fouriera
masa *temperatura*)

$$\mathbf{j} = -k(\mathbf{r}) \nabla \rho(\mathbf{r}, t)$$



$$\frac{\partial \rho}{\partial t} - \nabla \cdot [k \nabla \rho(r, t)] = 0$$

równanie dyfuzji

dyfuzja dla materii:
z równania ciągłości:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$$

unoszenie:

$$\mathbf{j} = \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r})$$



$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot [\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r})] = 0$$

równanie adwekcji

prąd związany z wyrównywaniem
stężeń (prawo Ficka – odpowiednik Fouriera
masa *temperatura*)

$$\mathbf{j} = -k(\mathbf{r}) \nabla \rho(\mathbf{r}, t)$$



$$\frac{\partial \rho}{\partial t} - \nabla \cdot [k \nabla \rho(r, t)] = 0$$

równanie dyfuzji

$$\mathbf{j} = \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}) - k(\mathbf{r}) \nabla \rho(\mathbf{r}, t)$$

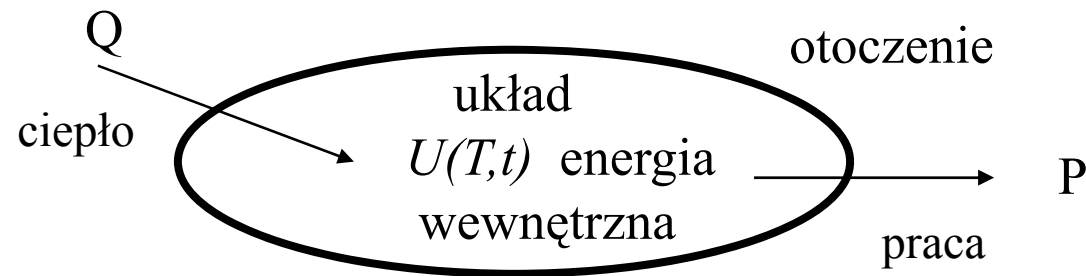


$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho(r, t) \mathbf{v}(r) - k \nabla \rho(r, t)] = 0$$

r. adwekcji - dyfuzji

dyfuzja: jeden z mechanizmów transportu ciepła

przekaz ciepła: transfer energii napędzany gradientem temperatur i dążący do jego zniwelowania.



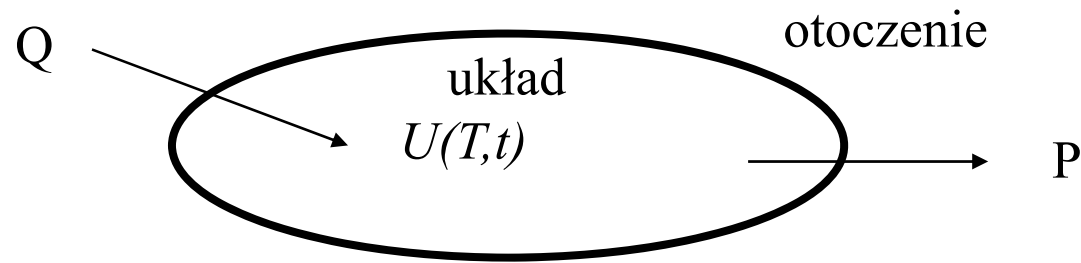
Q = tempo przekazu ciepła J/s

$P = dW/dt$ = tempo pracy wykonywanej przez układ

I-sza zasada termodynamiki:

$$Q = P + dU/dt$$

ciepło dostarczone do układu = praca wykonana przez układ + zmiana energii wewnętrznej układu



$$Q = P + dU/dt$$

$$P = dW/dt$$

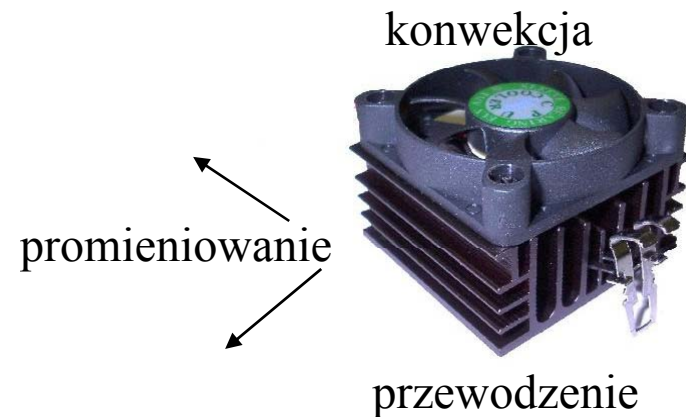
$$dW = p dV$$

$$Q = p dV/dt + dU/dt$$

Dla układu o stałej objętości $dW = 0$

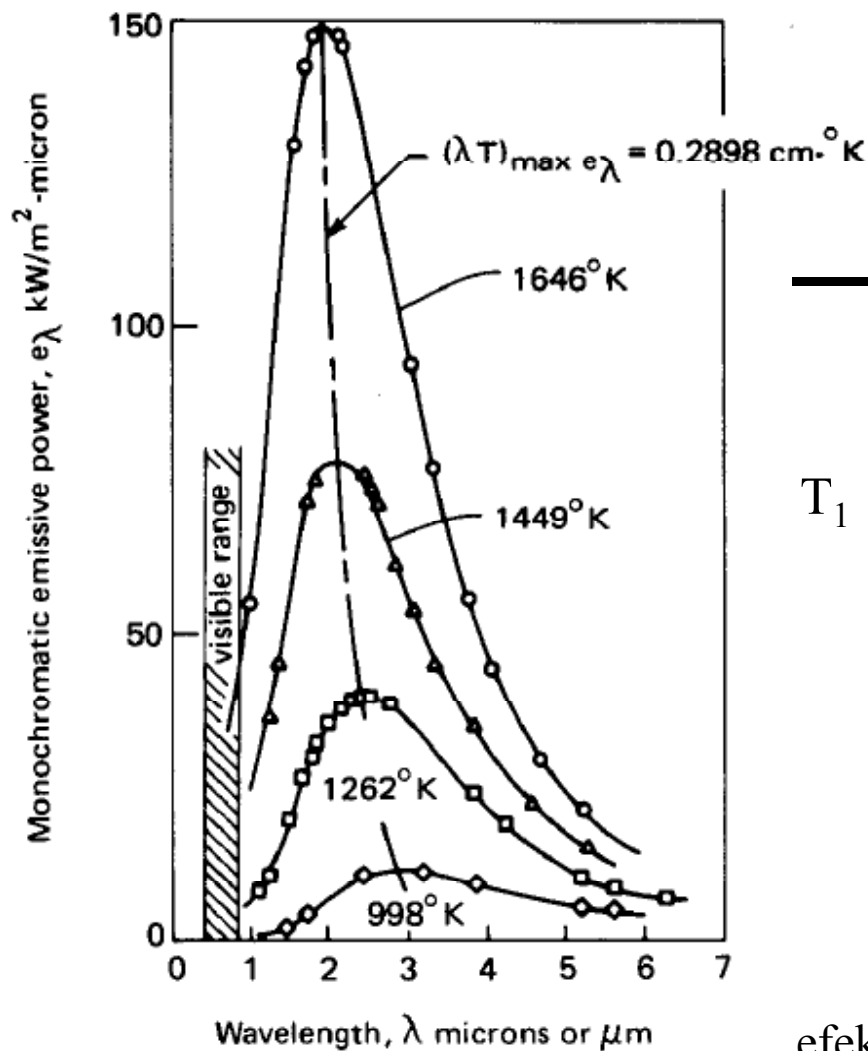
$$Q = dU/dt = mc_v dT/dt \quad (c_v = \text{ciepło właściwe})$$

mechanizmy przekazu ciepła:
 przewodzenie (prawo Fouriera)
 konwekcja (prawo Newtona)
 promieniowanie (p. Stefana-Boltzmann)



1) Promieniowanie

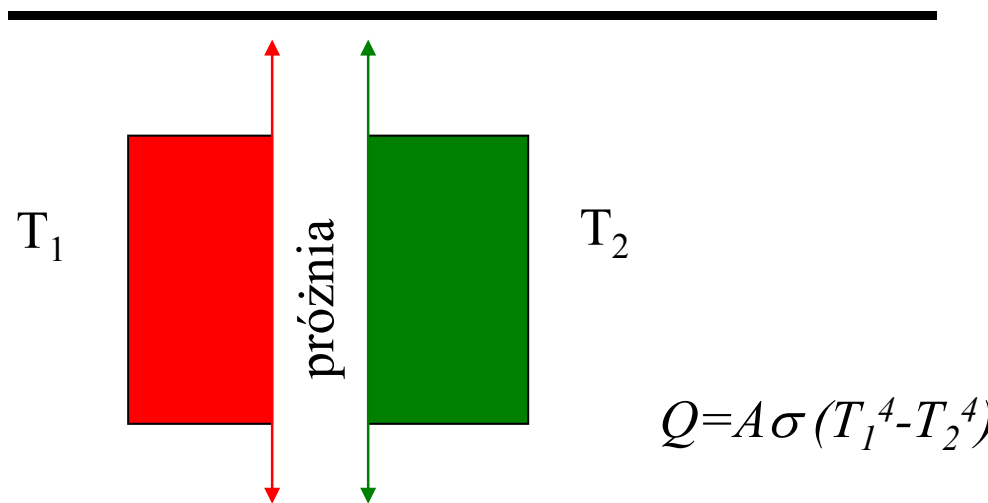
ciało doskonale czarne (wsp. odbicia 0)



Prawo Wiena: $\lambda_{\max} T = \text{const}$

Prawo Stefana:Boltzmana

$$\int e_\lambda(T) d\lambda = \sigma T^4$$

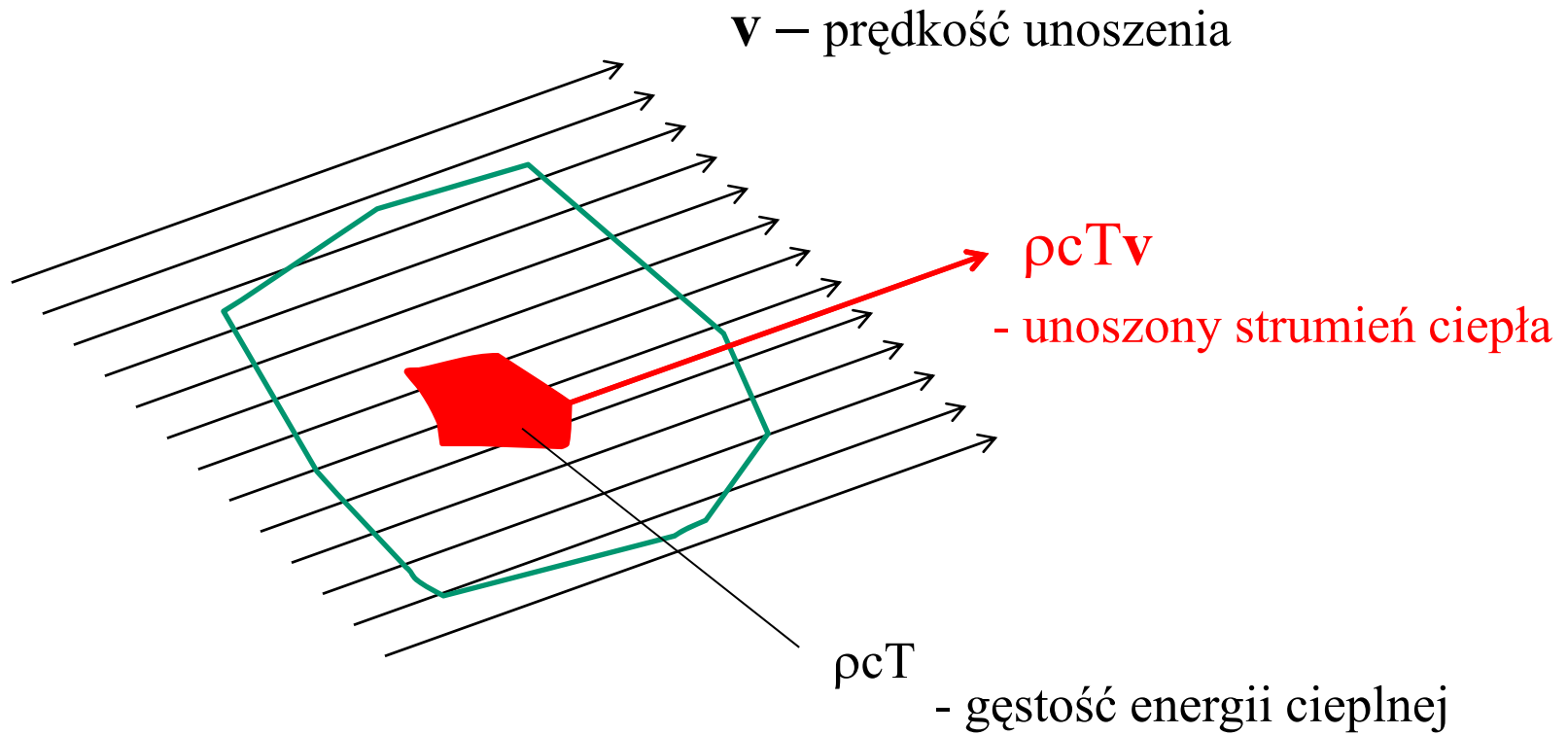


dwa ośrodki potrafią wymieniać energię przez promieniowanie nawet gdy próżnia między nimi

efekty promieniowania:

porównywalne z przewodzeniem i konwekcją w wysokich temperaturach: piece, spalanie itp.

2) Konwekcja (unoszenie ciepła)



3) przewodzenie (dyfuzja)

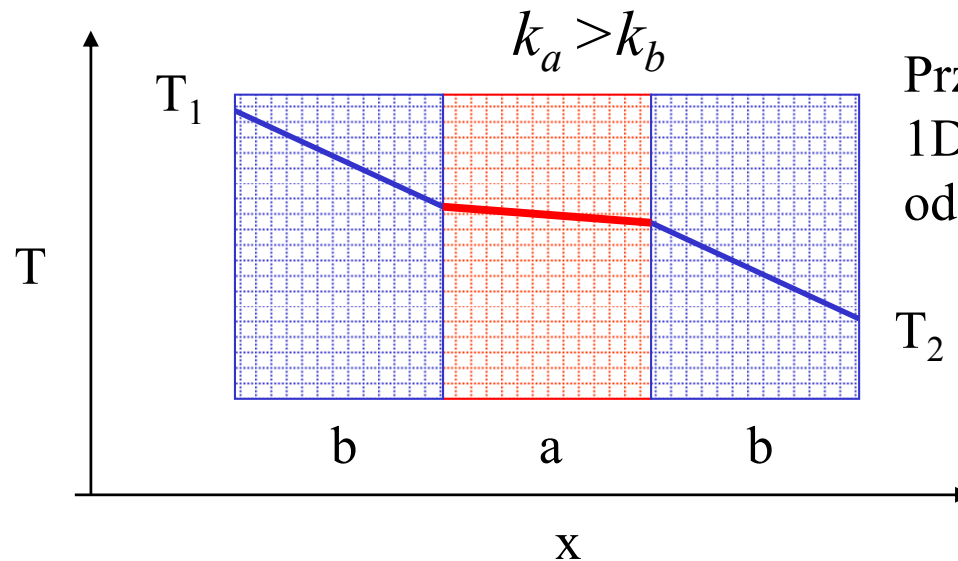
Prawo Fouriera: (odpowiednik p. Ficka dla materii)

$$\mathbf{q} = -k \nabla T$$

Strumień ciepła proporcjonalny i skierowany przeciwnie do gradientu temperatur

W ogólnym przypadku: przewodność cieplna $k = k[\mathbf{r}, T]$.

Stała materiałowa:



Przypadek stacjonarny ($q = const$)
1D. Temperatura od $(x) =$
odcinkami liniowa przy braku źródeł.

dla każdej substancji k zależy od T , my będziemy pracować w przybliżeniu $k = \langle k \rangle \neq k(T)$ (punkt pracy)

Równanie przewodnictwa cieplnego 1D, $k=\text{const}$

$$\mathbf{q} = -k\nabla T$$

→

Δx
powierzchnia A
masa $\rho A \Delta x$

→

$$Q_{in} = -kA \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_x \qquad Q_{out} = -kA \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x+\Delta x}$$

Wypadkowy strumień ciepła emitowany przez element materiału:

$$Q = Q_{out} - Q_{in} = -kA \frac{\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x+\Delta x} - \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_x}{\Delta x} \Delta x$$

W granicy $\Delta x \rightarrow 0$

$$Q = -kA \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \Delta x = -\frac{dU}{dt}$$

Równanie przewodnictwa cieplnego (dyfuzji ciepła) 1D, $k=\text{const}$

$$Q = -kA \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \Delta x = -\frac{dU}{dt}$$

Układ nie wykonuje pracy, wtedy

$$\frac{dU}{dt} = mc \frac{\partial T}{\partial t} = \rho A \Delta x c \frac{\partial T}{\partial t}$$

$$\frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

$$\alpha \equiv \frac{k}{\rho c} [m^2/s]$$

wniosek: równanie dyfuzji ciepła – wynik prawa Fouriera i I-szej zasady termodynamiki
(zasada zachowania energii z uwzględnieniem ciepła)

dla dyfuzji materii - inaczej - z równania ciągłości (z równania zachowania materii)

Równanie przewodnictwa cieplnego (dyfuzji ciepła) 1D, $k=\text{const}$

$$Q = -kA \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \Delta x = -\frac{dU}{dt}$$

Układ nie wykonuje pracy, wtedy


$$\frac{dU}{dt} = mc \frac{\partial T}{\partial t} = \rho A \Delta x c \frac{\partial T}{\partial t}$$

$$\frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

równanie opisuje
transport czysto dyfuzyjny
bez adwekcji

równanie adwekcji-dyfuzji: dla materii

źródła

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho \mathbf{v} - k \nabla \rho] = S$$


podobne równanie opisuje transport ciepła z zaniedbaniem promieniowania:

$$\frac{\partial(\rho c T)}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho c \mathbf{v} T - k' \nabla T] = S$$

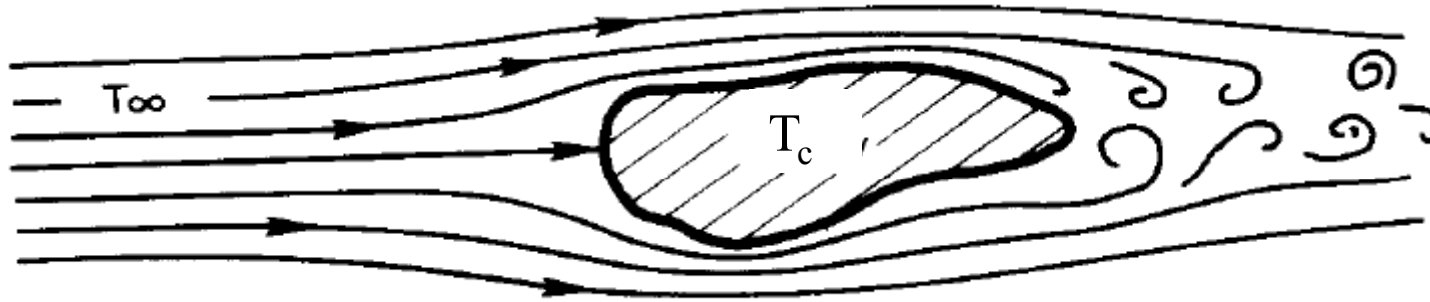
czynnik adwekcyjny jest zaniedbywalny dla
transportu ciepła w ciałach stałych
(dla płynów nie jest zaniedbywalny)

Warunki brzegowe dla transportu ciepła

- 1) ustalona temperatura $T(x_0)=T_0$
- 2) ustalony strumień ciepła : $k \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=x_0} = q_0$
- 3) na kontakcie ciało stałe / płyn:
strumień ciepła przez kontakt - proporcjonalny
do różnicy temperatur
(prawo Newtona, konwekcyjne warunki brzegowe)

Na laboratorium ćwiczymy warunki 1 oraz 3

konwekcyjne warunki brzegowe



Ciepło z ciała do otoczenia: przewodzone do warstwy granicznej, następnie unoszone przez ośrodek zewnętrzny

Prawo chłodzenia Newtona [transfer ciepła proporcjonalny do ΔT]

$$\frac{Q}{A} \equiv q = h(T_c - T_\infty)$$

Współczynnik transferu ciepła. Zazwyczaj $h(\Delta T)$, również funkcja prędkości płynu opływającego ciało

Strumień ciepła

J/sm²

Strumień ciepła ze środka ciała

na jego powierzchni proporcjonalny do pochodnej normalnej z temperatury: [pojemność cieplna warstwy granicznej = 0]

$$-k \frac{\partial T}{\partial n} = h(T_c - T_\infty)$$

Równanie przewodnictwa ciepłego (dyfuzji ciepła) 1D, $k=\text{const}$

$$Q = -kA \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \Delta x = -\frac{dU}{dt}$$

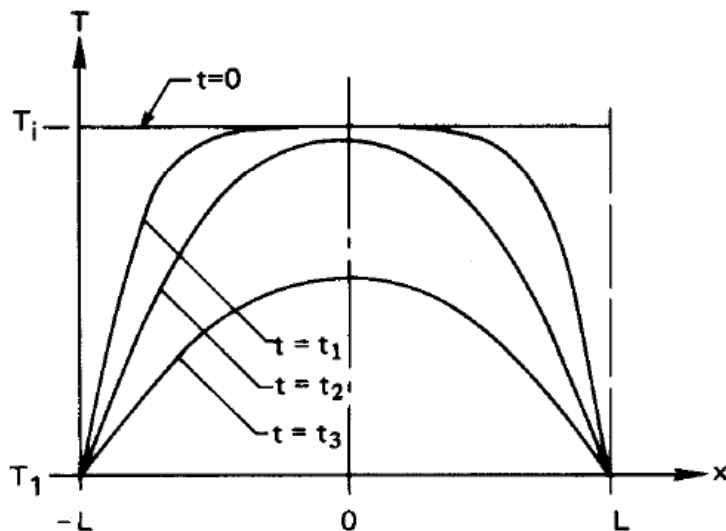
Układ nie wykonuje pracy, wtedy

$$\frac{dU}{dt} = mc \frac{\partial T}{\partial t} = \rho A \Delta x c \frac{\partial T}{\partial t}$$

$$\frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

$$\alpha \equiv \frac{k}{\rho c} [m^2/s]$$

Problem chłodzenia w 1D (dla którego Fourier wprowadził swój szereg)



W chwili początkowej
ciało ma temperaturę T_i

$$T(x, t=0) = T_i$$

Następnie umieszczone
w kąpielii o temperaturze T_1

$$T(x=0) = T(x=L) = T_1$$

Jak przebiegnie chłodzenie jako funkcja (x, t) ?

Problem chłodzenia w 1D

$$\frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

$$T(x, t = 0) = 1$$

$$T(0, t) = T(1, t) = 0$$

Metoda separacji zmiennych:

Szukamy szczególnych rozwiązań postaci: $T(x, t) = C(t)X(x)$

$$\frac{1}{\alpha C} \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{X} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} = -\lambda$$

Część przestrzenna:

$$X'' = -\lambda X$$

(równanie własne)

$$X = \sin(\lambda^{1/2} x)$$

$$z X(0) = X(1) = 0$$

$$\lambda = \lambda_n = (n\pi)^2$$

$$X_n = \sin(n\pi x)$$

$$X_n = \sin(n\pi x) \quad \lambda = \lambda_n = (n\pi)^2$$

Część czasowa

$$\frac{1}{\alpha C_n} \frac{\partial C_n}{\partial t} = -(n\pi)^2 \quad (\text{też własne, ale pierwszego rzędu})$$

$$C_n(t) = \exp(-\alpha(n\pi)^2 t)$$

$$T_n(x, t) = C_n(t) X_n(x)$$

Rozwiązanie ogólne:

$$T(x, t) = \sum_n a_n \exp(-\alpha(n\pi)^2 t) \sin(n\pi x)$$

a_n dobrane tak aby spełniony był warunek początkowy

a_n dobrane tak aby spełniony był warunek początkowy

$$T(x, t) = \sum_n a_n \exp(-\alpha(n\pi)^2 t) \sin(n\pi x)$$

$$T(x, t = 0) = \sum_n a_n \sin(n\pi x) \Big| \times \sin(m\pi x) \int_0^1 dx$$

$$\int_0^1 \sin(n\pi x) \sin(m\pi x) dx = \frac{1}{2} \delta_{mn}$$

$$a_n = 2 \int_0^1 T(x, t = 0) \sin(n\pi x) dx$$

Dla $T(x, t=0)=1$: $a_n = -\frac{2}{n\pi} \cos(n\pi x) \Big|_{x=0}^{x=1} = -\frac{2}{n\pi} ((-1)^n - 1)$

$$a_n = \begin{cases} \frac{4}{\pi n} & n \text{ nieparzyste} \\ 0 & n \text{ parzyste} \end{cases}$$

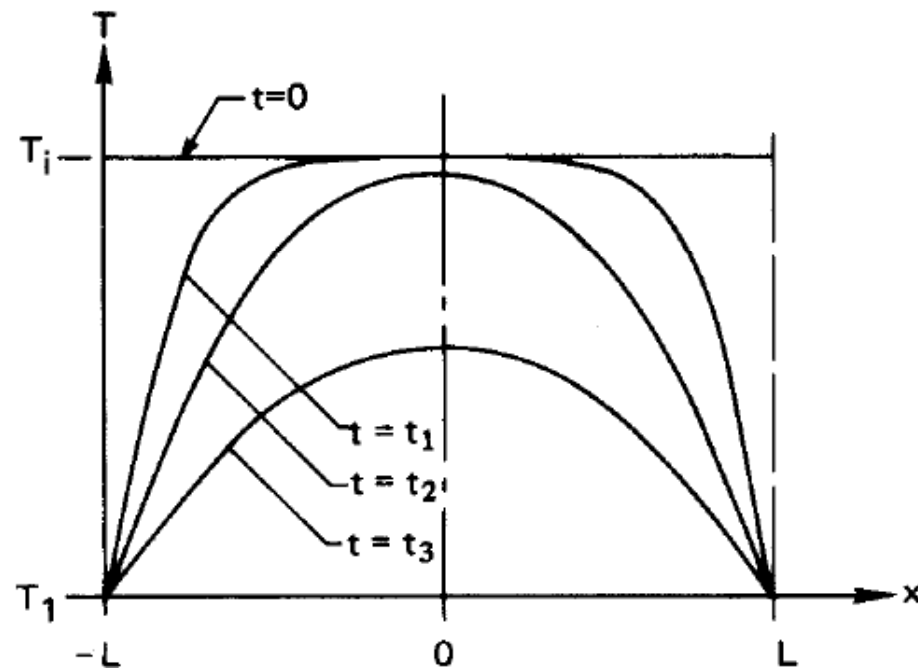
$$T(x, t) = \sum_k \frac{4}{(2k+1)\pi} \exp[-\alpha((2k+1)\pi)^2 t] \sin((2k+1)\pi x)$$

tempo stygnięcia $\longrightarrow \alpha \equiv \frac{k}{\rho c} [m^2/s]$

$$T(x, t) = \sum_n a_n \exp(-\alpha(n\pi)^2 t) \sin(n\pi x)$$

niezależnie od startu
rozkład T po pewnym czasie
będzie miał kształt $\sin(\rho x)$

Wszystkie gwałtowne zmiany
przestrzenne zostaną szybko
wygładzone



$$\frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \longrightarrow \frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

zmiana oznaczeń na bardziej typowe dla równania dyfuzji

[przedni czasowy, centralny przestrzenny]

$$\frac{u(x, t + \Delta t) - u(x, t)}{\Delta t} = D \frac{u(x + \Delta x, t) + u(x - \Delta x, t) - 2u(x, t)}{\Delta x^2} + O(\Delta t) + O(\Delta x^2)$$

MRS

metoda Eulera:
$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{D \Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n)$$

- 1) dla równania adwekcji: schemat z przednim ilorazem czasowym i centralnym ilorazem pierwszej pochodnej był bezwzględnie niestabilny
- 2) pokazaliśmy, że numeryczna dyfuzja stabilizuje schematy jednopoziomowe
- 3) dla równania adwekcji schemat Eulera z centralnym ilorazem przestrzennym nie zawierał numerycznej dyfuzji i właśnie dlatego był niestabilny
- 4) teraz dyfuzja jest rzeczywista (nie numeryczna)
podejrzewamy, że schemat ma szanse na bezwzględną stabilność

... sprawdzmy

analiza von Neumana metody Eulera dla równania dyfuzji

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \text{metoda Eulera:}$$

$$u_j^n = \sum_k A_k^n \exp(ikj\Delta x) \quad \begin{array}{l} \nearrow \\ u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n) \\ \downarrow \\ A_k^{n+1} = A_k^n + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (\exp(ik\Delta x) + \exp(-ik\Delta x) - 2) A_k^n \end{array}$$

Współczynnik
wzmocnienia modu k

$$M_k = 1 + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (\exp(ik\Delta x) + \exp(-ik\Delta x) - 2)$$

$$M_k = 1 + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (\exp(ik\Delta x) + \exp(-ik\Delta x) - 2)$$

$$M_k = 1 - \frac{2D\Delta t}{\Delta x^2} (1 - \cos(k\Delta x))$$

warunek stabilności $|M_k| \leq 1$

$$-1 \leq 1 - \frac{2D\Delta t}{\Delta x^2} (1 - \cos(k\Delta x)) \leq 1$$

$$-2 \leq -\frac{2D\Delta t}{\Delta x^2} (1 - \cos(k\Delta x)) \leq 0$$

$$0 \leq \frac{2D\Delta t}{\Delta x^2} (1 - \cos(k\Delta x)) \leq 2$$

$$0 \leq (1 - \cos) \leq 2$$

Ma być spełnione
Dla dowolnego k , a w tym
dla tego przy którym
wyrażenie w nawiasie
osiąga wartość
maksymalną - 2

Schemat Eulera dla równania dyfuzji jest
bezwzględnie stabilny jeśli:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2D}$$

Krok czasowy a stabilność schematu Eulera

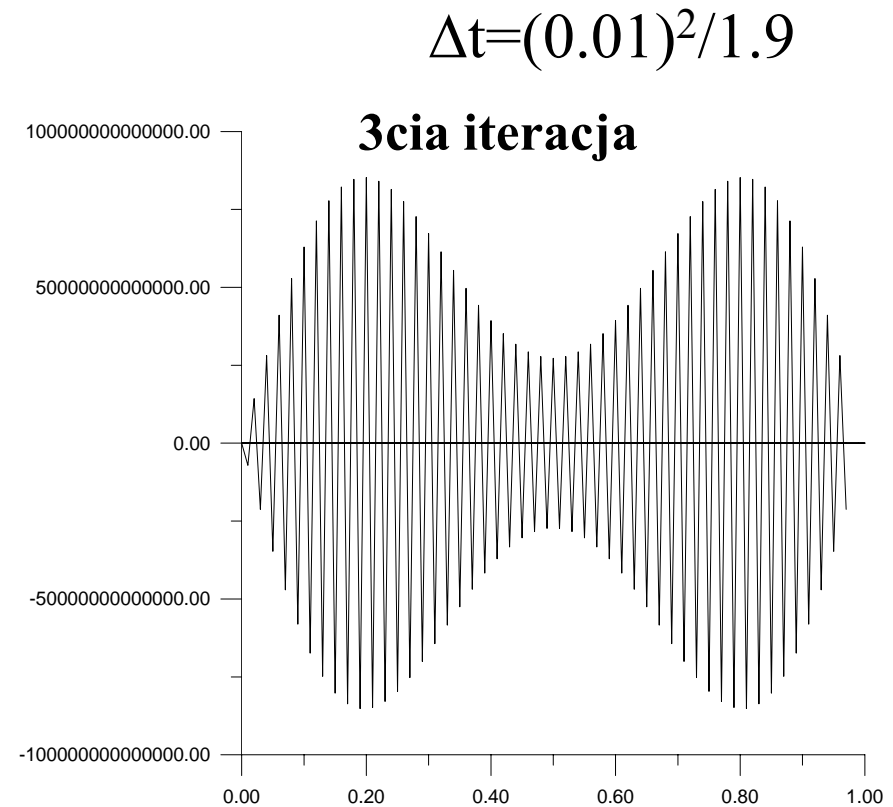
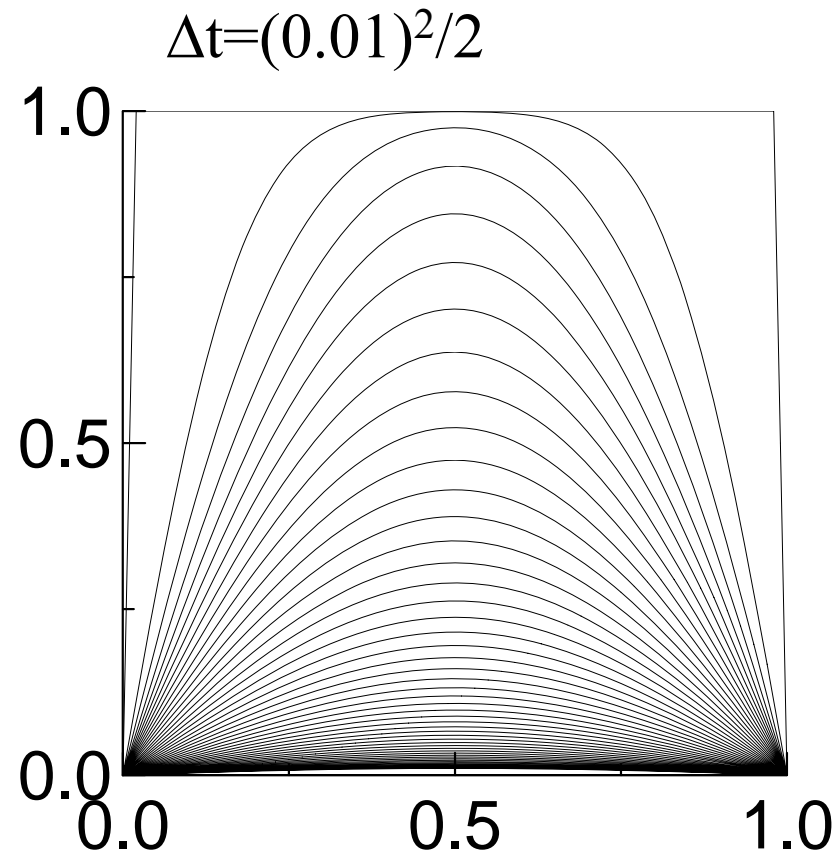
Problem: $u(x,t=0)=1$
 $u(x=0, t>0)=0$
 $u(x=1, t>0)=0$

Siatka: z krokiem $\Delta x=0.01$, przyjmujemy $D=1$

warunek
bezwzględnej
stabilności

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2D}$$

$\Delta x=0.01, D=1$



$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n)$$

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2D}$$

Uwaga:

- 1) dla krytycznego kroku czasowego schemat spełnia zasadę maximum (wystarczającą dla bezwzględnej stabilności schematu)
- 2) dla granicznego Δt u_j^n znika z prawej strony, a dla większego Δt **zmienia znak z każdą iteracją** (co jest źródłem niestabilności)

liczba charakterystyczna dla stabilności schematu:

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n)$$

r

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2D} \longrightarrow 0 \leq r \leq 1/2$$

odpowiednik liczby Couranta $\alpha = \frac{vdt}{dx}$

np. warunek stabilności schematu *upwind* $0 \leq \alpha \leq 1$ wynikał z kryterium CFL i tw. Laxa

jak wygląda kryterium CFL dla równania dyfuzji??

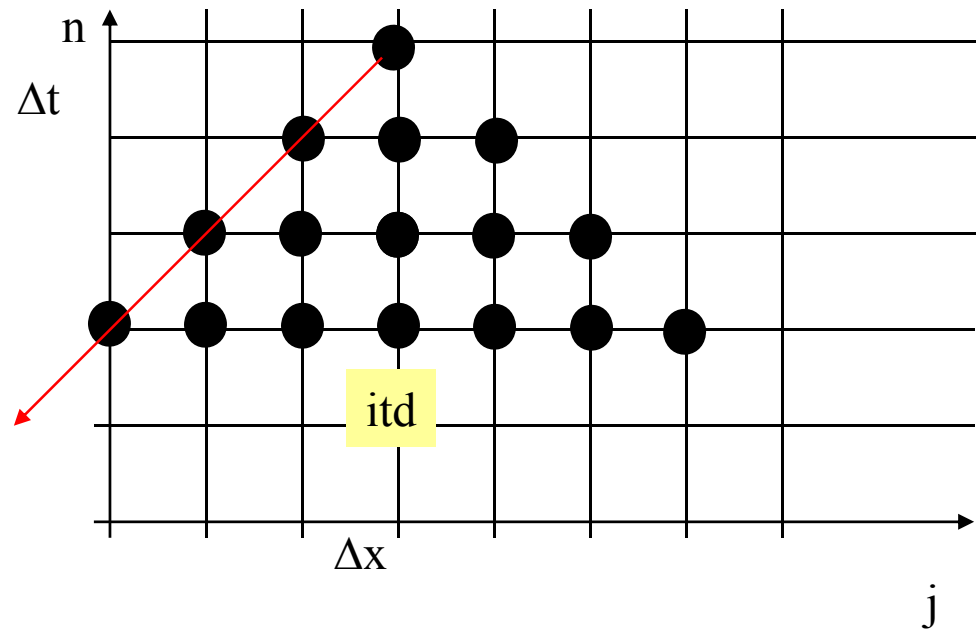
fizyczna a numeryczna przeszłość punktu w równaniu dyfuzji ?

dla równania adwekcji : przeszłość fizyczna $P =$ punkty leżące na charakterystyce

zgodnie z CFL WK zbieżności jest aby numeryczna domena zależności zawierała fizyczną numeryczną. domena zależności dla równania dyfuzji ze schematem Eulera ?

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n)$$

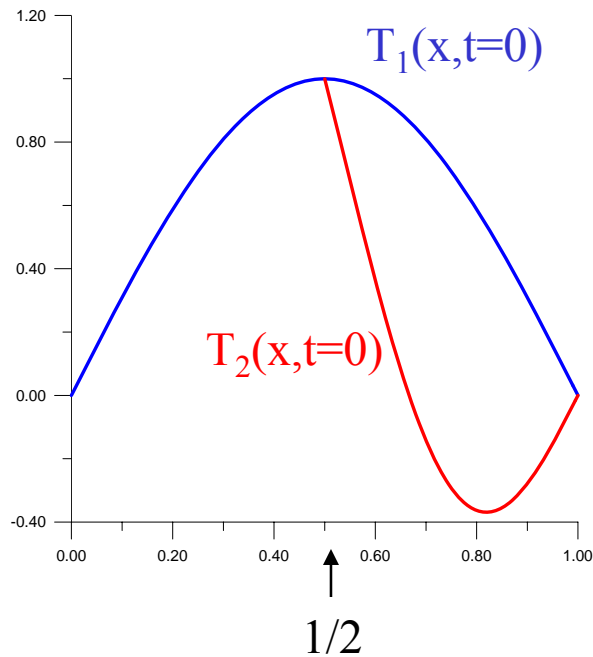
Przeszłość
numeryczna:



fizyczna domena zależności w równaniu dyfuzji ?

zróbmy doświadczenie obliczeniowe
aby ją wyznaczyć

$$\frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$



Rozwiążemy równanie dyfuzji
z dwoma warunkami początkowymi:
 $T_1(x,t=0)$ oraz $T_2(x,t=0)$

Dla $x < 1/2$ T_1 pokrywa się z T_2

po jakim czasie t w punkcie np. $x=0.2$
rozwiązania z T_1 oraz T_2 zaczną
się różnić?

Mając x oraz t wyznaczymy prędkość
propagowania informacji w równaniu
dyfuzji.

W równaniu adwekcji $u_t + v u_x = 0$
prędkość propagacji informacji
była równa prędkości unoszenia v

fizyczna domena zależności w równaniu dyfuzji ?

zróbmy doświadczenie obliczeniowe
aby ją wyznaczyć

$$\frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

$$T(x, t) = \sum_n a_n \exp(-\alpha(n\pi)^2 t) \sin(n\pi x)$$

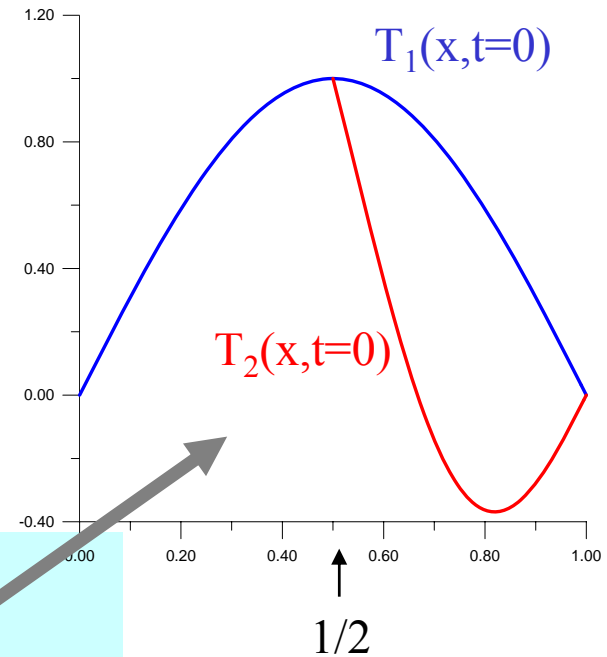
$$a_n = 2 \int_0^1 T(x, t=0) \sin(n\pi x) dx$$

użyjemy $T(0,t)=T(1,t)=0$

Dla $x=0$: rozważmy dwa warunki początkowe

1) $T_1(x,t=0) = \sin(\pi x)$: rozwiązanie: $T(x,t) = \sin(\pi x) \exp(-\alpha\pi^2 t)$

2) $T_2(x,t=0) = \sin(\pi x)$ dla $x < 1/2$
 $= \sin(\pi x) + \sin(2\pi x)$ dla $x > 1/2$

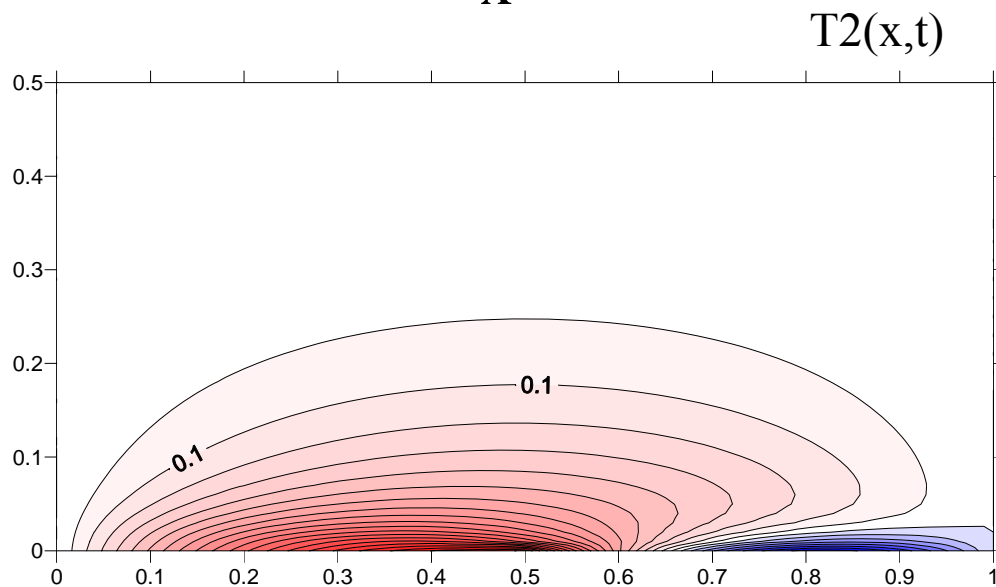
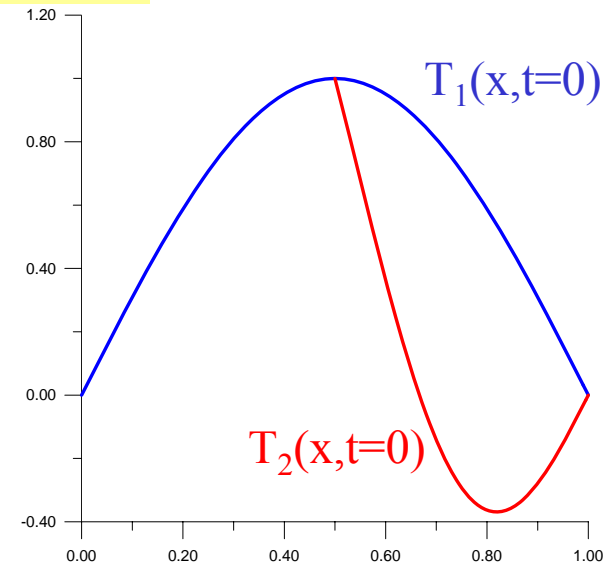
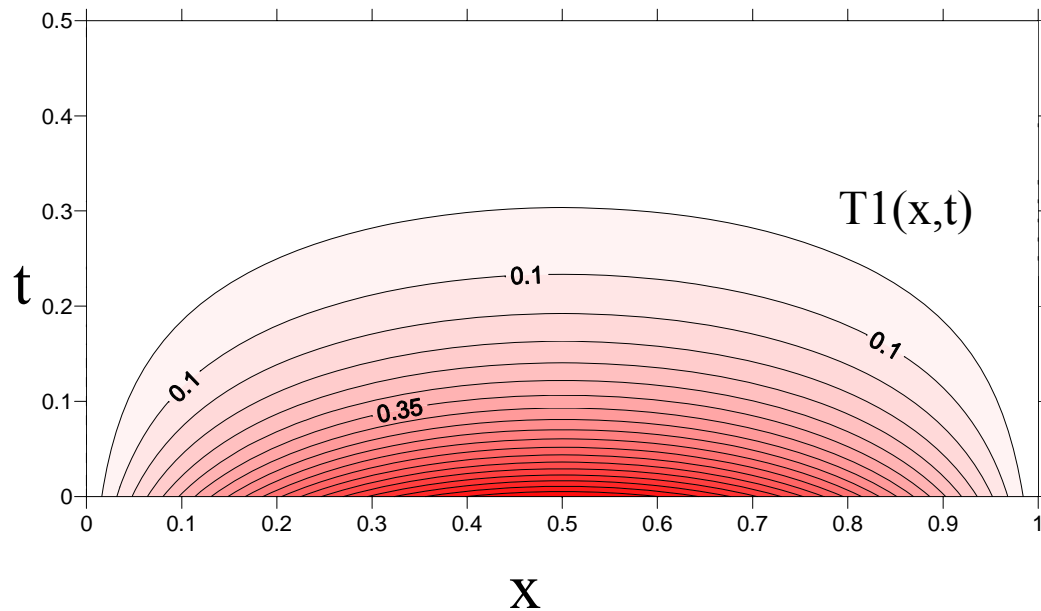


$$T_2(x, t) = T_1(x, t) + \sum_{k=1}^{\infty} b_k \exp(-\alpha(k\pi)^2 t) \sin(k\pi x)$$

$$b_k = 2 \int_{1/2}^1 \sin(2\pi x) \sin(k\pi x) dx \longrightarrow$$

$$b_1 = -4/3\pi, b_2 = 1/2, b_k = 4\sin(\pi k/2)/\pi (k^2 - 4)$$

fizyczna domena zależności w równaniu dyfuzji ?



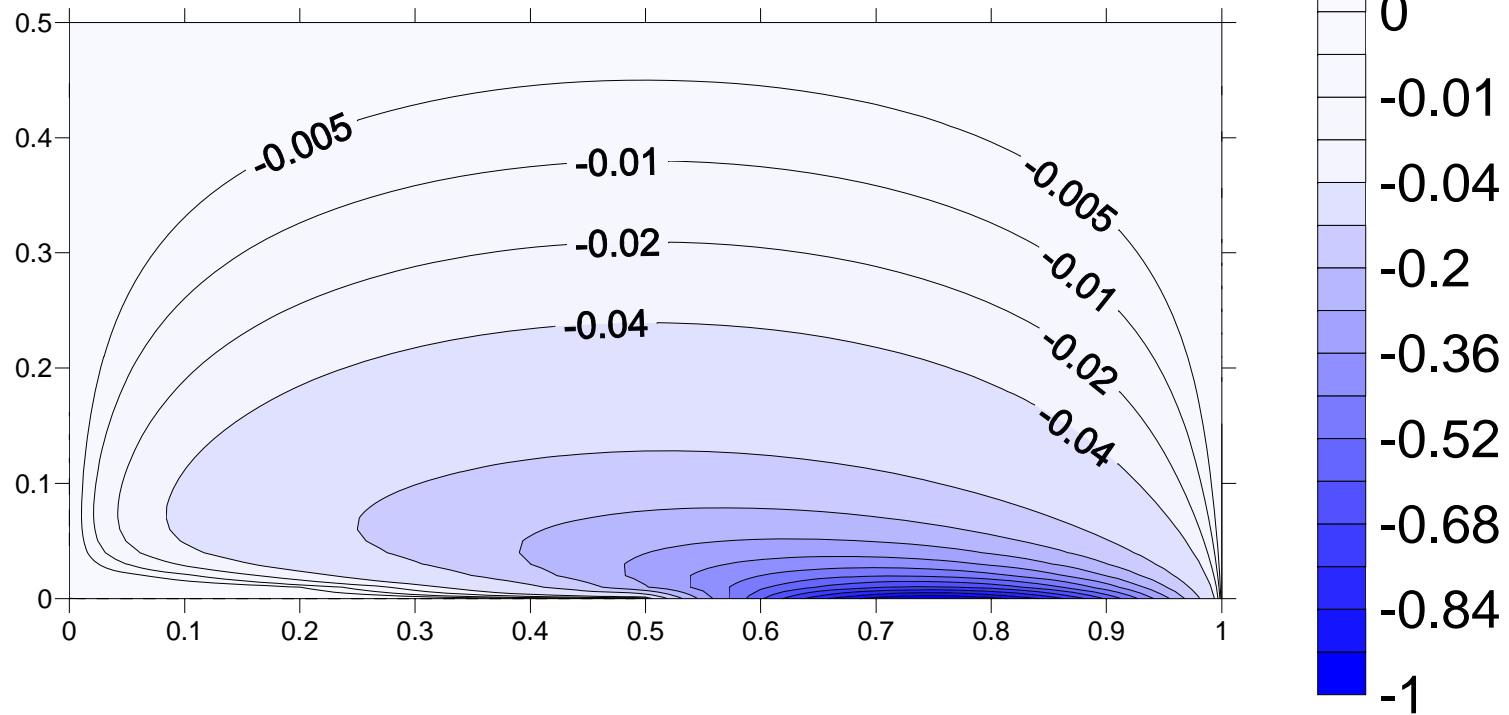
pytanie:

Po jakim czasie punkty
na lewo od $x=0.5$
poczują, że warunek początkowy
po prawej stronie pudła
jest inny?

inaczej: czy punkt $x=0.5, t=0$
należy do domeny zależności
punktu $x=0.1, t=dt$, gdzie dt -małe? ?

fizyczna domena zależności w równaniu dyfuzji ?

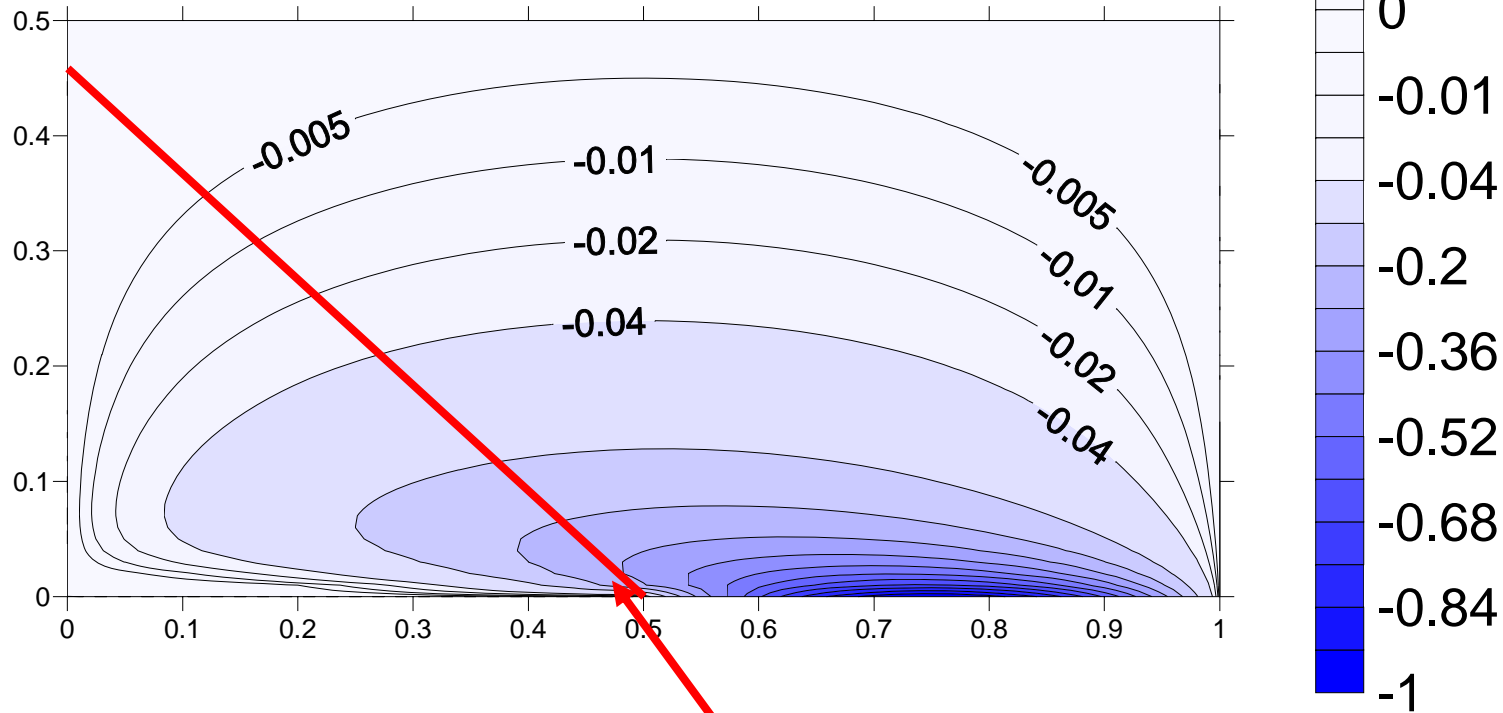
T2-T1



im bardziej zagęścimy poziomicę
tym bliżej pojawią się osi $t=0$

fizyczna domena zależności w równaniu dyfuzji ?

T2-T1

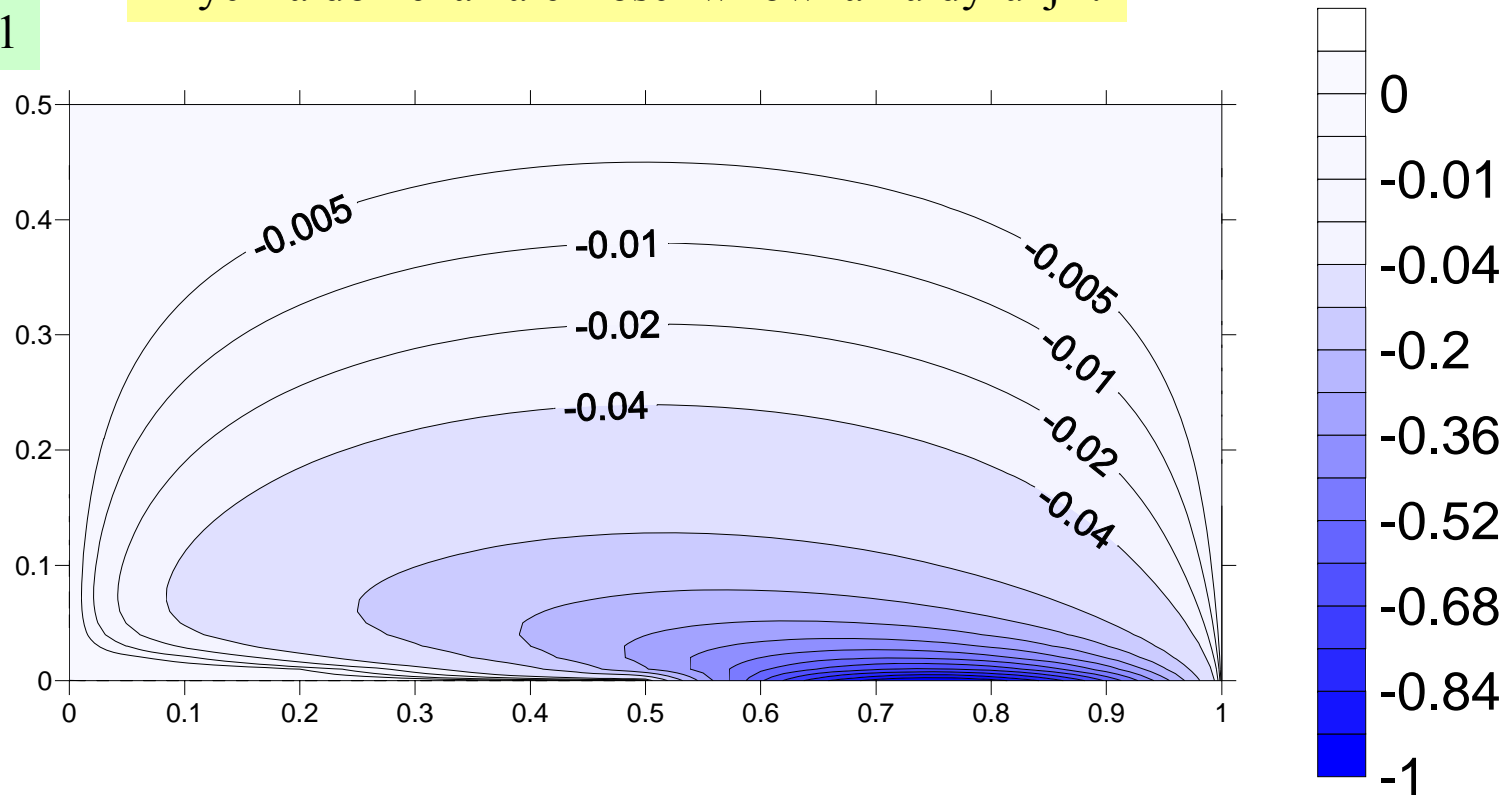


im bardziej zagęścimy poziomicę
tym bliżej pojawią się osi $t=0$

tak wyglądałyby
poziomica zerowa
gdyby prędkość rozchodzenia
się informacji była skończona
(np. dla adwekcji lub r. falowego)

fizyczna domena zależności w równaniu dyfuzji ?

T2-T1



im bardziej zagęścimy poziomice
tym bliżej pojawią się osi $t=0$

wniosek: w równaniu dyfuzji
pewien (niewielki) wpływ
na rozwiązanie w *każdym* punkcie np. $x=0.1$
ma warunek początkowy zadany dla
 $x > 1/2$.

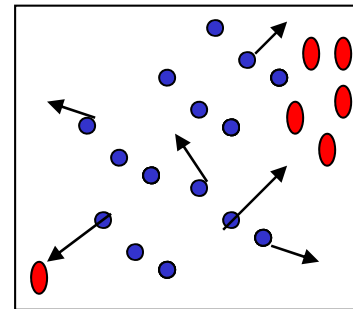
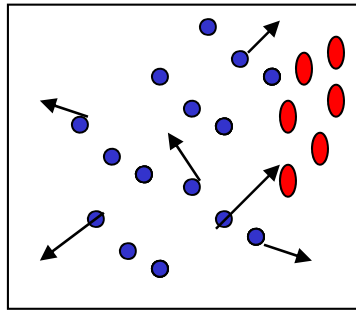
Warunek początkowy z prawej stronie pudła ma
sвій wpływ na lewą *natychmiast dla $t > 0$*

dla równania dyfuzji : fizyczna domena zależności punktu to cała połowa czasoprzestrzeni!

dla równania dyfuzji : fizyczna domena zależności punktu to cała połowa czasoprzestrzeni!
ilustracja

drobiny pyłu (czerwone kropki) w cieczy (cząstki H_2O – niebieskie kropki).

W chwili początkowej cały pył jest zlokalizowany w jednym z narożników.
Średnia koncentracja pyłu – opisywalna równaniem dyfuzji.
Ruch pojedynczej cząstki pyłu przypadkowy (ruchy Browna)



Istnieje małe lecz niezerowe prawdopodobieństwo, że jedna z drobin znajdzie się niemal natychmiast w przeciwległym narożniku w wyniku szczęśliwego zbiegu okoliczności (zostanie popchnięta kolejno przez wiele cząsteczek wody)

dla równania dyfuzji : fizyczna domena zależności punktu to cała połowa czasoprzestrzeni!

dla równania dyfuzji : fizyczna domena zależności punktu to cała połowa czasoprzestrzeni!
ilustracja

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Jedno z rozwiązań: $u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$

Dla chwili początkowej $t_0 = 0$

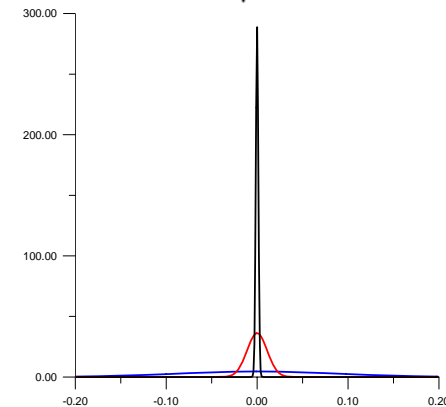
Rozwiązanie to przechodzi w deltę Diraca,

Lub inaczej stanowi rozwiązanie dla warunku początkowego w formie $u(x, t=0) = \delta(x)$

dla $t > 0$, u jest znika dla wszystkich $x \neq 0$

dla $t > 0$, u jest niezerowe dla wszystkich x

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \exp(-x^2/a^2)$$



dla równania dyfuzji : fizyczna domena zależności punktu to cała połowa czasoprzestrzeni!

dla równania dyfuzji : fizyczna domena zależności punktu to cała połowa czasoprzestrzeni!

Pamiętamy, że przeszłość numeryczna punktu w Eulerze jawnym to trójkąt a nie półpłaszczyzna?

A warunek konieczny zbieżności CFL?

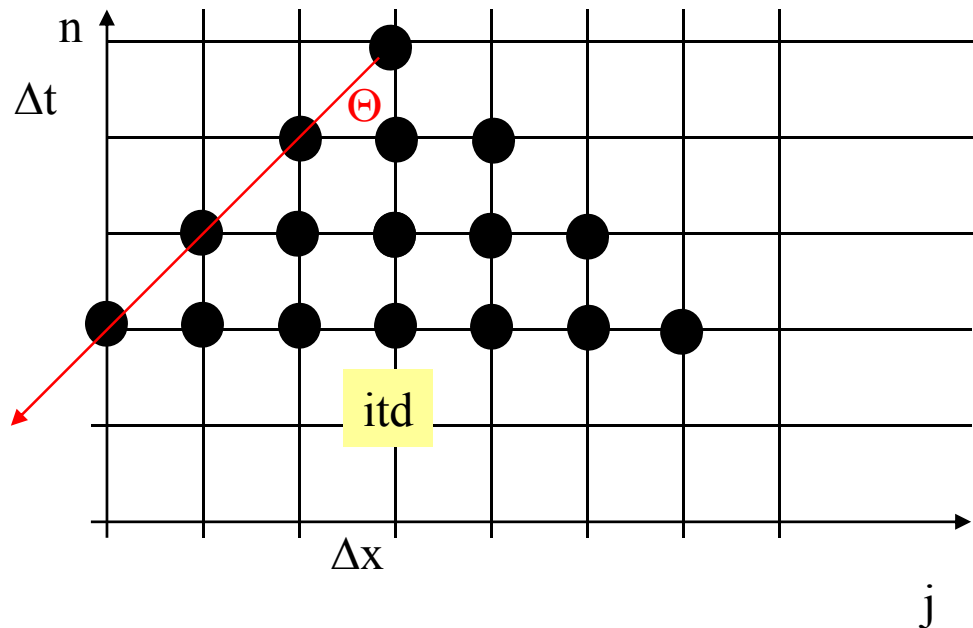
zgodnie z CFL WK zbieżności jest aby numeryczna domena zależności zawierała fizyczną numeryczną. domena zależności dla równania dyfuzji ze schematem Eulera ?

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n)$$

r

w.stab.Eulera

$$0 \leq r \leq 1/2$$

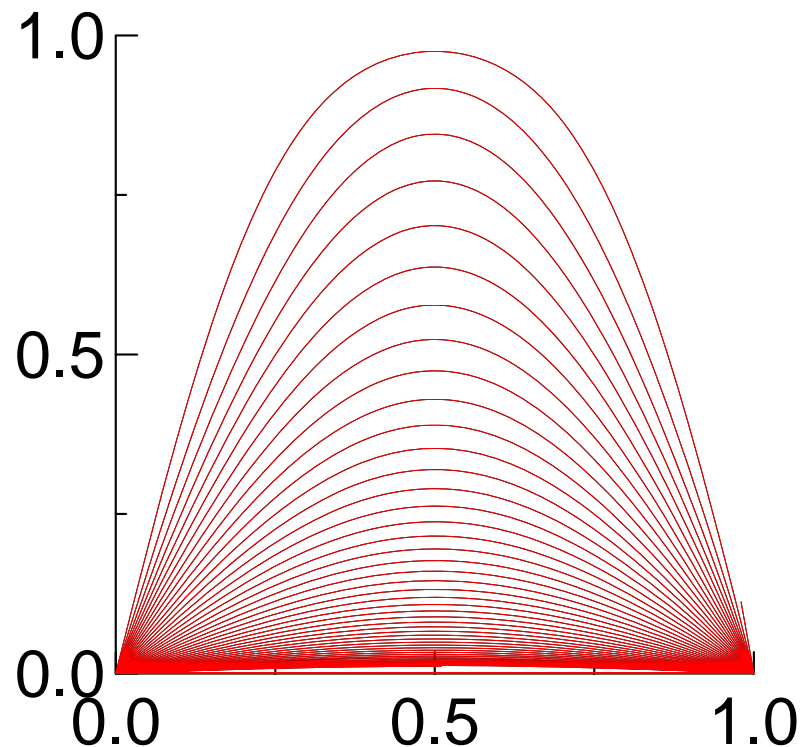


przeszłość trójkąt o połowie kąta rozwarcia $\Theta = \arctan(\Delta x / \Delta t)$

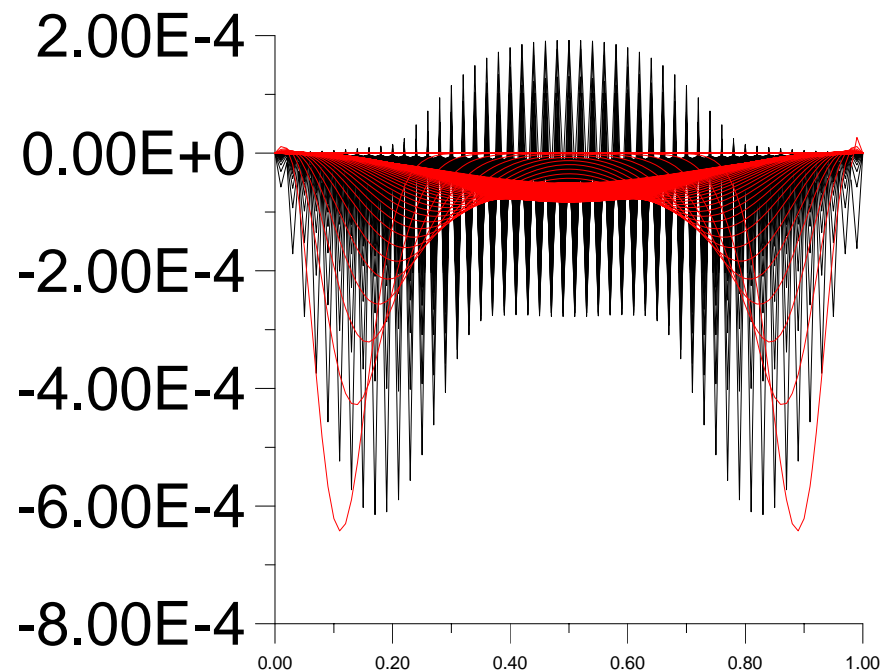
trzymajmy $r = D\Delta t / \Delta x^2$ zafiksowane i zmniejszajmy jednocześnie obydwa kroki $\Delta t, \Delta x$
 $\Theta = \arctan(D/r \Delta x)$ gdy $\Delta x \rightarrow 0$: kąt dąży do $\pi/2$ – obejmuje całą przeszłość
 CFL spełnione

Dokładność jawnego schematu Eulera dla równania dyfuzji

Metoda Eulera i wynik dokładny dla kroku granicznego:



Czarne: błąd z Δt krytycznym
czerwone = z 10 –krotnie mniejszym
maksymalny błąd znacząco nie zmalał !



Wniosek: krytyczny Δt jest bardzo mały (w niedokładności dominuje błąd przestrzenny).
Chcemy pozwolić sobie na większą niedokładność bez utraty stabilności
- czyli liczyć z większym krokiem czasowym \rightarrow schematy niejawne

jawna metoda Eulera: $u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n)$

pochodna przestrzenna liczona w n -tym kroku czasowym
(gdy u znane)

... dla stabilności potrzeba aby $r=D\Delta t/\Delta x^2 \leq 1/2$

Czytać: jako ograniczenie na krok czasowy: $\Delta t \leq \Delta x^2/2D$

Widzieliśmy że krytyczny krok czasowy jest tak mały, że jego dalsze zmniejszanie nie powoduje poprawy dokładności rachunku

[stosując schemat jawny zmuszeni jesteśmy liczyć dokładniej niż tego potrzebujemy]

Niejawny (wsteczny) schemat Eulera

jawna metoda Eulera: $u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n)$

pochodna przestrzenna liczona w n -tym kroku czasowym
(gdy u znane)

... dla stabilności potrzeba aby $r=D\Delta t/\Delta x^2 \leq 1/2$

Czytać: jako ograniczenie na krok czasowy: $\Delta t \leq \Delta x^2/2D$

Widzieliśmy że krytyczny krok czasowy jest tak mały, że jego dalsze zmniejszanie nie powoduje poprawy dokładności rachunku

[stosując schemat jawny zmuszeni jesteśmy liczyć dokładniej niż tego potrzebujemy]

W kontekście równań zwyczajnych oraz równania adwekcji widzieliśmy, że dla zniesienia ograniczenia na krok czasowy wprowadza się metody niejawne

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \longrightarrow \quad \frac{u(t + \Delta t) - u(t)}{\Delta t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (\text{schemat Eulera})$$

$$\frac{u(t + \Delta t) - u(t)}{\Delta t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_t$$

schemat jawny

$$\frac{u(t + \Delta t) - u(t)}{\Delta t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{t+\Delta t}$$

schemat niejawny

Niejawny (wsteczny) schemat Eulera

jawna metoda Eulera: $u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n)$

pochodna przestrzenna liczona w n -tym kroku czasowym
(gdy u znane)

... dla stabilności potrzeba aby $\Delta t \leq \Delta x^2/2D$

Czytać: jako ograniczenie na krok czasowy.

Widzieliśmy że krytyczny krok czasowy jest bardzo mały

niejawna metoda Eulera:

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^{n+1} + u_{j-1}^{n+1} - 2u_j^{n+1})$$

pochodna przestrzenna liczona w $n+1$ -szym kroku czasowym.
metoda niejawna, konieczne rozwiązanie
układu równań liniowych na $(n+1)$ krok czasowy.

$$-\gamma u_{j-1}^{n+1} + (1 + 2\gamma)u_j^{n+1} - \gamma u_{j+1}^{n+1} = u_j^n$$

$$r = \gamma = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$$

$$\begin{pmatrix} (1+2\gamma) & -\gamma & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\gamma & (1+2\gamma) & -\gamma & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\gamma & (1+2\gamma) & -\gamma & 0 & \dots & 0 \\ & & & \dots & & & \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -\gamma & (1+2\gamma) & -\gamma \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & -\gamma & (1+2\gamma) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ u_3^{n+1} \\ \dots \\ u_{N-2}^{n+1} \\ u_{N-1}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1^n \\ u_2^n \\ u_3^n \\ \dots \\ u_{N-2}^n \\ u_{N-1}^n \end{pmatrix}$$

Co z warunkami brzegowymi $u_0=u_N=0$?

$$\gamma = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$$

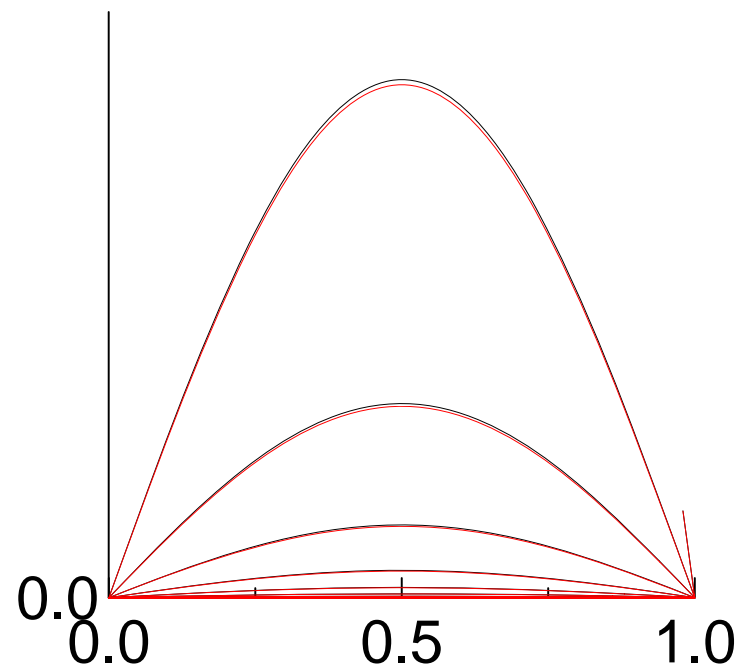
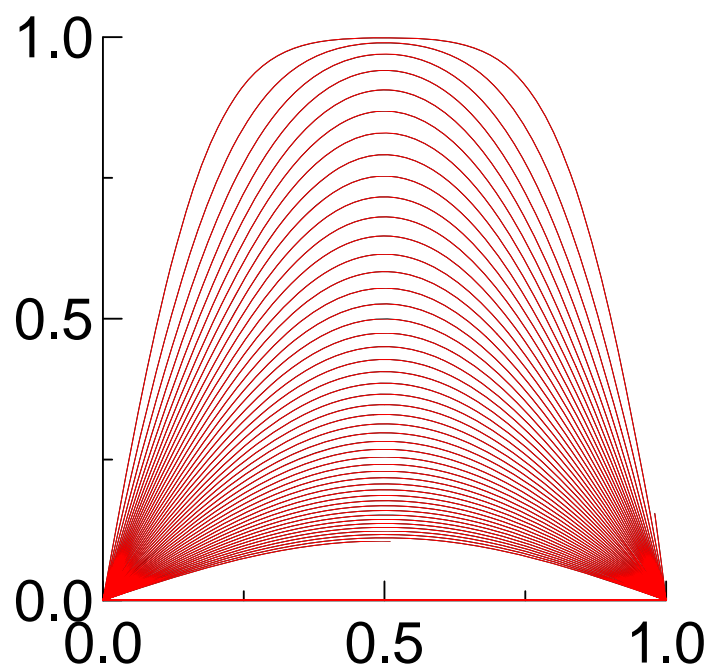
$$-\gamma u_{j-1}^{n+1} + (1+2\gamma)u_j^{n+1} - \gamma u_{j+1}^{n+1} = u_j^n$$

one są zapisane w pierwszym i ostatnim wierszu równania
- zobaczyć

Stabilność niejawnego schematu Eulera

$$\Delta t = \frac{\Delta x^2}{2D} \times \frac{2}{1.9}$$

$$\Delta t = \frac{\Delta x^2}{2D} \times 10$$



Czerwone dokładne
Czarne wsteczny Euler

zachodzi podejrzenie, że wsteczny Euler jest stabilny dla dowolnego kroku czasowego - sprawdźmy

Stabilność niejawnego schematu Eulera dla równania dyfuzji

$$-\gamma u_{j-1}^{n+1} + (1 + 2\gamma)u_j^{n+1} - \gamma u_{j+1}^{n+1} = u_j^n$$

$$r = \gamma = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$$

analiza von Neumanna daje
kryterium stabilności:

$$\left| \frac{1}{[-\gamma \exp(-ik\Delta x) + (1 + 2\gamma) - \gamma \exp(ik\Delta x)]} \right| \leq 1$$

$$|-\gamma \exp(-ik\Delta x) + (1 + 2\gamma) - \gamma \exp(ik\Delta x)| \geq 1$$

Stabilność niejawnego s. Eulera dla równania dyfuzji

$$|-\gamma \exp(-ik\Delta x) + (1 + 2\gamma) - \gamma \exp(ik\Delta x)| \geq 1$$

$$|(1 + 2\gamma) - 2\gamma \cos(k\Delta x)| \geq 1$$

$$\underline{1 + 2\gamma(1 - \cos(k\Delta x)) \geq 1 \text{ lub } \leq -1}$$

To pierwsze zawsze prawdziwe

$$r = \gamma = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$$

Niejawny schemat Eulera = bezwarunkowo stabilny

Obydwa schematy Eulera - pierwszy rząd dokładności czasowej

[błąd dyskretyzacji rzędu pierwszego
błąd lokalny drugiego]

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n)$$

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^{n+1} + u_{j-1}^{n+1} - 2u_j^{n+1})$$

Poprawić dokładność schematu
mieszając metody

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n)$$

spróbujmy
poprawić metodę
mieszając schematy

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^{n+1} + u_{j-1}^{n+1} - 2u_j^{n+1})$$

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \theta r (u_{j+1}^{n+1} + u_{j-1}^{n+1} - 2u_j^{n+1}) \\ + (1 - \theta)r (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n)$$

$\theta=0$ – jawny schemat Eulera

$\theta=1$ – niejawny schemat Eulera

$\theta=1/2$ – schemat Cranka Nicolsona (odpowiednik wzoru trapezów)

jakie musi być parametr mieszania θ aby schemat bezwarunkowo stabilny ?

$$\gamma_k = 1 + \theta r \gamma_k [\exp(ik\Delta x) + \exp(-ik\Delta x) - 2] \\ + (1 - \theta)r [\exp(ik\Delta x) + \exp(-ik\Delta x) - 2]$$

$$\gamma_k = 1 + 2\theta r \gamma_k [\cos(k\Delta x) - 1] \\ + 2(1 - \theta)r [\cos(k\Delta x) - 1] \longrightarrow \gamma_k = 1 - \frac{2r(1 - \cos(k\Delta x))}{1 + 2r\theta(1 - \cos(k\Delta x))}$$

$$\gamma_k = 1 - \frac{2r(1 - \cos(k\Delta x))}{1 + 2r\theta(1 - \cos(k\Delta x))}$$

$$\cos(2a) = \cos^2 a - \sin^2 a = 1 - 2\sin^2 a \rightarrow 1 - \cos(2a) = 2\sin^2 a$$

warunek stabilności bezwzględnej

$$\gamma_k = 1 - \frac{4r \sin^2(k\Delta x/2)}{1 + 4r\theta \sin^2(k\Delta x/2)}$$

$$-1 \leq 1 - \frac{4r \sin^2(k\Delta x/2)}{1 + 4r\theta \sin^2(k\Delta x/2)} \leq 1$$

zawsze

$$\frac{4r \sin^2(k\Delta x/2)}{1 + 4r\theta \sin^2(k\Delta x/2)} \leq 2 \rightarrow 2r \sin^2(k\Delta x/2) [1 - 2\theta] \leq 1$$

$$\text{trzeba aby: } 2r[1 - 2\theta] \leq 1$$

gdy człon $[1 - 2\theta] \leq 0$ (czyli $\theta \geq 1/2$) schemat bezwzględnie stabilny bezwarunkowo [znaczy dla każdego r ($\Delta t, \Delta x$)]

dla mniejszych θ : *bezwzględna stabilność dla $r \leq 1 / (2 [1 - 2\theta])$*
 dla $\theta = 0$ odnajdujemy znany warunek dla jawnego schematu Eulera

błąd dyskretyzacji

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \frac{D}{\Delta x^2} \left[\theta \left(u_{j+1}^{n+1} + u_{j-1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} \right) + (1 - \theta) \left(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n \right) \right]$$

Wstawiamy rozwiązanie dokładne do schematu różnicowego,
co zostanie – błąd dyskretyzacji

$$\begin{aligned} \tau_j^n &= \frac{u(x, t + \Delta t) - u(x, t)}{\Delta t} \\ &- \frac{D}{\Delta x^2} \left[\theta \left(u(x + \Delta x, t + \Delta t) + u(x - \Delta x, t + \Delta t) - 2u(x, t + \Delta t) \right) \right. \\ &\quad \left. + (1 - \theta) \left(u(x + \Delta x, t) + u(x - \Delta x, t) - 2u(x, t) \right) \right] \end{aligned}$$

rozwinąć w szereg Taylora względem $u(x, t)$, wykorzystać $u_t = Du_{xx}$, zostanie:

$$\tau_j^n = -\Delta t \left(\frac{1}{2} - \theta \right) (u_{tt})_j^n + \frac{D\Delta x^2}{12} (u_{xxxx})_j^n + O(\Delta t^2) + O(\Delta x^4)$$

wniosek: błąd dyskretyzacji $O(\Delta t^2)$ tylko dla $\theta=1/2 \rightarrow$ w tej klasie metod CN
jest najdokładniejszy

Jawny Euler

$$\frac{u(t + \Delta t) - u(t)}{\Delta t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_t$$

niejawny Euler

$$\frac{u(t + \Delta t) - u(t)}{\Delta t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{t+\Delta t}$$

Schemat CN:

$$\frac{u(t + \Delta t) - u(t)}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left(D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_t + D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{t+\Delta t} \right)$$

Odpowiednik wzoru trapezów dla $dy/dt=f(t)$

$$y(t + \Delta t) = y(t) + \frac{\Delta t}{2} (f(t) + f(t + \Delta t)) + O(\Delta t^3)$$

Euler:
$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n) + O(\Delta t^2)$$

(błąd lokalny)

CN:

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{D\Delta t}{2\Delta x^2} (u_{j+1}^{n+1} + u_{j-1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n) + O(\Delta t^3)$$

Do układu równań:

$$r = \gamma = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$$

$$-\frac{\gamma}{2}u_{j-1}^{n+1} + (1 + \gamma)u_j^{n+1} - \frac{\gamma}{2}u_{j+1}^{n+1} = \frac{\gamma}{2}u_{j-1}^n + (1 - \gamma)u_j^n + \frac{\gamma}{2}u_{j+1}^n$$

$$-\frac{\gamma}{2}u_{j-1}^{n+1} + (1 + \gamma)u_j^{n+1} - \frac{\gamma}{2}u_{j+1}^{n+1} = \frac{\gamma}{2}u_{j-1}^n + (1 - \gamma)u_j^n + \frac{\gamma}{2}u_{j+1}^n$$

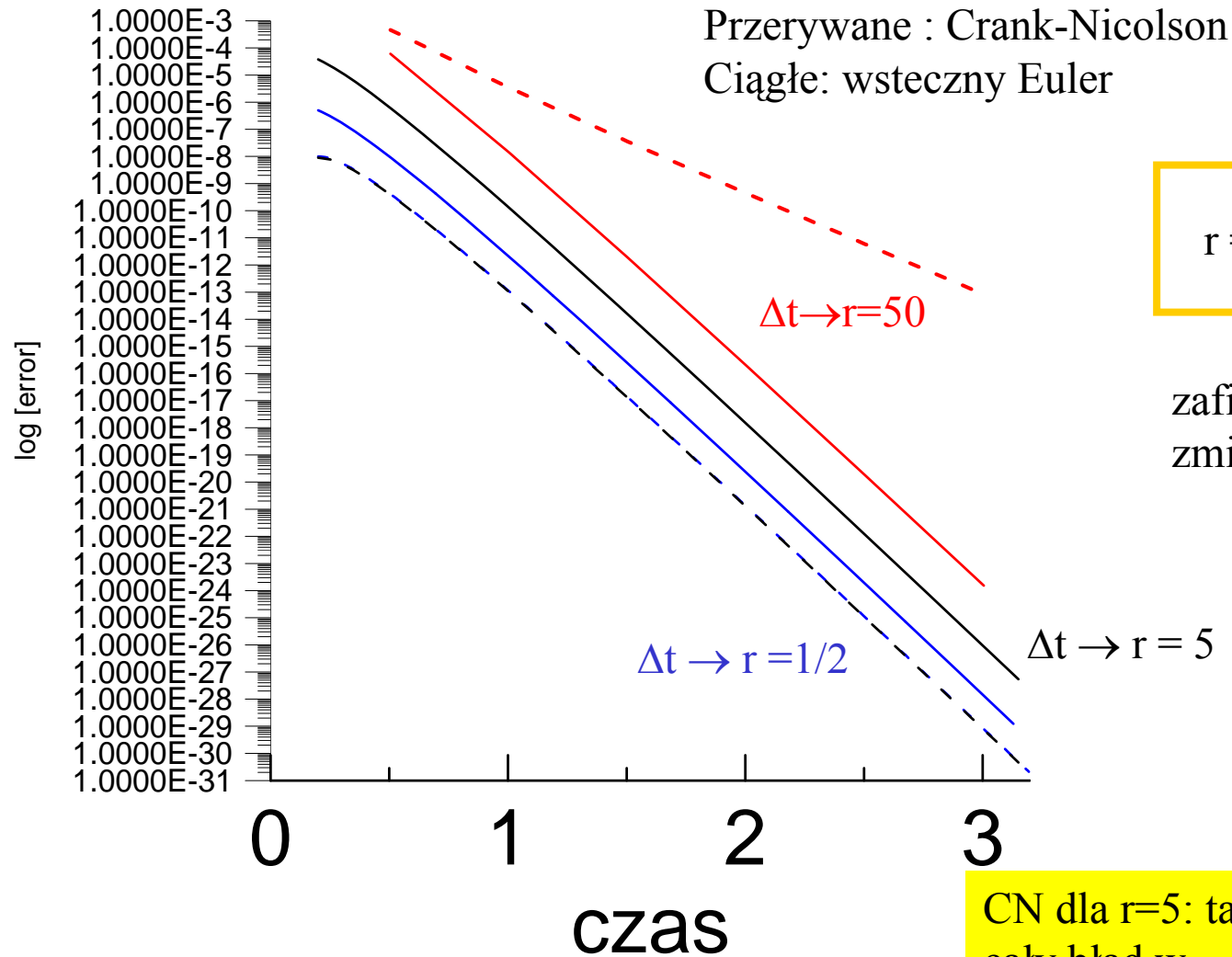
$$\begin{pmatrix} (1 + \gamma) & -\gamma/2 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\gamma/2 & (1 + \gamma) & -\gamma/2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\gamma/2 & (1 + \gamma) & -\gamma/2 & 0 & \dots & 0 \\ & & & \dots & & & \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -\gamma/2 & (1 + \gamma) & -\gamma/2 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & -\gamma/2 & (1 + \gamma) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ u_3^{n+1} \\ \dots \\ u_{N-2}^{n+1} \\ u_{N-1}^{n+1} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} (1 - \gamma) & \gamma/2 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \gamma/2 & (1 - \gamma) & \gamma/2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \gamma/2 & (1 - \gamma) & \gamma/2 & 0 & \dots & 0 \\ & & & \dots & & & \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \gamma/2 & (1 - \gamma) & \gamma/2 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \gamma/2 & (1 - \gamma) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^n \\ u_2^n \\ u_3^n \\ \dots \\ u_{N-2}^n \\ u_{N-1}^n \end{pmatrix}$$

Dokładność a krok czasowy dla Crank-Nicolsona i wstecznego Eulera

$\Delta x=0.01, D=1$

Problem chłodzenia pręta, jak poprzednio. Błąd kwadratowy:
 $(u(\text{numeryczne})-u(\text{dokładne}))^2$ scałkowane po x



$$r = \gamma = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$$

zafiksowane Δx ,
zmieniam tylko Δt

CN dla $r=5$: taki jak dla $r=1/2$:
cały błąd w
dyskretyzacji przestrzennej (Δx)

Równanie dyfuzji ciepła 3D ze źródłami

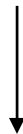
współczynnik przewodności zależny od położenia

$$\nabla \cdot (k \nabla T) + \dot{q} = \rho c \frac{\partial T}{\partial t}$$

źródło ciepła

gęstość i ciepło właściwe
zależne od położenia

Kilka własności równania



Równanie dyfuzji ciepła 3D ze źródłami

$$\nabla \cdot (k \nabla T) + \dot{q} = \rho c \frac{\partial T}{\partial t}$$

W jednym kawałku materiału ($k=const$), w stanie ustalonym

$$\nabla^2 T = -\frac{\dot{q}}{k} \longleftarrow \text{r. Poissona,}$$

stan ustalony w układzie jednorodnym w dwóch kierunkach y,z

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \cancel{\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}} + \cancel{\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}} = -\frac{\dot{q}}{k}$$

$$T = -\frac{\dot{q}}{2k} x^2 + Cx + D$$

C, D – z warunków brzegowych

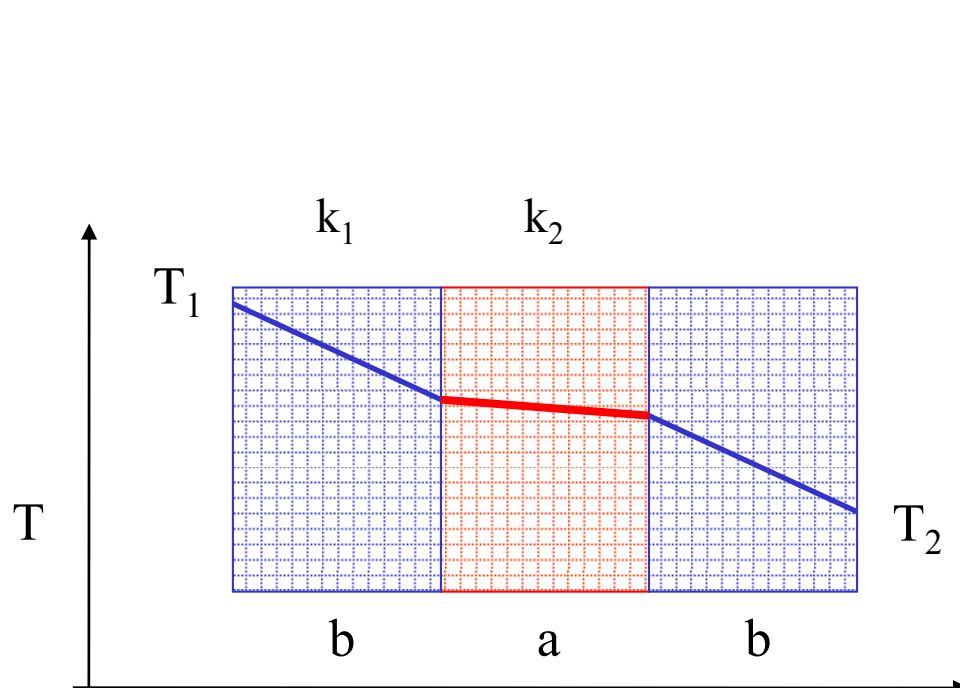
1D + brak źródeł ciepła = T liniowe od brzegu do brzegu

Warunki brzegowe na kontakcie 2 materiałów

$$\nabla \cdot (k \nabla T) + \dot{q} = \rho c \frac{\partial T}{\partial t}$$

w stanie ustalonym, gęstość i ciepło właściwe, nie mają znaczenia ważny tylko k .
 ρ oraz c wprowadzają bezwładność do problemów niestacjonarnych

kontakt dwóch materiałów



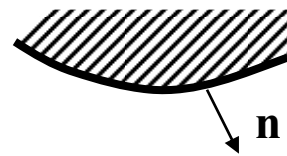
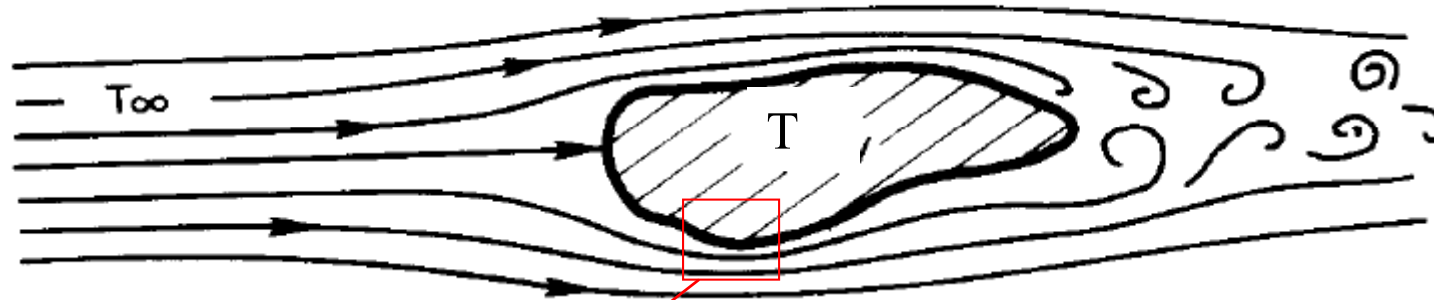
Ciągłość q :

$$k_1 \frac{dT}{dx} = k_2 \frac{dT}{dx}$$

Z lewej
Z prawej
mniejsze k = większy gradient T

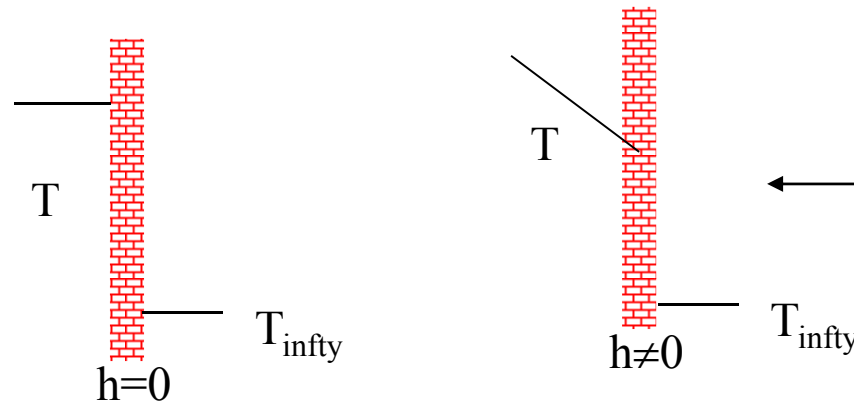
ogólnie: pochodne normalne
do powierzchni kontaktów

Konwekcyjne warunki brzegowe



$q_{\text{konwekcji}} = q_{\text{przewodzenia na powierzchni}}$

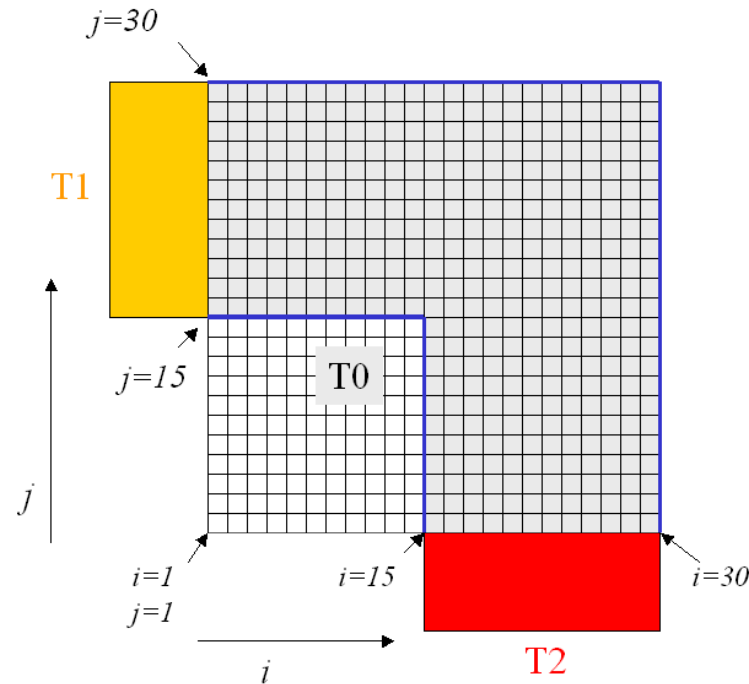
$$h(T - T_\infty) = -k \frac{\partial T}{\partial n}$$



latem może być na odwrót

Laboratorium

2D

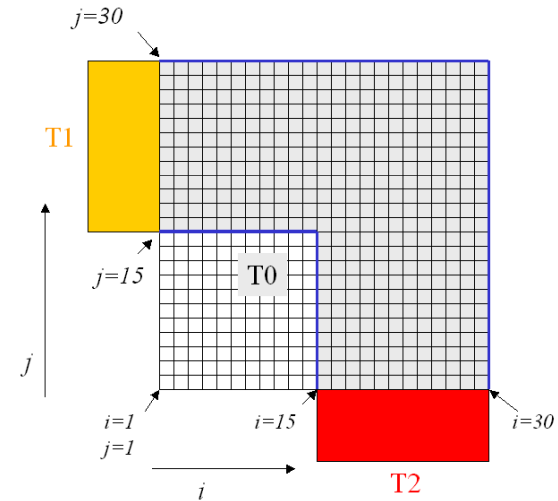


$$\nabla \cdot (k \nabla T) + \dot{q} = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} \quad \text{jeden materiał:} \quad \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\dot{q}}{\rho c} + \frac{k}{\rho c} \nabla^2 T$$

Cranck-Nicholson 2D: laplasjan rozpisany na n -ty i $n+1$ -szy krok czasowy

$$T_{ij}^{n+1} = T_{ij}^n + \Delta t \frac{\dot{q}_{ij}^n}{\rho c} + \frac{\Delta t \frac{k}{2\rho c \Delta^2}}{\gamma} (T_{i+1,j}^n + T_{i-1,j}^n - 2T_{ij}^n + T_{i,j+1}^n + T_{i,j-1}^n - 2T_{ij}^n + T_{i+1,j}^{n+1} + T_{i-1,j}^{n+1} - 2T_{ij}^{n+1} + T_{i,j+1}^{n+1} + T_{i,j-1}^{n+1} - 2T_{ij}^{n+1})$$

Laboratorium



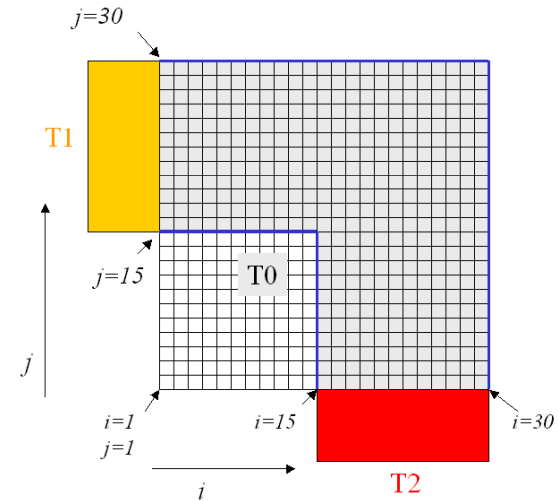
uporządkować stronami n i n+1:

$$\begin{aligned}
 & -\gamma T_{i+1,j}^{n+1} - \gamma T_{i-1,j}^{n+1} - \gamma T_{i,j+1}^{n+1} - \gamma T_{i,j-1}^{n+1} + (1 + 4\gamma)T_{ij}^{n+1} = \\
 \Delta t \frac{\dot{q}_{ij}^n}{\rho C} & + \gamma T_{i+1,j}^n + \gamma T_{i-1,j}^n + \gamma T_{i,j+1}^n + \gamma T_{i,j-1}^n + (1 - 4\gamma)T_{ij}^n
 \end{aligned}$$

żeby zapisać układ równań: trzeba przenieść punkty na siatce
 $l = i + 30(j-1)$

z numeru l odzyskać położenie: $j = 1 + (l-1)/30$ (tak zapisać w kodzie = dzielenie bez reszty)
 $i = l - 30(j-1)$.

Laboratorium



uporządkować stronami n i n+1:

$$-\gamma T_{i+1,j}^{n+1} - \gamma T_{i-1,j}^{n+1} - \gamma T_{i,j+1}^{n+1} - \gamma T_{i,j-1}^{n+1} + (1 + 4\gamma)T_{ij}^{n+1} =$$

$$\Delta t \frac{\dot{q}_{ij}^n}{\rho c} + \gamma T_{i+1,j}^n + \gamma T_{i-1,j}^n + \gamma T_{i,j+1}^n + \gamma T_{i,j-1}^n + (1 - 4\gamma)T_{ij}^n$$

żeby zapisać układ równań: trzeba przenieść punkty na siatce

$$l = i + 30(j-1)$$

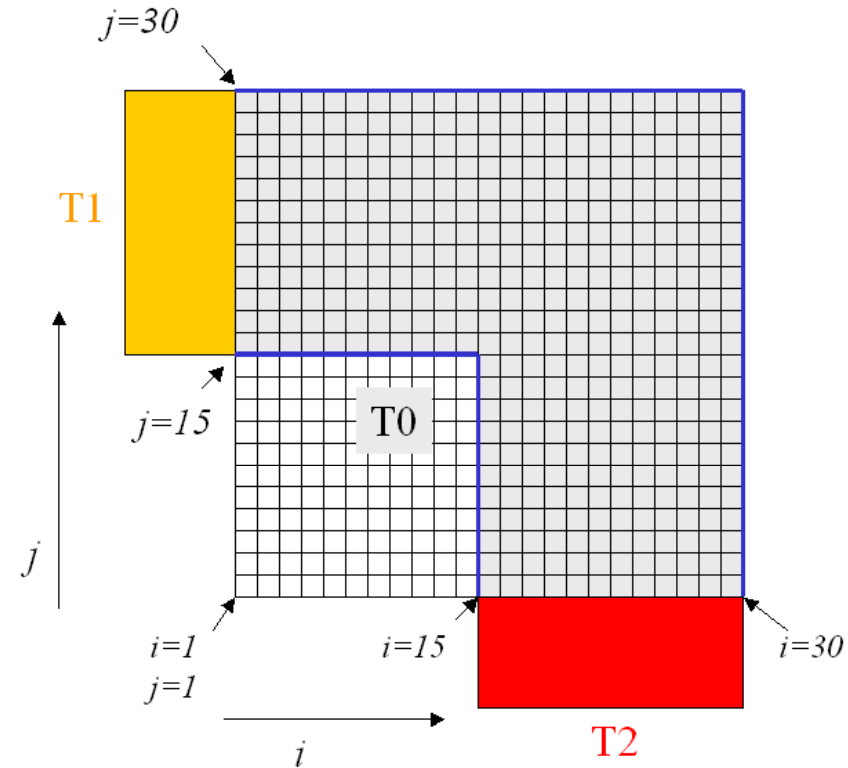
z numeru l odzyskać położenie: $j = 1 + (l-1)/30$ (tak zapisać w kodzie = dzielenie bez reszty)

$$i = l - 30(j-1).$$

$$-\gamma T_{l+1}^{n+1} - \gamma T_{l-1}^{n+1} - \gamma T_{l+30}^{n+1} - \gamma T_{l-30}^{n+1} + (1 + 4\gamma)T_l^{n+1} =$$

$$\Delta t \frac{\dot{q}_l^n}{\rho c} + \gamma T_{l+1}^n + \gamma T_{l-1}^n + \gamma T_{l+30}^n + \gamma T_{l-30}^n + (1 - 4\gamma)T_l^n$$

Laboratorium



$$\mathbf{AT}^{n+1} = \mathbf{BT}^n + \mathbf{c}$$

\mathbf{c} – informacja o źródłach oraz warunkach brzegowych

W punkcie ze środka pomieszczenia:

$$-\gamma T_{l+1}^{n+1} - \gamma T_{l-1}^{n+1} - \gamma T_{l+30}^{n+1} - \gamma T_{l-30}^{n+1} + (1 + 4\gamma)T_l^{n+1} =$$

$$\Delta t \frac{\dot{q}_l^n}{\rho c} + \gamma T_{l+1}^n + \gamma T_{l-1}^n + \gamma T_{l+30}^n + \gamma T_{l-30}^n + (1 - 4\gamma)T_l^n$$

Laboratorium

$$AT^{n+1} = BT^{n+c}$$

$$-\gamma T_{l+1}^{n+1} - \gamma T_{l-1}^{n+1} - \gamma T_{l+30}^{n+1} - \gamma T_{l-30}^{n+1} + (1 + 4\gamma)T_l^{n+1} =$$

$$\Delta t \frac{\dot{q}_l^n}{\rho c} + \gamma T_{l+1}^n + \gamma T_{l-1}^n + \gamma T_{l+30}^n + \gamma T_{l-30}^n + (1 - 4\gamma)T_l^n$$

dla pary $l=(i,j)$, z wewnątrz pomieszczenia

l -ta kolumna (element diagonalny)

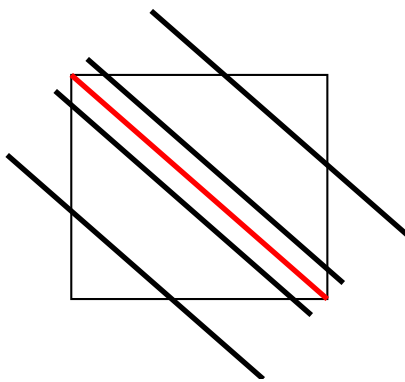
wiersz l macierzy A : $(0, 0, \dots, -\gamma, 0, 0, \dots, -\gamma, (1+4\gamma), -\gamma, 0, \dots, -\gamma, \dots, 0)$

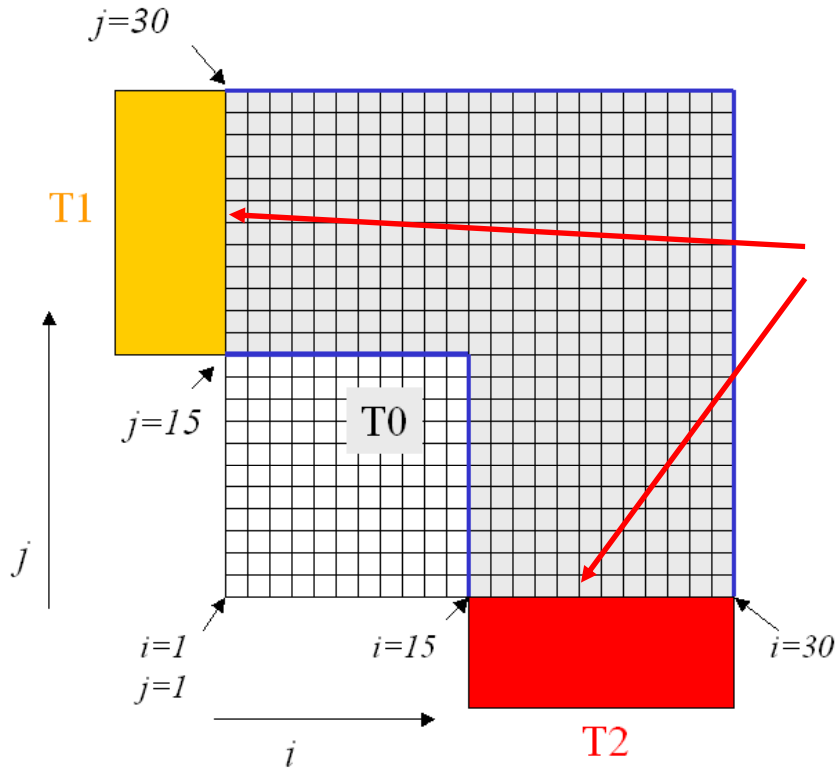
30 kolumn
przed diagonalą

30 kolumn
za diagonalą

wiersz l macierzy B : $(0, 0, \dots, \gamma, 0, 0, \dots, \gamma, (1-4\gamma), \gamma, 0, \dots, \gamma, \dots, 0)$

$$c_l = 0$$





na ścianach wewnętrznych
budynku zadajemy $T=T_{bc}$

(podobnie dla „zmarnowanej” ćwiartki
poza budynkiem)

$$\mathbf{A}T^{n+1} = \mathbf{B}T^n + \mathbf{c}$$

$$T_l = T_{bc}$$

w l tym wierszu \mathbf{A} dajemy jedynkę na diagonalu, poza tym zera
cały l -ty wiersz \mathbf{B} dajemy zero, a $b_l = T_{bc}$

Na krawędzi budynku konwekcyjne wb.

$$h(T - T_o) = -k \frac{\partial T}{\partial n}$$

prawa krawędź:

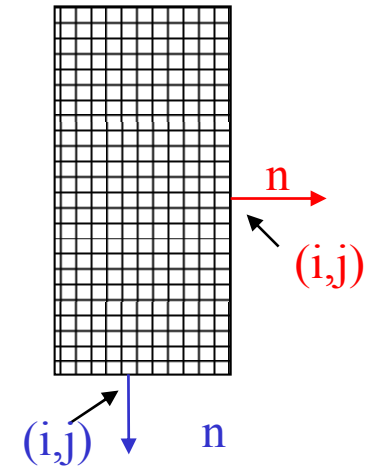
$$h(T_{ij} - T_o) = -k \frac{T_{ij} - T_{i-1,j}}{\Delta x}$$

$$\left(h + \frac{k}{\Delta x}\right) T_{ij} - \frac{k}{\Delta x} T_{i-1,j} = hT_o$$

$$\left(h + \frac{k}{\Delta x}\right) T_l - \frac{k}{\Delta x} T_{l-1} = hT_o$$

w l -tym wierszu \mathbf{A} tylko diagonalą i poddiagonalą

(na lewej krawędzi podobnie)



$$l = i + 30(j - 1)$$

dolna krawędź:

$$h(T_{ij} - T_o) = -k \frac{T_{ij} - T_{i,j+1}}{\Delta y}$$

$$\frac{\partial T}{\partial n} = -\frac{\partial T}{\partial y}$$

$$\left(h + \frac{k}{\Delta x}\right) T_{ij} - \frac{k}{\Delta x} T_{i,j+1} = hT_o$$

$$\left(h + \frac{k}{\Delta x}\right) T_l - \frac{k}{\Delta x} T_{l+30} = hT_o$$

w l -tym wierszu \mathbf{A} diagonalą i element 30 kolumn na prawo od niej

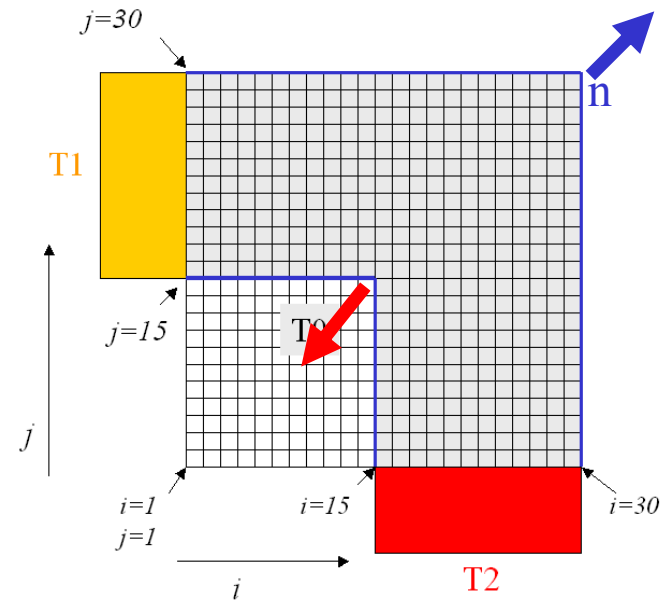
konwekcyjny warunek brzegowy na narożnikach:

$$h(T - T_o) = -k \frac{\partial T}{\partial n}$$

$$h(T_{ij} - T_o) = -k \frac{T_{ij} - T_{i-1,j-1}}{\sqrt{2}\Delta x}$$

$$\left(h + \frac{k}{\sqrt{2}\Delta x}\right)T_l - \frac{k}{\sqrt{2}\Delta x}T_{l-31} = hT_o$$

$$\left(h + \frac{k}{\sqrt{2}\Delta x}\right)T_l - \frac{k}{\sqrt{2}\Delta x}T_{l+31} = hT_o$$

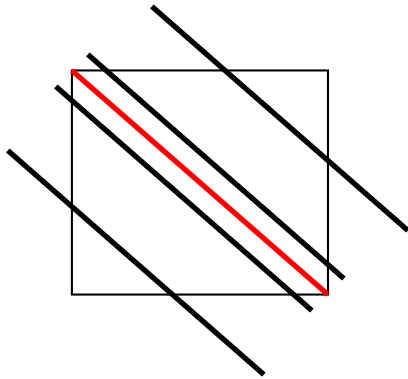


$$\mathbf{AT}^{n+1} = \mathbf{BT}^n + \mathbf{c}$$

→ macierz 900x900

A: na ogół pięcioprzekątniowa, pasmowa + / - 31 poddiagonali (ze względu na 2 kanty)

B: pięcioprzekątniowa, zerowe wiersze dla brzegowych l , tam niezerowa składowa c



$$\mathbf{AT}^{n+1} = \mathbf{BT}^n + \mathbf{c}$$

w każdym kroku musimy taki układ równań rozwiązać.

Macierze \mathbf{A} , \mathbf{B} i wektor \mathbf{c} są niezmiennie, tylko \mathbf{T} się zmienia

można raz odwrócić macierz \mathbf{A} – ale \mathbf{A}^{-1} jest gęsta : więcej do pamiętania i więcej do mnożenia
dla realnych rachunków: zapamiętanie \mathbf{A}^{-1} jest wykluczone

najlepiej metodą iteracyjną (dla niej można wykorzystać pasmowość macierzy)

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^{n+1} ; \mathbf{b} = \mathbf{BT}^n + \mathbf{c} \longrightarrow \mathbf{AT} = \mathbf{b}.$$

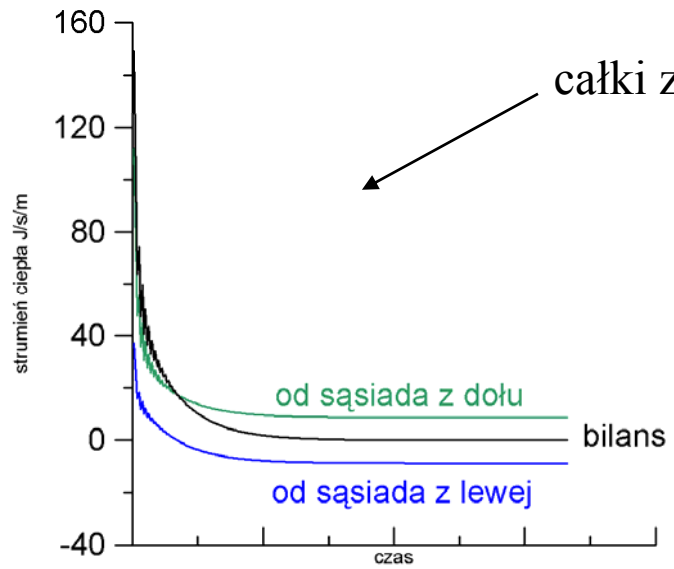
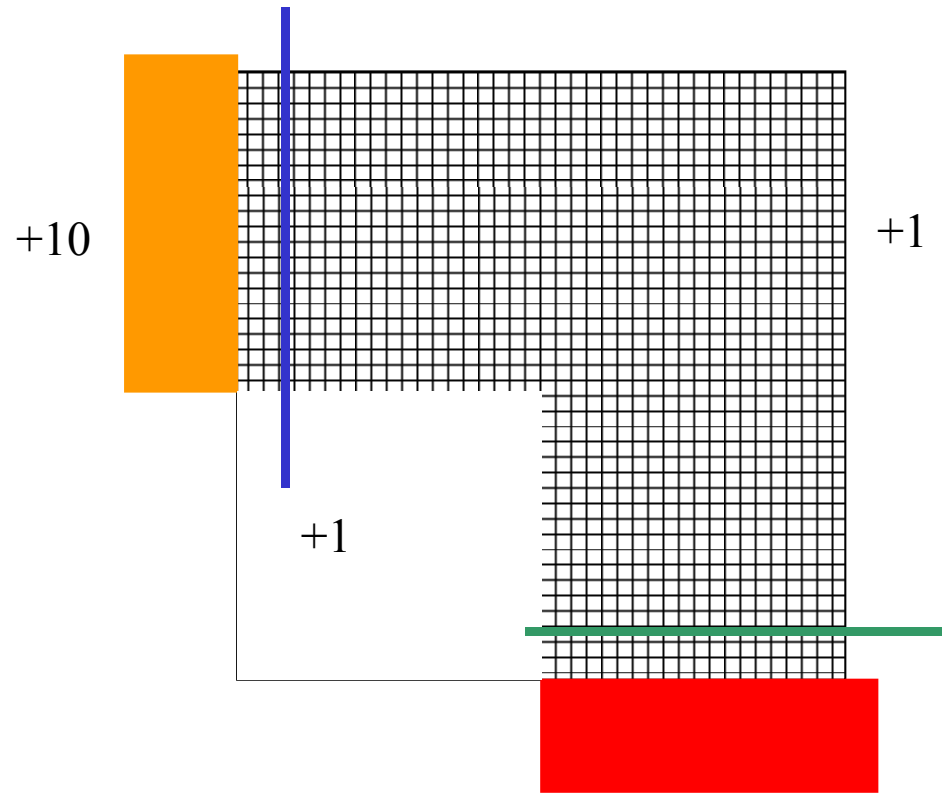
$$\mathbf{A} = \underbrace{\mathbf{D}}_{\text{diagonalna}} + \underbrace{\mathbf{C}}_{\text{reszta}} \quad (\text{wybór zgodnie z metodą Jakobiego})$$

$$\text{iteracja: } \mathbf{T}^{n+1} := \mathbf{D}^{-1}\mathbf{b} - \mathbf{D}^{-1}\mathbf{CT}^n$$

1-szy rachunek
doskonale izolowane
ściany zewnętrzne:

w chwili początkowej
pomieszczenie w temp +1

Wstawić raz.gif



(musi wyjść na zero)
pomarańczowy najpierw oddaje ciepło
potem odbiera

2 rachunek

ściany zewnętrzne nie są idealnymi izolatorami:

dwa.gif

3. rachunek
okna $h=0.5$
ściany $h=0.01$

trzy.gif

4 rachunek
grzejnik $q=10$

cztery.gif

5 rachunek: 3 grzejniki z otwieraniem okien
i wyłączeniem ogrzewania

piec.gif

siedem.gif : $T_1=T_2=10$, $T_0=30$

leap – frog (jawny, dwustopniowy) całkiem nieźle sprawdzał się dla równania adwekcji (równie dobrze co CN) czy zadziała dla równania dyfuzji?

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \longrightarrow \frac{u(x, t + \Delta t) - u(x, -\Delta t)}{2 \Delta t} = D \frac{u(x + \Delta x, t) + u(x - \Delta x, t) - 2u(x, t)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) + O(\Delta t^2)$$

Dokładność jak CN

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + \frac{2D\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n)$$

2r

analiza von Neumanna

$$A_k^{n+1} = A_k^{n-1} + 4r A_k^n (\cos(k\Delta x) - 1)$$

szukamy rozwiązań postaci:

$$A_k^{n+1} = \gamma_k^{n+1} A_k^0$$

$$\gamma_k^2 - 4r\gamma_k (\cos(k\Delta x) - 1) - 1 = 0$$

leap – frog analiza vN cd

$$\gamma_k^2 - 4r\gamma_k (\cos(k\Delta x) - 1) - 1 = 0$$

$$\gamma_k^2 + 4r\gamma_k \mu_k - 1 = 0$$

$$\mu_k = (1 - \cos(k\Delta x)) \geq 0$$

$$\gamma_k = -2r\mu_k \pm \sqrt{1 + (2r\mu_k)^2}$$

załóżmy, że r małe rozwijamy γ w szereg Taylora :

$$\gamma_k(+)= 1 - 2r\mu_k + O((r\mu_k)^2)$$

$$\gamma_k(-)= -(1 + 2r\mu_k) + O((r\mu_k)^2)$$

rozwiązanie ogólne:

$$A_k^n = c_k^+ [1 - 2r\mu_k + O(r^2\mu_k^2)]^n + c_k^- (-1)^n [1 + 2r\mu_k + O(r^2\mu_k^2)]^n$$

właściwe równania dyfuzji

pasożytnicze:

rośnie co do modułu z n

znak oscyluje z iteracji na iteracje

*rozwiązanie pasożytnicze pojawi się i doprowadzi do eksplozji
leapfrog nie jest dobrym schematem dla dyfuzji*

leapfrog:

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + \frac{2D\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n)$$

2r

dla $r=1/2$

widzimy, że schemat jest symetryczny względem czasu
licząc równanie wstecz dostaniemy ten sam przepis

...

ale równanie dyfuzji odwracalne względem czasu NIE jest
w przeciwieństwie do równania adwekcji

odwrotny problem przewodnictwa ciepłego

problem prosty : zadajemy warunki brzegowe oraz początkowe pytanie: co stanie się w przyszłości

problem odwrotny: znamy obecny rozkład temperatury jaki był rozkład w przeszłości? Jakie były warunki brzegowe? Jaki był warunek początkowy.

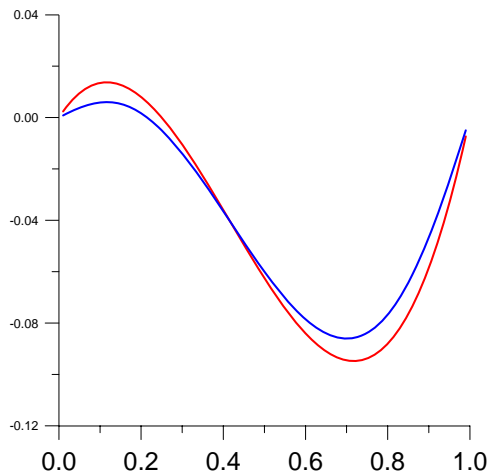
[typowy problem pomiarów, nie tylko zależnych od czasu]

warunki brzegowe $u(x=0,t)=u(x=1,t)=0$

problem:

dane $u(x,t=T)$

szukane: $u(x,t=0)$



$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

O czasie i problemie odwrotnym ...

$N=100$, $dx=1.0/(N)$, $D=1$
 $dt=dx**2/d/2/10$ (malutki)

CN

problem:

$T(x,t) = 1$ wewnątrz

$T(x,t) = 0$ na zewnątrz

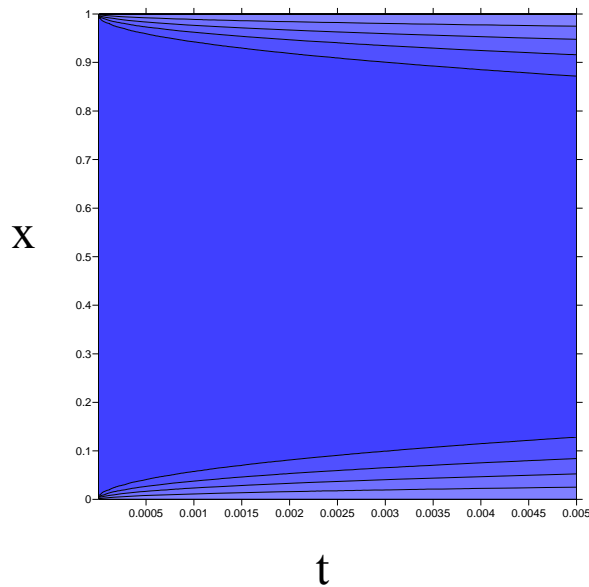
chcemy

wrócić do

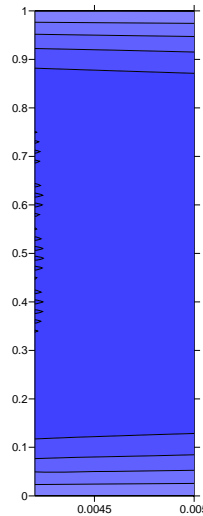
warunku początkowego

ustawiamy $dt:=-dt$

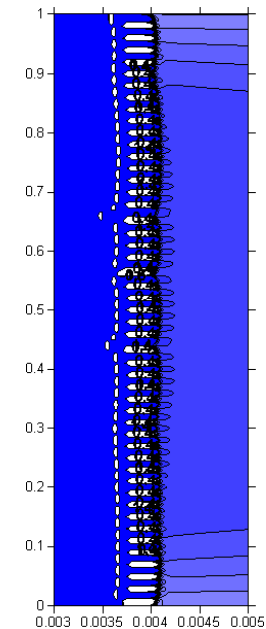
nieco dłużej = eksplozja



liczymy do przodu



potem chcemy wrócić



i bum!

problem odwrotny do równania dyfuzji:

wszystkie metody różnic skończonych okazują się niestabilne dla ujemnego kroku czasowego [$r = D\Delta t / \Delta x^2 < 0$]

wyprowadzony wcześniej z analizy von Neumanna

warunek: stabilności bezwzględnej: ($\theta=1/2$ odpowiada CN)

$$-1 \leq 1 - \frac{4r \sin^2(k\Delta x/2)}{1 + 4r\theta \sin^2(k\Delta x/2)} \leq 1$$

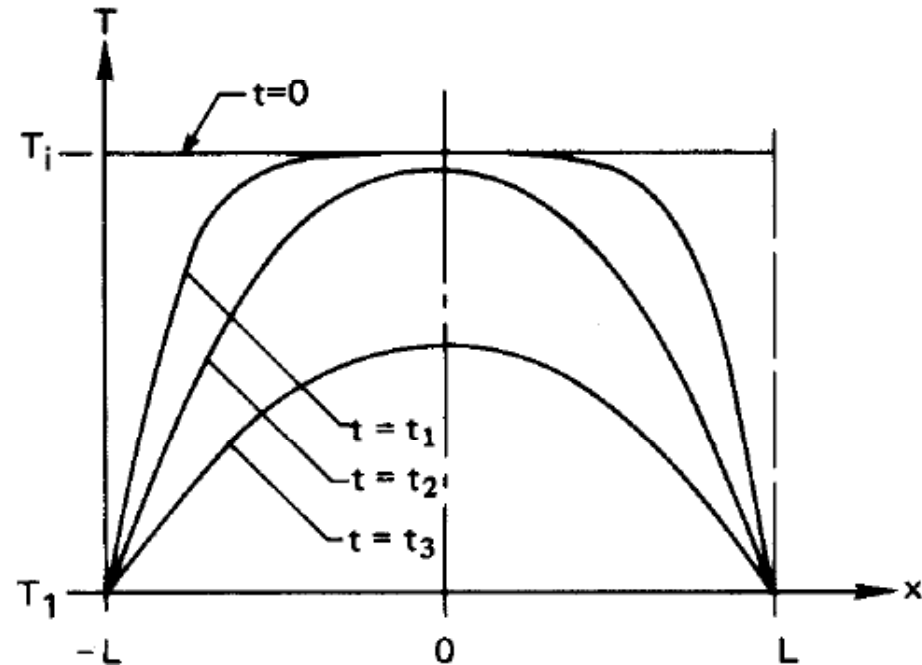
widzimy, że dla $\Delta t < 0$ [$r < 0$] warunek prawy nie jest spełniony

Nie zawsze problem z cofaniem się wstecz w czasie jest trudny:
dla równania adwekcji– jest równie łatwy jak początkowy
(zmiana dt równoważna zmianie kierunku prędkości unoszenia v)

problem z dyfuzją:

niezależnie od startu
rozkład T po pewnym czasie
będzie miał kształt $\sin(\rho x)$
*Układ zapomina o warunku
początkowym*

problem obiektywnie trudny



$$T(x, t) = \sum_n a_n \exp(-\alpha(n\pi)^2 t) \sin(n\pi x)$$

odwracamy znak czasu: gdy tylko w wyniku niedokładności
pojawi się składowa o wysokim n – natychmiast eksploduje

Nie zawsze problem odwrotny jest trudny:

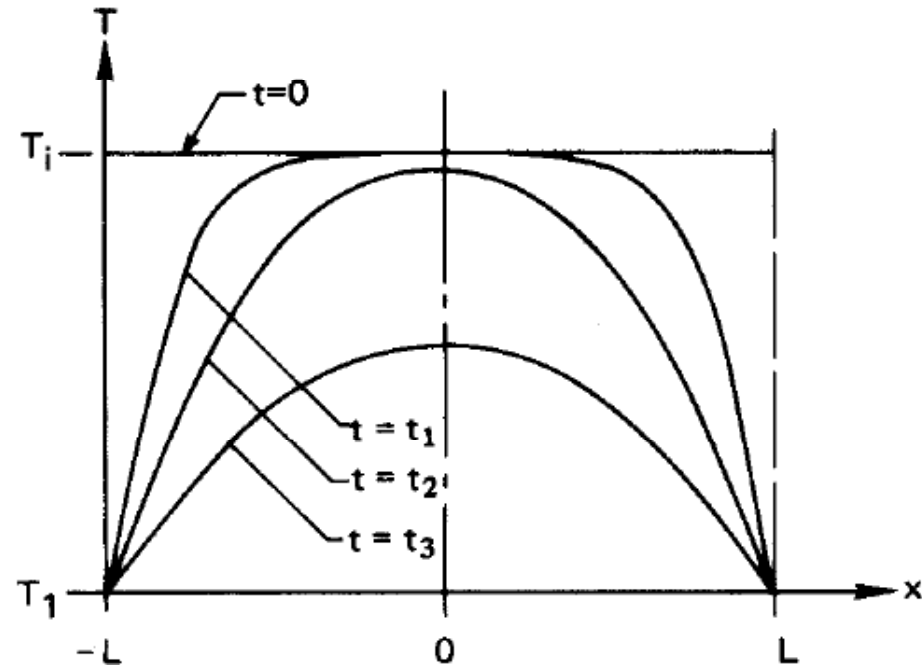
dla adwekcji – jest równie łatwy jak początkowy

(zmiana dt równoważna zmianie kierunku prędkości unoszenia v)

problem z dyfuzją:

niezależnie od startu
rozkład T po pewnym czasie
będzie miał kształt $\sin(\rho x)$

problem obiektywnie trudny



możliwe rozwiązanie:

szukać warunków początkowych, dla których
jesteśmy najbliższe danych wejściowych $[T(t)]$

rozwiązywać równanie dla $dt > 0$ i porównywać wynik numeryczny
dla $t=T$ z zadany rozkładem – co wymaga znacznie większego
nakładu obliczeń niż w problem podstawowy

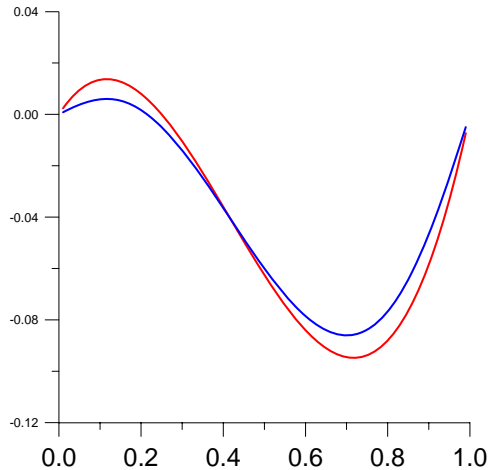
odwrotny problem przewodnictwa cieplnego

opiszemy rozwiązanie warunków brzegowych $u(x=0,t)=u(x=1,t)=0$
problem:

dane $u(x,t=T)$

szukane: $u(x,t=0)$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$



← policzone schematem CN dla $N=100$

$$dx=1.0/(N)$$

$$D=1$$

$$dt=dx**2/D/2$$

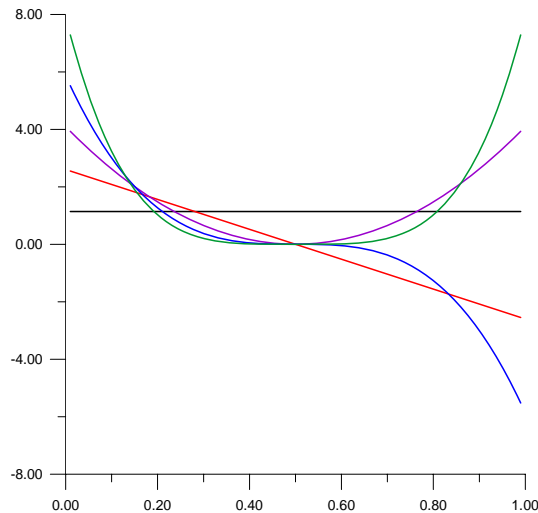
100 kroków czasowych

Jeden z możliwych algorytmów – wykorzystuje liniowość równania

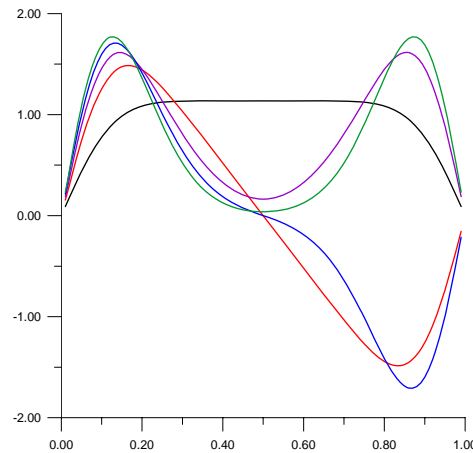
Jeden z możliwych algorytmów – wykorzystuje liniowość równania

- 1) wybrać bazę niezależnych liniowo funkcji $g(x)$ określonych na przedziale $(0,1)$

np. $g_i(x) = (x-1/2)^i$



- 2) dla każdego warunku początkowego rozwiązać równanie przewodnictwa cieplnego do chwili T



dostaniemy bazę funkcji $h_i(x)$
normalizujemy je tak aby $(h_i, h_j) = 1$
zgodnie z tym warunkiem normalizujemy również g_i

3) równanie jest liniowe ewolucja czasowa
 $\mathbf{g}_i \quad \rightarrow \quad \mathbf{h}_i$

$$u(x, t = 0) = \sum d_i g_i(x) \qquad \frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$u(x, t = T) = \sum d_i h_i(x)$$

wyliczymy przybliżony warunek początkowy [wsp. d]
jeśli rozłożymy rozwiązanie w chwili T w bazie funkcji h_i

rozłożyć: np.: *metodą najmniejszych kwadratów*

$$\int_0^1 dx \left(u(x, t = T) - \sum d_i h_i(x) \right)^2 = \min$$

$$\int_0^1 dx \left(u(x, t = T) - \sum d_i h_i(x) \right)^2 = \min$$

$$\frac{\partial}{\partial d_k} \int_0^1 dx \left(u(x, t = T) - \sum d_i h_i(x) \right)^2 = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial d_k} \int_0^1 dx \left(u^2(x, T) + \sum_i \sum_j d_j d_i h_i(x) h_j(x) - \sum_i 2u(x, T) d_i h_i(x) \right) = 0$$

$$\int_0^1 dx \left(2 \sum_i d_i h_i(x) h_k(x) - 2u(x, T) h_k(x) \right) = 0$$

$$\downarrow$$

$$\mathbf{Ad} = \mathbf{p}$$

z

$$A_{ki} = \int_0^1 h_i(x) h_k(x) dx$$

$$p_k = \int_0^1 h_k(x) u(x, T) dx$$

$$\int_0^1 dx \left(u(x, t = T) - \sum d_i h_i(x) \right)^2 = \min$$

$$\frac{\partial}{\partial d_k} \int_0^1 dx \left(u(x, t = T) - \sum d_i h_i(x) \right)^2 = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial d_k} \int_0^1 dx \left(u^2(x, T) + \sum_i \sum_j d_j d_i h_i(x) h_j(x) - \sum_i 2u(x, T) d_i h_i(x) \right) = 0$$

$$\int_0^1 dx \left(2 \sum_i d_i h_i(x) h_k(x) - 2u(x, T) h_k(x) \right) = 0$$



$$\mathbf{A} \mathbf{d} = \mathbf{p}$$

$$A_{ki} = \int_0^1 h_i(x) h_k(x) dx$$

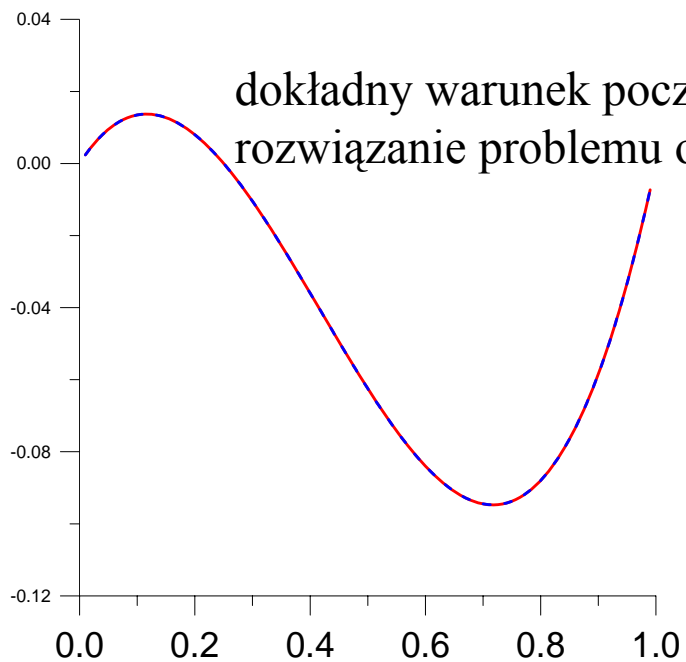
niestety A bywa źle uwarunkowana

bo h_i mają tendencję do „upodabniania się”
nawet jeśli g bardzo różne

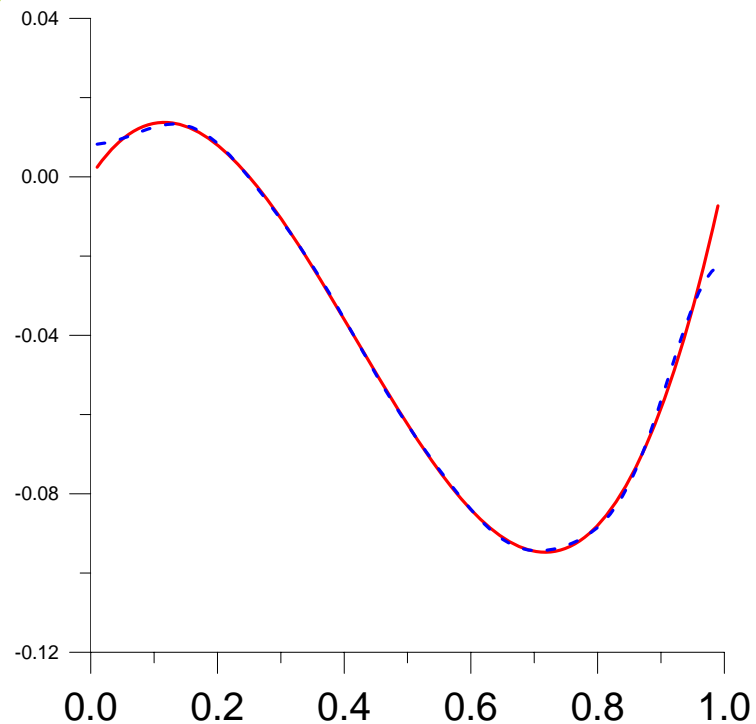
$$p_k = \int_0^1 h_k(x) u(x, T) dx$$

niestety = raczej reguła dla problemów odwrotnych

Wyniki:



dokładny wynik:
warunek początkowy był $x(x-1)(x-1/4)$



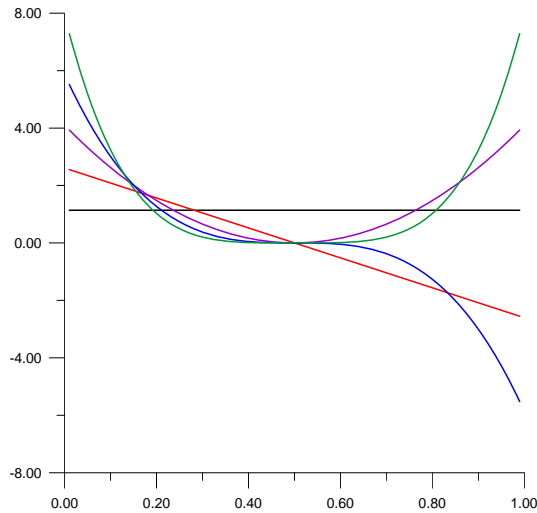
baza

$$g_i(x) = \cos(i\pi x)$$

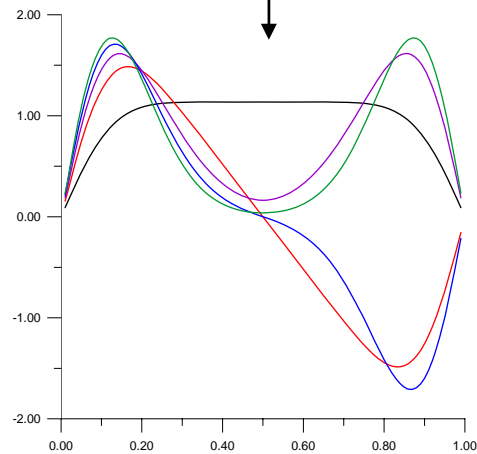
dla $i=0,1,\dots,10$

„upodabnianie się funkcji bazowych”- nie jesteśmy bez wpływu na uwarunkowanie problemu
– możemy wybrać bazę tak, aby efekt zminimalizować

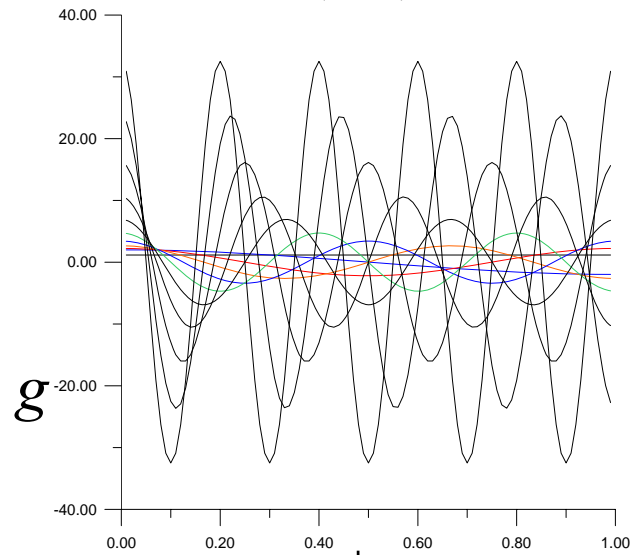
wielomiany



↓
t

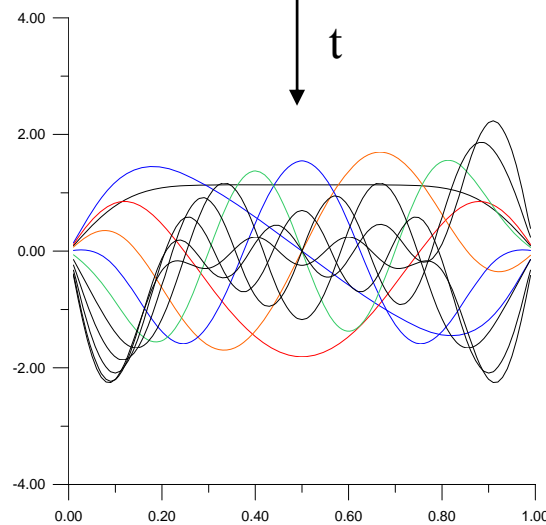


$\cos(n\pi x)$

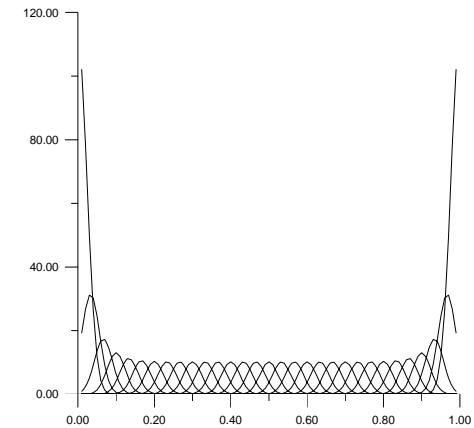


h

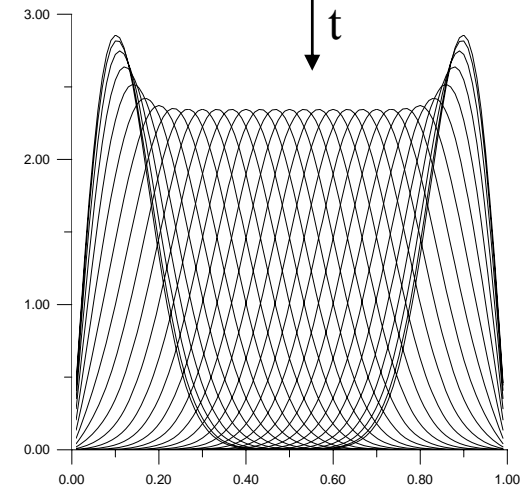
↓
t



gaussowska wielocentrowa



↓
t



Równanie adwekcji – dyfuzji (schematy jawne)

$$u_t = Du_{xx} + vu_x$$

występuje np. w mechanice płynów i pyłów
w transporcie ciepła itd. $D \geq 0$

Euler: przedni czasowy, centralne przestrzenne:

$$U_j^{n+1} = U_j^n + r (U_{j-1}^n + U_{j+1}^n - 2U_j^n) + \frac{\alpha}{2} (U_{j+1}^n - U_{j-1}^n)$$

$$r = \frac{Ddt}{dx^2} \qquad \alpha = \frac{vdt}{dx}$$

schemat: absolutnie stabilny gdy czysta dyfuzja $v=0$ oraz $r \leq 1/2$

: absolutnie niestabilny gdy czysta adwekcji $D=0$

: dla adwekcji widzieliśmy, że obecność niezerowego D stabilizuje schemat

posortujmy wyrazy w powyższym równaniu względem indeksu siatki przestrzennej:

$$U_j^{n+1} = \left(r - \frac{\alpha}{2}\right)U_{j-1}^n + (1 - 2r)U_j^n + \left(r + \frac{\alpha}{2}\right)U_{j+1}^n$$

równanie AD, schemat Eulera

$$U_j^{n+1} = \left(r - \frac{\alpha}{2}\right)U_{j-1}^n + (1 - 2r)U_j^n + \left(r + \frac{\alpha}{2}\right)U_{j+1}^n$$

zgodnie z zasadą max: schemat będzie stabilny jeśli

równanie AD, schemat Eulera

$$U_j^{n+1} = \left(r - \frac{\alpha}{2}\right)U_{j-1}^n + (1 - 2r)U_j^n + \left(r + \frac{\alpha}{2}\right)U_{j+1}^n$$

zgodnie z zasadą max: schemat będzie stabilny jeśli $\frac{1}{2} \geq r \geq |\alpha|/2$

$$r = \frac{Ddt}{dx^2} \quad \alpha = \frac{vdt}{dx}$$


Aby schemat był stabilny: który efekt
ma być dominujący: adwekcja czy dyfuzja ??

równanie AD, schemat Eulera

$$U_j^{n+1} = \left(r - \frac{\alpha}{2}\right)U_{j-1}^n + (1 - 2r)U_j^n + \left(r + \frac{\alpha}{2}\right)U_{j+1}^n$$

zgodnie z zasadą max: schemat będzie stabilny jeśli $\frac{1}{2} \geq r \geq |\alpha|/2$ (przewaga dyfuzji)

$$r = \frac{D \Delta t}{\Delta x^2} \quad \alpha = \frac{v \Delta t}{\Delta x}$$


$$|P_e| \equiv \frac{|v| \Delta x}{2D} \leq 1$$

liczba Peclet'a (komórkowa liczba Reynoldsa)

podobny wniosek otrzymamy dla normy euklidesowej stosując analizę von Neumanna

- 1) zauważmy – krok czasowy nie ma wpływu na stabilność
jeśli prędkość unoszenia duża w porównaniu ze stałą dyfuzji:
siatka przestrzenna będzie musiała być bardzo drobna.
- 2) jeśli $D=0$ (czysta adwekcja) – schemat niestabilny

Dla równania adwekcji lepiej sprawdzał się schemat *upwind* : znaczy dla $\alpha > 0$

$$u_t = Du_{xx} + vu_x$$

$$U_j^{n+1} = U_j^n + r(U_{j-1}^n + U_{j+1}^n - 2U_j^n) + \alpha(U_{j+1}^n - U_j^n)$$

[uwaga!, teraz $v > 0$
wieje w prawo(inny znak v)]

$$U_j^{n+1} = rU_{j-1}^n + (1 - 2r - \alpha)U_j^n + (r + \alpha)U_{j+1}^n$$

zasada max:

$$r = \frac{Ddt}{dx^2} \quad \alpha = \frac{vdt}{dx}$$

Dla równania adwekcji lepiej sprawdzał się **schemat upwind**

$$u_t = Du_{xx} + vu_x$$

$$U_j^{n+1} = U_j^n + r (U_{j-1}^n + U_{j+1}^n - 2U_j^n) + \alpha (U_{j+1}^n - U_j^n)$$

[uwaga!, teraz $v > 0$
więcej w prawo (inny znak v)]

$$U_j^{n+1} = rU_{j-1}^n + (1 - 2r - \alpha)U_j^n + (r + \alpha)U_{j+1}^n$$

zasada max: $r \geq 0$ (jest), $r + \alpha \geq 0$ (jest bo $v > 0$) oraz $2r + \alpha \leq 1$

$$r = \frac{Ddt}{dx^2} \quad \alpha = \frac{vdt}{dx}$$

warunek znacznie mniej restrykcyjny niż dla Eulera
bo:
stabilność można zapewnić małym krokiem czasowym
Dla dowolnej siatki !

**Czy odnajdujemy znane warunki stabilności dla
czystej dyfuzji i czystej adwekcji ?**

Dla równania adwekcji lepiej sprawdzał się **schemat upwind**

$$u_t = Du_{xx} + vu_x$$

$$U_j^{n+1} = U_j^n + r(U_{j-1}^n + U_{j+1}^n - 2U_j^n) + \alpha(U_{j+1}^n - U_j^n)$$

[uwaga!, teraz $v > 0$
więcej w prawo (inny znak v)]

$$U_j^{n+1} = rU_{j-1}^n + (1 - 2r - \alpha)U_j^n + (r + \alpha)U_{j+1}^n$$

zasada max: $r \geq 0$ (jest), $r + \alpha \geq 0$ (jest bo $v > 0$) oraz $2r + \alpha \leq 1$

$$r = \frac{Ddt}{dx^2} \quad \alpha = \frac{vdt}{dx}$$

warunek znacznie mniej restrykcyjny niż dla Eulera
bo:
stabilność można zapewnić małym krokiem czasowym
Dla dowolnej siatki !

odnajdujemy znane warunki stabilności dla
czystej dyfuzji i czystej adwekcji

problemy z przewagą adwekcji i v zmieniającym znak (α zależne od położenia)

$v > 0$

$$U_j^{n+1} = U_j^n + r (U_{j-1}^n + U_{j+1}^n - 2U_j^n) + \alpha (U_{j+1}^n - U_j^n)$$

$v < 0$

$$U_j^{n+1} = U_j^n + r (U_{j-1}^n + U_{j+1}^n - 2U_j^n) + \alpha (U_j^n - U_{j-1}^n)$$

co, można zapisać jednym wzorem: (z uniknięciem instrukcji warunkowej)

problemy z przewagą adwekcji i v zmieniającym znak (α zależne od położenia)

$v > 0$

$$U_j^{n+1} = U_j^n + r (U_{j-1}^n + U_{j+1}^n - 2U_j^n) + \alpha (U_{j+1}^n - U_j^n)$$

$v < 0$

$$U_j^{n+1} = U_j^n + r (U_{j-1}^n + U_{j+1}^n - 2U_j^n) + \alpha (U_j^n - U_{j-1}^n)$$

co, można zapisać jednym wzorem:

$$U_j^{n+1} = U_j^n + \frac{\beta}{2} (U_{j-1}^n - 2U_j^n + U_{j+1}^n) + \frac{\alpha}{2} (U_{j+1}^n - U_{j-1}^n)$$

z $\beta = 2r + |\alpha| \longrightarrow$ tzw. schemat z różniczkowaniem pod wiatr

uwaga: w schemacie upwind: czynnik dyfuzji wzrasta o extra $|\alpha|/2$
(pojawia się dyfuzja numeryczna) (w centralnym ilorazie sztucznej dyfuzji nie ma i to jak widzieliśmy powód niestabilności schematu dla czystej adwekcji)

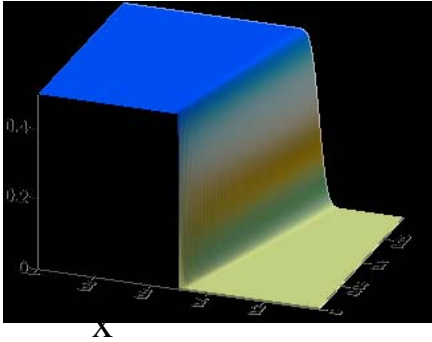
centralny (bez numerycznej dyfuzji) :

$$U_j^{n+1} = U_j^n + r (U_{j-1}^n + U_{j+1}^n - 2U_j^n) + \frac{\alpha}{2} (U_{j+1}^n - U_{j-1}^n)$$

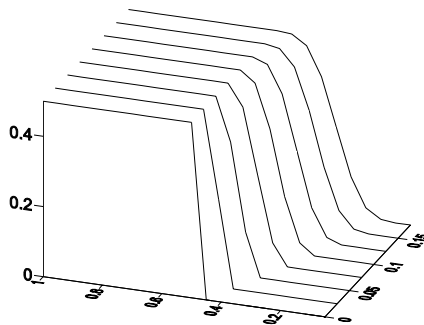
$$u_t = Du_{xx} + vu_x \quad \text{Przykład: problem z przewagą adwekcji}$$

$$D=0.01, v=1$$

warunek początkowy: $u=1/2$ dla $x<1/2$



← rozwiązanie dokładne
dyfuzja: widoczna w lekkim zaokrągleniu
nieciągłości dla $t>0$

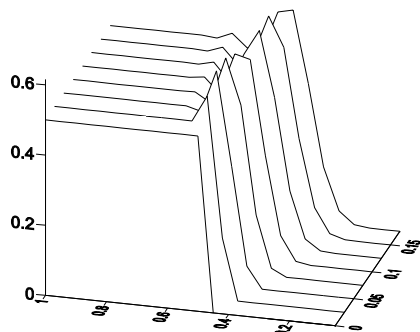


← upwind
 $dt=0.025, dx=0.05$
 $\alpha=0.5, r=0.1$

$$\beta = 2r + |\alpha|$$

$$r = \frac{Ddt}{dx^2} \quad \alpha = \frac{vdt}{dx}$$

widać znacznie przesadzoną dyfuzję



← iloraz centralny (bezwzględnie niestabilny)
widać generację niestabilności
(antydyfuzja = zaostanie kątów)

aby zniwelować dodatkową (numeryczną dyfuzję) dla schematu upwind
- mniejszy krok czasowy czy mniejszy krok przestrzenny ?

Nieliniowe równania paraboliczne

Dla równań liniowych (np. dyfuzji, dyfuzji+adwekcji) schematy jawne sprowadzają się do wykonania wielu podstawień w każdym kroku
niejawne prowadzą do układu równań liniowych.

Zastanowimy się jak rozwiązać równanie nieliniowe.

$$u_t = f(x, t, u, u_x, u_{xx})$$

schemat niejawny, jednopoziomowy, centralne przestrzenne przedni czasowy, ważona prawa strona (dla $\theta=1/2$ - CN),

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} = \theta f(j\Delta x, (n+1)\Delta t, U_j^{n+1}, \frac{U_{j+1}^{n+1} - U_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x}, \frac{U_{j+1}^{n+1} + U_{j-1}^{n+1} - 2U_j^{n+1}}{\Delta x^2}) + (1-\theta) f(j\Delta x, n\Delta t, U_j^n, \frac{U_{j+1}^n - U_{j-1}^n}{2\Delta x}, \frac{U_{j+1}^n + U_{j-1}^n - 2U_j^n}{\Delta x^2})$$

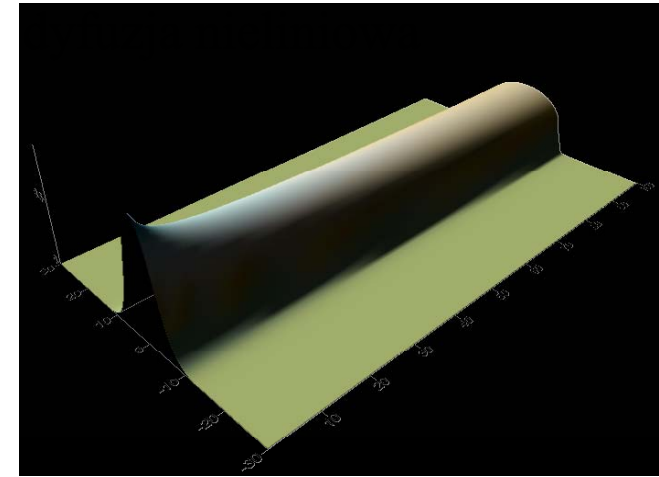
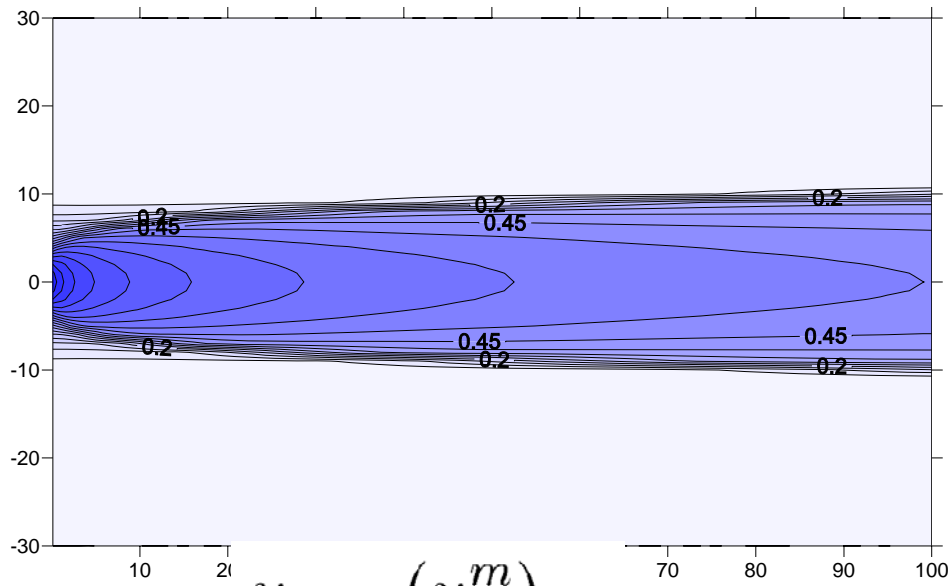
weźmy *nieliniowe równanie dyfuzji*

$$u_t = (u^m)_{xx}$$

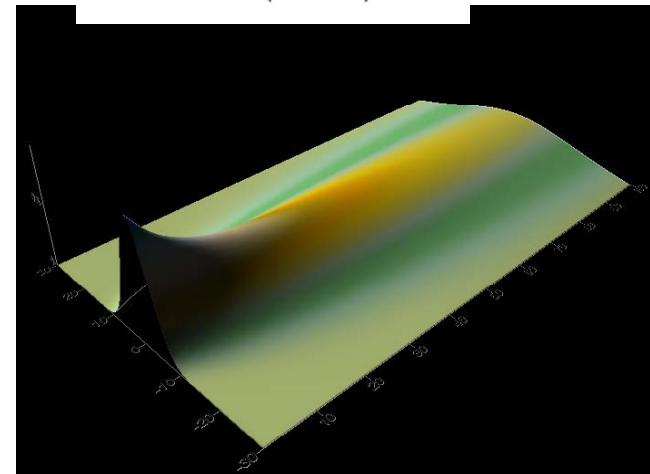
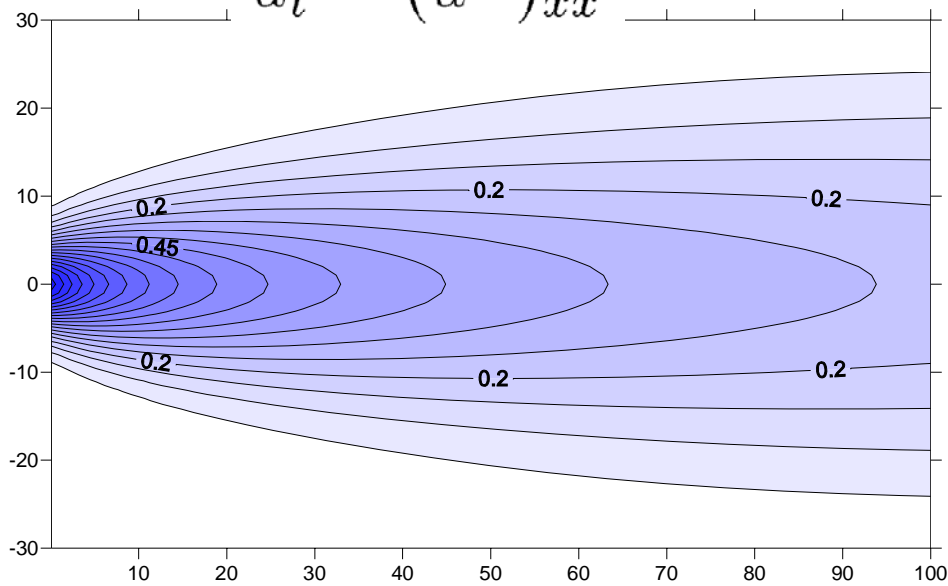
na $m=1$ się już znamy

$u(x,t=0)=\exp(-x^2/25)$, pudło (-30,30), $\Delta x=1$, $\Delta t=.1$

m=5



m=1

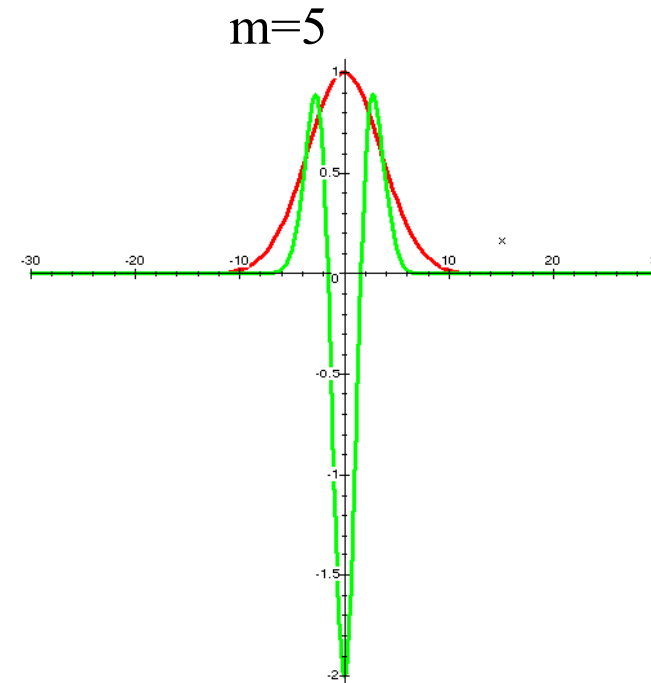
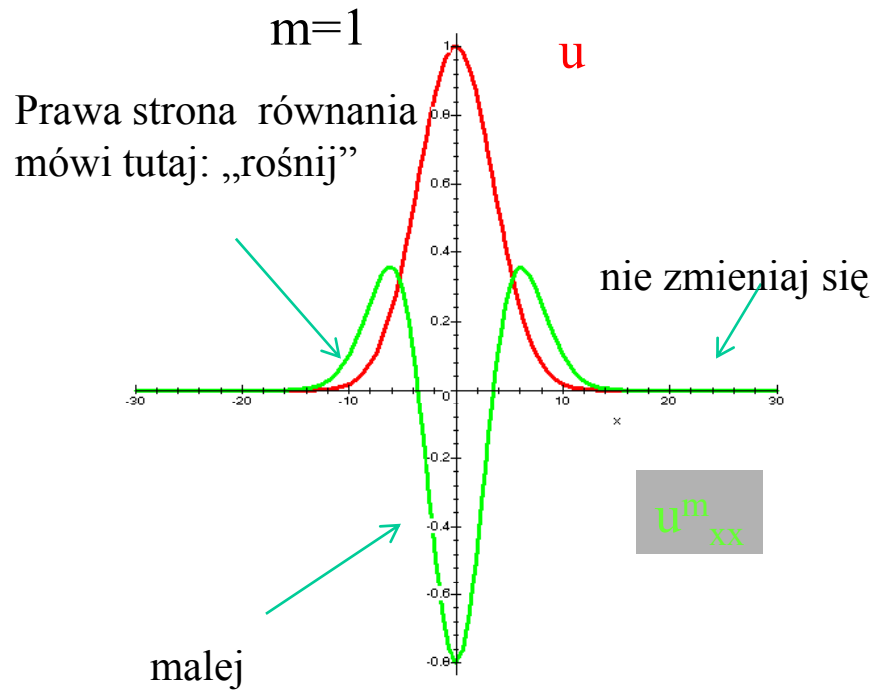


zwykła dyfuzja

CN

$$u_t = (u^m)_{xx}$$

warunek początkowy oraz niejednorodność w chwili początkowej
= do wyjaśnienia różnic w rozwiązaniu



widzimy, że krańce pakietu =
bez zmian. błyskawiczne stłumienie
maksimum, wyrównanie brzegów

Nieliniowe równania paraboliczne

$$u_t = (u^m)_{xx}$$

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} = \theta \left(\frac{(U_{j+1}^{n+1})^m + (U_{j-1}^{n+1})^m - 2(U_j^{n+1})^m}{\Delta x^2} \right) \\ (1 - \theta) \left(\frac{(U_{j+1}^n)^m + (U_{j-1}^n)^m - 2(U_j^n)^m}{\Delta x^2} \right)$$

zapiszemy jako układ równań nieliniowych

$$F_j(\mathbf{U}^{n+1}) \equiv U_j^{n+1} - \theta \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \left[\left((U_{j-1}^{n+1})^m - 2(U_j^{n+1})^m + (U_{j+1}^{n+1})^m \right) \right] \\ - U_j^n - (1 - \theta) \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \left[\left((U_{j-1}^n)^m - 2(U_j^n)^m + (U_{j+1}^n)^m \right) \right]$$

dla $\theta=0$ – jawny schemat – nadal forma

podstawieniowa (nawet dla nieliniowego równania)

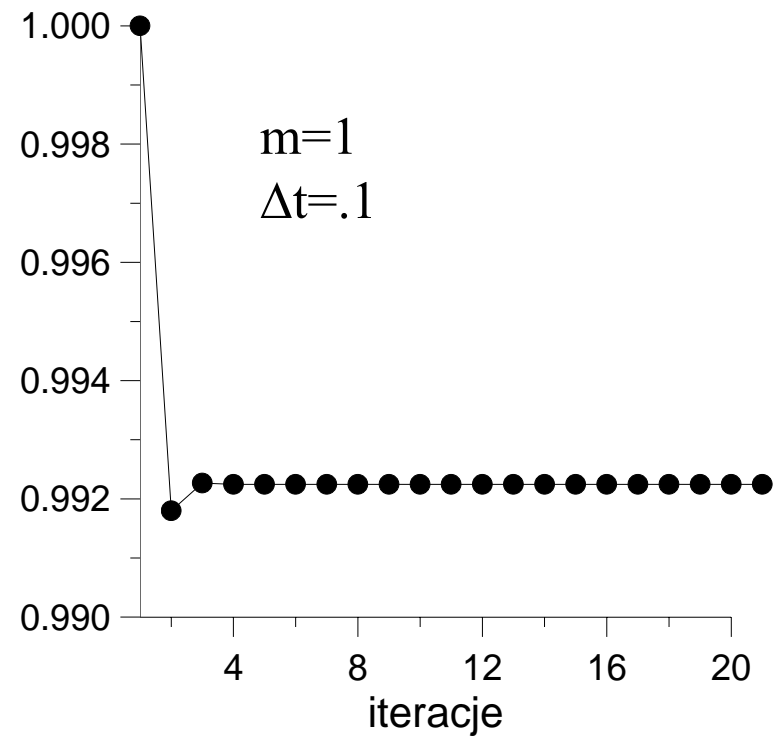
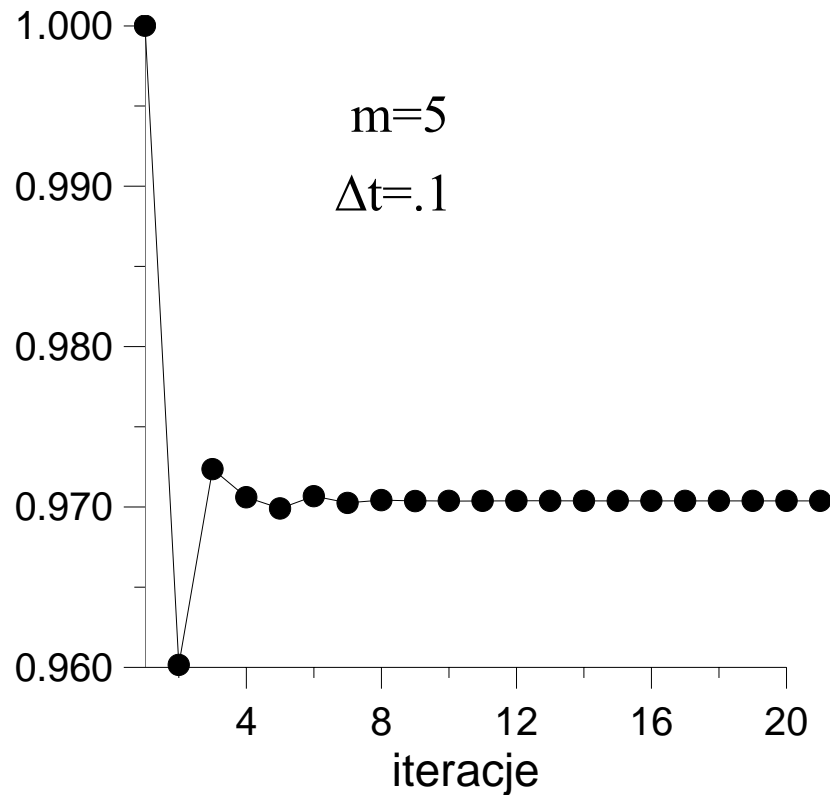
dla $\theta \neq 0$ – schemat niejawny – metoda Newtona lub iteracja funkcjonalna

CN + iteracja funkcjonalna

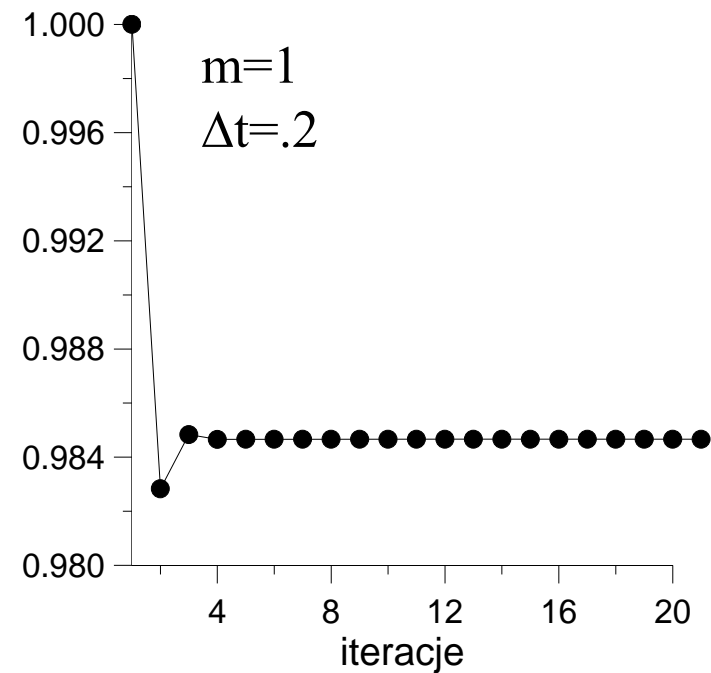
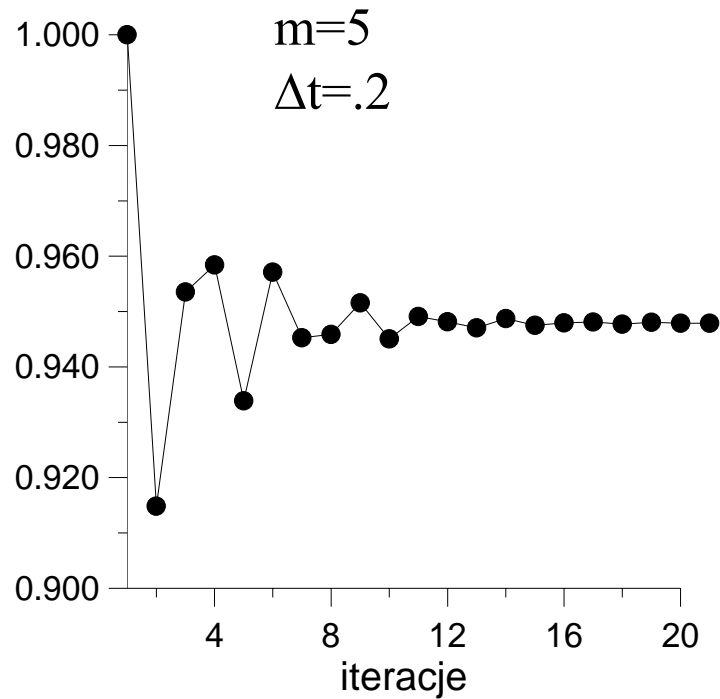
$$u_t = (u^m)_{xx}$$

$$u_i^{n+1} := u_i^n + \frac{\Delta t}{2\Delta x^2} \left[(u_{i+1}^n)^m + (u_{i-1}^n)^m - 2(u_i^n)^m + (u_{i+1}^{n+1})^m + (u_{i-1}^{n+1})^m - 2(u_i^{n+1})^m \right]$$

pierwszy krok czasowy,
uzgodnienie punktu w centrum $x=0$



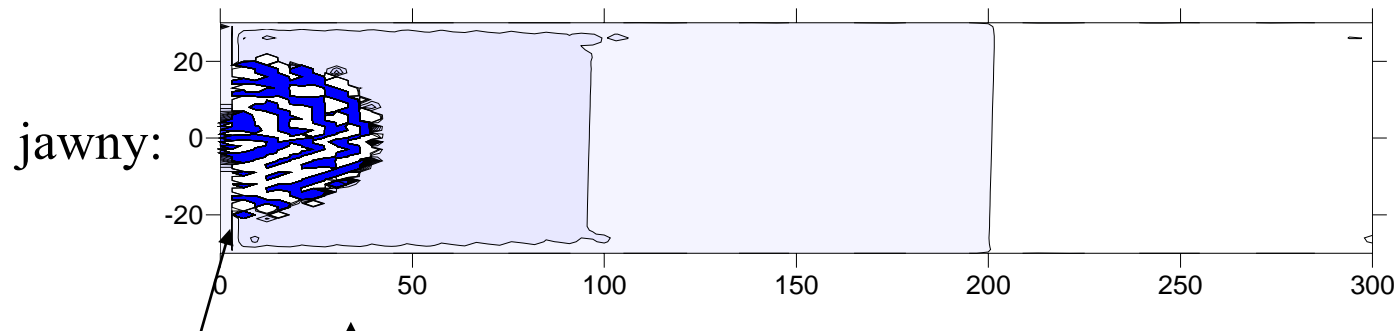
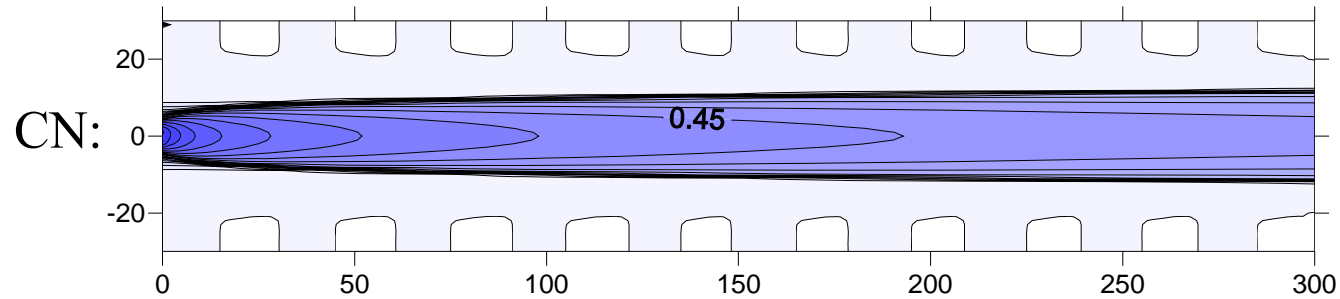
nieliniowe równanie dyfuzji CN,
zbieżność iteracji funkcjonalnej
punkt centralny, pierwszy krok czasowy



widzimy, że iteracja funkcjonalna nie rokuje dobrze
dla zbieżności równania nieliniowego przy dłuższym kroku czasowym

jeśli z iteracją kłopoty
może zastosować schemat jawny zamiast CN ?

$\Delta t=0.3$, 100 kroków



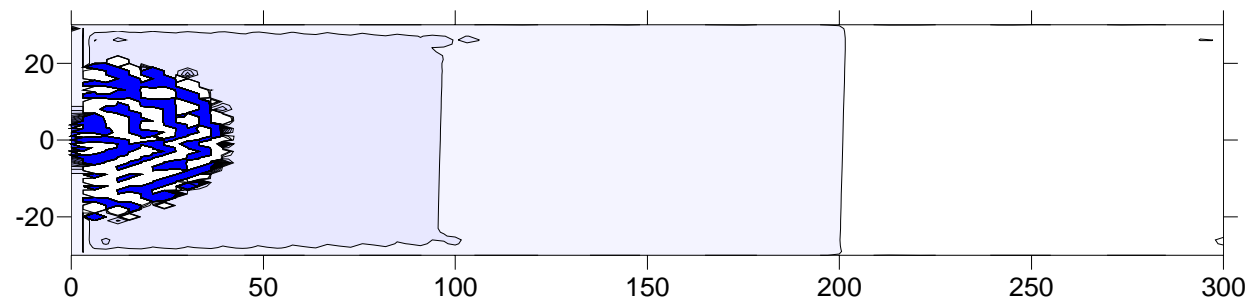
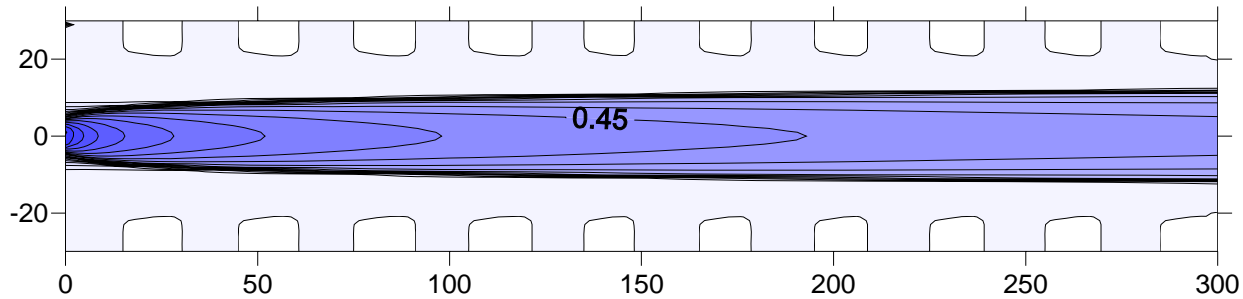
jest dobrze

↑
pojawiają się wartości 10^{14} po czym pakiet zanika

A może schemat jawny zamiast CN ?

$\Delta t=0.3$, 100 iteracji

CN



schemat jawny

pojawiają się wartości 10^{14} po czym pakiet znika

- 1) niejawnosc schematu jest potrzebna
 - 2) iteracja funkcjonalna się nie sprawdza
- metoda Newtona

metoda Newtona dla nieliniowego równania dyfuzji

$$F_j(\mathbf{U}^{n+1}) \equiv U_j^{n+1} - \theta \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \left[\left((U_{j-1}^{n+1})^m - 2 (U_j^{n+1})^m + (U_{j+1}^{n+1})^m \right) \right] \\ - U_j^n - (1 - \theta) \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \left[\left((U_{j-1}^n)^m - 2 (U_j^n)^m + (U_{j+1}^n)^m \right) \right]$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}^{n+1}) = \mathbf{F}(\mathbf{V}^k) + \mathbf{F}_{\mathbf{U}^{n+1}}(\mathbf{V}^k) (\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{V}^k) + O(\|\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{V}^k\|^2)$$



przybliżony wektor \mathbf{U}^{n+1} w k-tej iteracji
n+1 – znaczy n+1 chwila czasowa

$$\mathbf{F}_{\mathbf{U}^{n+1}}(\mathbf{V}^k) (\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{V}^k) = -\mathbf{F}(\mathbf{V}^k)$$

układ równań liniowych na poprawę przybliżenia
 $\mathbf{V}^{k+1} := \mathbf{V}^k + (\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{V}^k)$

$$\mathbf{F}_{\mathbf{U}^{n+1}}(\mathbf{V}^k) (\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{V}^k) = -\mathbf{F}(\mathbf{V}^k)$$

$$U_0 = U_J = 0$$

$$\mathbf{F}_{\mathbf{U}^{n+1}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial U_1^{n+1}} & \cdots & \frac{\partial F_1}{\partial U_{J-1}^{n+1}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_{J-1}}{\partial U_1^{n+1}} & \cdots & \frac{\partial F_{J-1}}{\partial U_{J-1}^{n+1}} \end{pmatrix} \longleftarrow \text{Macierz Jakobiego}$$

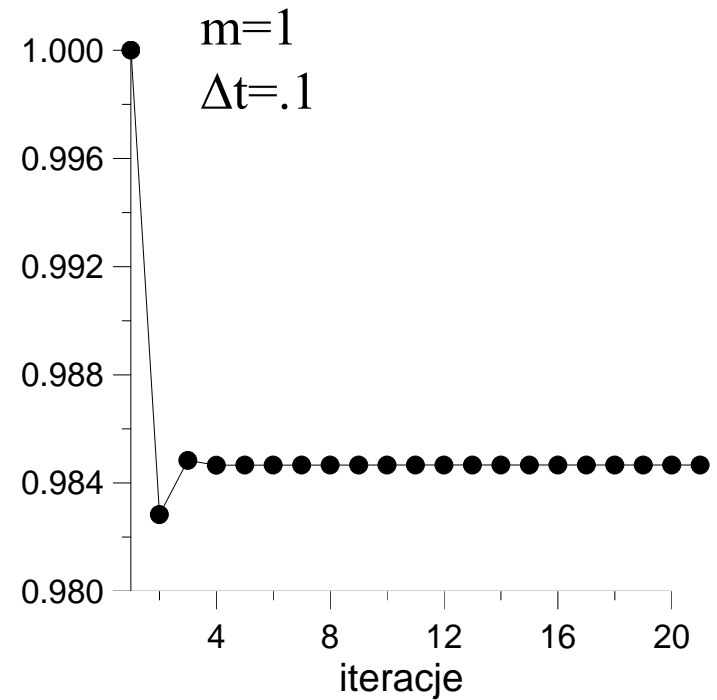
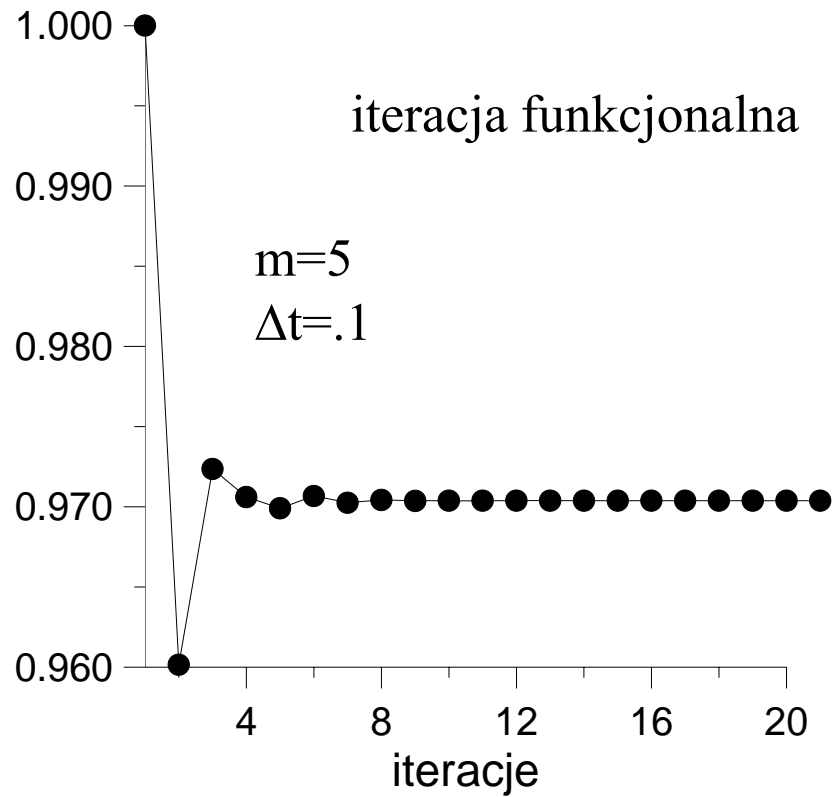
$$F_j(\mathbf{U}^{n+1}) \equiv U_j^{n+1} - \theta \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \left[\left((U_{j-1}^{n+1})^m - 2(U_j^{n+1})^m + (U_{j+1}^{n+1})^m \right) \right] \\ - U_j^n - (1 - \theta) \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \left[\left((U_{j-1}^n)^m - 2(U_j^n)^m + (U_{j+1}^n)^m \right) \right]$$

$$\mathbf{F}_{jj}(\mathbf{V}^k) = 1 + \frac{2m\theta\Delta t}{\Delta x^2} (V_j^k)^{m-1}$$

m. Jakobiego: trójkątniowa $\mathbf{F}_{j(j-1)}(\mathbf{V}^k) = -\frac{m\theta\Delta t}{\Delta x^2} (V_{j-1}^k)^{m-1}$

$$\mathbf{F}_{j(j+1)}(\mathbf{V}^k) = -\frac{m\theta\Delta t}{\Delta x^2} (V_{j+1}^k)^{m-1}$$

Wyniki [CN]



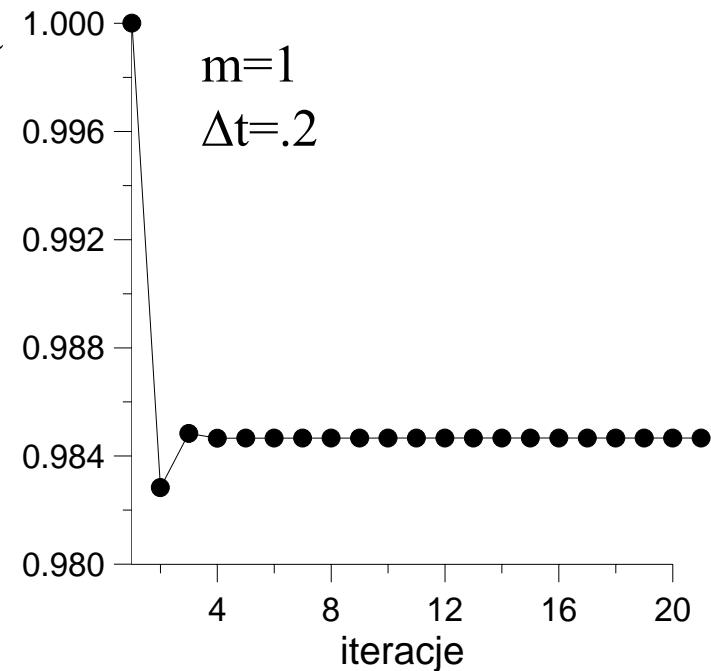
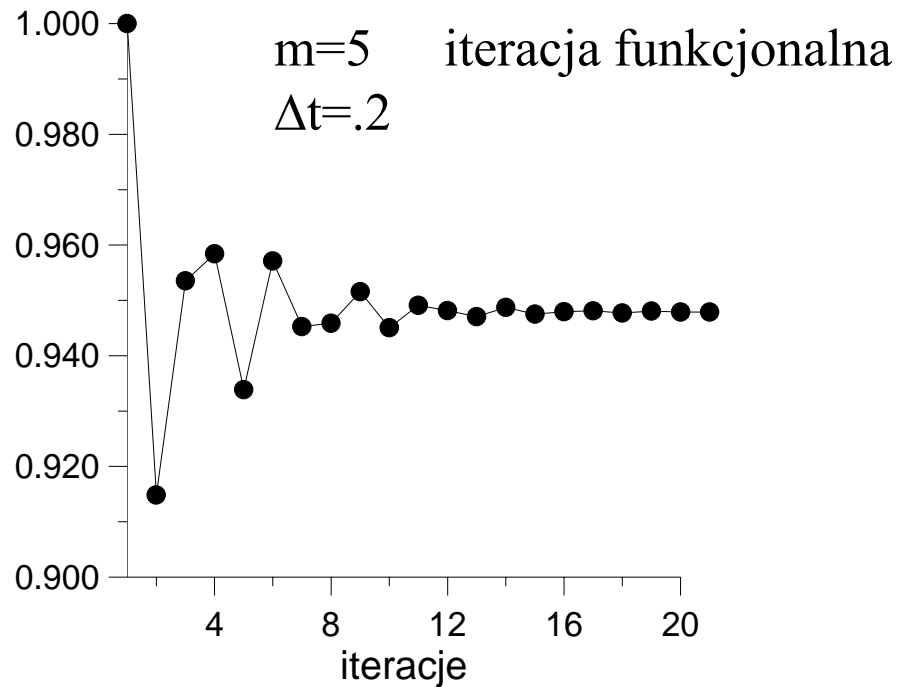
Metoda Newtona:

1	1
2	0.970743147366556
3	0.970376491139719

Metoda Newtona:

1	1
2	0.9922461168083
3	0.992246116808

Wyniki [CN]



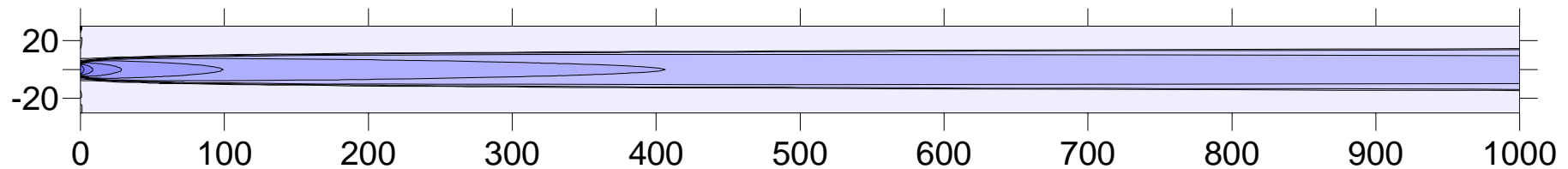
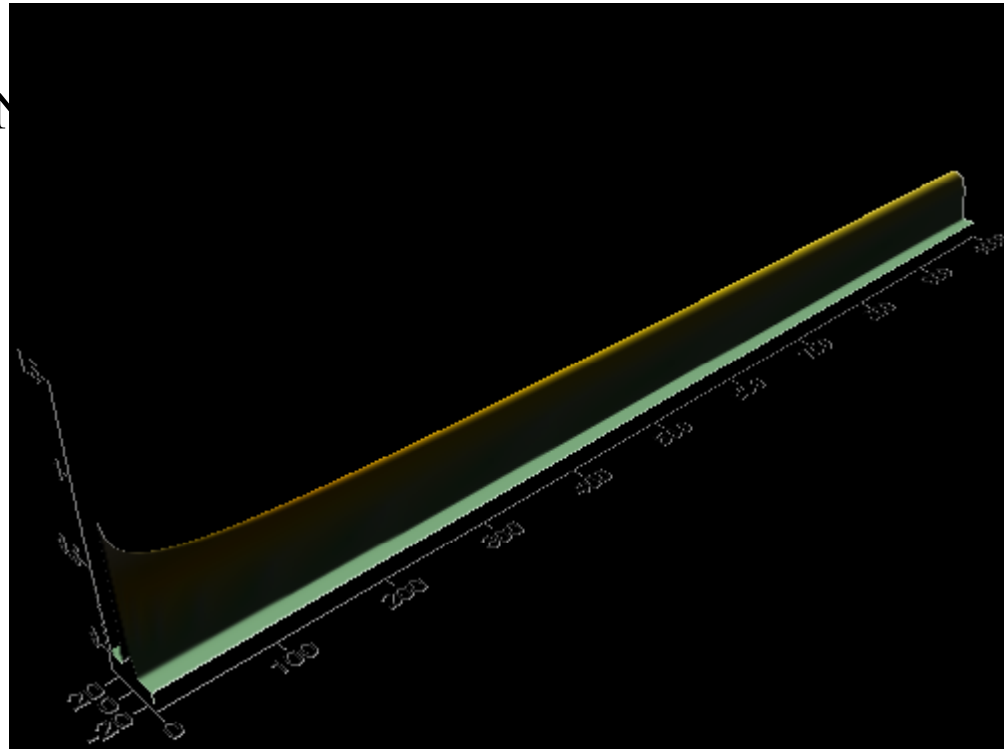
Metoda Newtona:

1	1
2	0.949526520122893
3	0.947925874533601
4	0.947923849482469

Metoda Newtona:

1	1
2	.98466247689
3	.98466247689

$m=5, dt=1$ z iteracją N



Wniosek: aby rozwiązać równania nieliniowe z rozsądnym krokiem czasowym potrzebna jest metoda niejawna

do rozwiązania nieliniowych równań schematu - iteracja Newtona

Szacowanie błędów dla równań cząstkowych zależnych od czasu na przykładzie równania adwekcji

$$u_t + v u_x = 0$$

czasowa i przestrzenna pochodna zastąpione przednim ilorazem różnicowym

(jest to *upwind* dla $v < 0$)

$$(u_t)_j^n + v (u_x)_j^n = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} - \frac{\Delta t}{2} (u_{tt})_j^{n+\theta} + v \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x} - v \frac{\Delta x}{2} (u_{xx})_{j+\xi}^n$$

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\Delta t} + v \frac{U_{j+1}^n - U_j^n}{\Delta x} = 0$$

z góry wiemy, że wyliczone wartości będą różnić się od wartości dokładnych o pewną wartość zależną od pochodnych rozwiązania dokładnego

-ale w praktyce ta wiedza nie przyda nam się do ilościowego oszacowania popełnionego błędu

szacowanie błędów: 2 opcje

- 1) porównanie rozwiązań na różnych siatkach
- 2) porównanie rozwiązań metod o innym rzędzie dokładności

szacowanie *a posteriori*: 2 opcje

- 1) porównanie rozwiązań na różnych siatkach
- 2) porównanie rozwiązań metod o innym rzędzie dokładności

błędy lokalne dwóch metod (zakładamy, że lokalny błąd czasowy jest o 1 większy niż przestrzenny)

$$u_j^{n+1} - U_j^{n+1} = \Delta t [c_1 \Delta x^p + c_2 \Delta t^p + O(\Delta x^{p+1}) + O(\Delta t^{p+1})]$$

$$u_j^{n+1} - V_j^{n+1} = \Delta t [c_1^* \Delta x^{p+1} + c_2^* \Delta t^{p+1} + O(\Delta x^{p+2}) + O(\Delta t^{p+2})]$$

np: dla $p=1$, pierwsza metoda: U – upwind [$O(\Delta t^2)$, $O(\Delta x)$], druga: V - CN [$O(\Delta t^3)$, $O(\Delta x^2)$]

$$u_j^{n+1} - U_j^{n+1} = \underbrace{(u_j^{n+1} - V_j^{n+1})}_{\Delta t (O(\Delta x^{p+1}) + O(\Delta t^{p+1}))} + \underbrace{(V_j^{n+1} - U_j^{n+1})}_{\Delta t (O(\Delta x^p) + O(\Delta t^p))}$$

$$\Delta t (O(\Delta x^p) + O(\Delta t^p))$$

$$\Delta t (O(\Delta x^{p+1}) + O(\Delta t^{p+1}))$$

szacowanie *a posteriori*: 2 opcje

- 1) porównanie rozwiązań na różnych siatkach
- 2) porównanie rozwiązań metod o innym rzędzie dokładności

błędy lokalne dwóch metod (zakładamy, że lokalny błąd czasowy jest o 1 większy niż przestrzenny)

$$\begin{aligned}u_j^{n+1} - U_j^{n+1} &= \Delta t [c_1 \Delta x^p + c_2 \Delta t^p + O(\Delta x^{p+1}) + O(\Delta t^{p+1})] \\u_j^{n+1} - V_j^{n+1} &= \Delta t [c_1^* \Delta x^{p+1} + c_2^* \Delta t^{p+1} + O(\Delta x^{p+2}) + O(\Delta t^{p+2})]\end{aligned}$$

np: dla $p=1$, pierwsza metoda: U – upwind [$O(\Delta t^2)$, $O(\Delta x)$], druga: V - CN [$O(\Delta t^3)$, $O(\Delta x^2)$]

$$\begin{array}{ccc}u_j^{n+1} - U_j^{n+1} & = & (u_j^{n+1} - V_j^{n+1}) + (V_j^{n+1} - U_j^{n+1}) \\ \hline \Delta t (O(\Delta x^p) + O(\Delta t^p)) & & \Delta t (O(\Delta x^{p+1}) + O(\Delta t^{p+1})) \\ & & \downarrow \\ & & \Delta t (O(\Delta x^p) + O(\Delta t^p))\end{array}$$

błąd dokładniejszego schematu: zaniedbywalny w porównaniu z błędem mniej dokładnego
różnica V oraz U daje oszacowanie błędu *gorszego schematu*

strategia: do ewolucji czasowej używamy V, możemy wypowiedzieć się o błędzie U

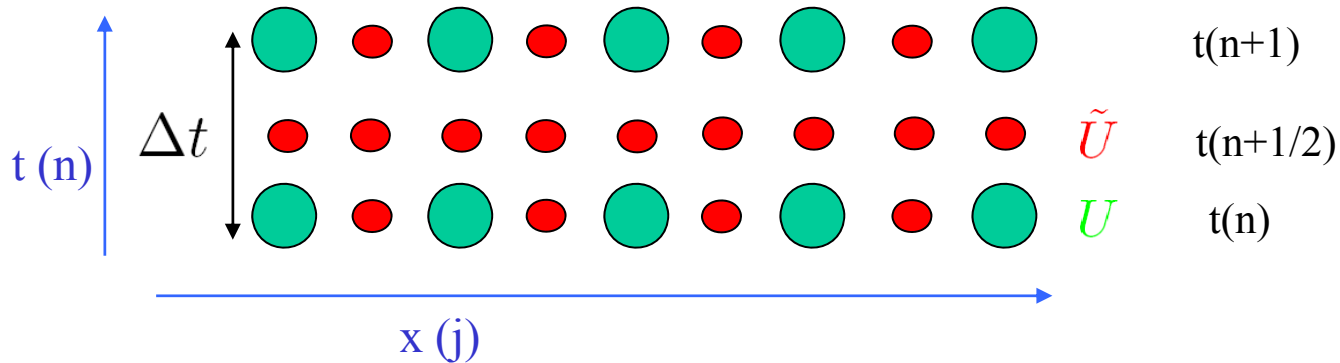
szacowanie a posteriori: 2 opcje

1) porównanie rozwiązań na różnych siatkach

2) porównanie rozwiązań metod o innym rzędzie dokładności

ekstrapolacja Richardsona

używamy jednego schematu lecz dwóch siatek: $(\Delta x, \Delta t)$, oraz $(\Delta x/2, \Delta t/2)$



$$\begin{aligned} u_j^{n+1} - \tilde{U}_j^{n+1} &= 2 \frac{\Delta t}{2} \left[c_1 \frac{\Delta x^p}{2^p} + c_2 \frac{\Delta t^p}{2^p} + O(\Delta x^{p+1}) + O(\Delta t^{p+1}) \right] && \text{Błąd w chwili } n+1 \\ &= \frac{\Delta t}{2^p} \left[c_1 \Delta x^p + c_2 \Delta t^p + O(\Delta x^{p+1}) + O(\Delta t^{p+1}) \right] \end{aligned}$$

w punktach rzadkiej siatki mamy:

$$u_j^{n+1} - U_j^{n+1} = \Delta t \left[c_1 \Delta x^p + c_2 \Delta t^p + O(\Delta x^{p+1}) + O(\Delta t^{p+1}) \right]$$

$$u_j^{n+1} - \tilde{U}_j^{n+1} = \frac{\Delta t}{2^p} [c_1 \Delta x^p + c_2 \Delta t^p + O(\Delta x^{p+1}) + O(\Delta t^{p+1})]$$

$$u_j^{n+1} - U_j^{n+1} = \Delta t [c_1 \Delta x^p + c_2 \Delta t^p + O(\Delta x^{p+1}) + O(\Delta t^{p+1})]$$

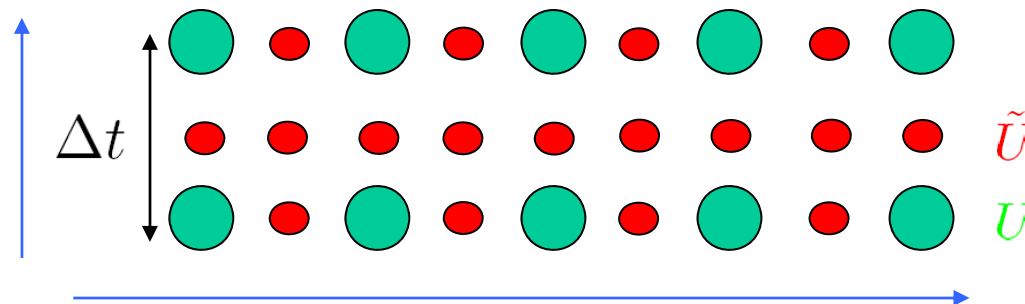


$$\tilde{U}_j^{n+1} - U_j^{n+1} = \left(1 - \frac{1}{2^p}\right) \Delta t [c_1 \Delta x^p + c_2 \Delta t^p] + \Delta t [O(\Delta x^{p+1}) + O(\Delta t^{p+1})]$$



$$\Delta t [c_1 \Delta x^p + c_2 \Delta t^p] \simeq \frac{\tilde{U}_j^{n+1} - U_j^{n+1}}{1 - 1/2^p}$$

mamy oszacowanie błędu obydwu rozwiązań *ale tylko na rzadkiej siatce*
... co dla automatycznej kontroli Δt całkowicie wystarczy



ekstrapolacja Richardsona dla równań różniczkowych cząstkowych - przykład

$$u_t + v u_x = 0$$

upwind (iloraz przedni czasowy, wsteczny przestrzenny)

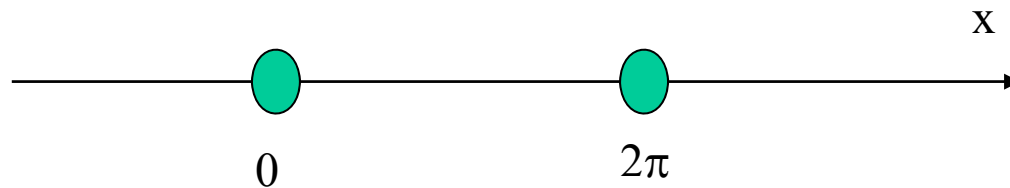
$$U_j^{n+1} = (1 - \alpha)U_j^n + \alpha U_{j-1}^n \quad \text{dokładność ilorazów przestrzennych i czasowych identyczna (p=1)}$$

$$u_j^{n+1} - U_j^{n+1} = \Delta t [c_1 \Delta x^p + c_2 \Delta t^p + O(\Delta x^{p+1}) + O(\Delta t^{p+1})]$$

błąd lokalny $O(\Delta x) + O(\Delta t^2)$

$$v=1$$

warunek początkowy: $u(x) = \sin(x)$
rozwiązanie dokładne $u(x, t) = \sin(x-t)$



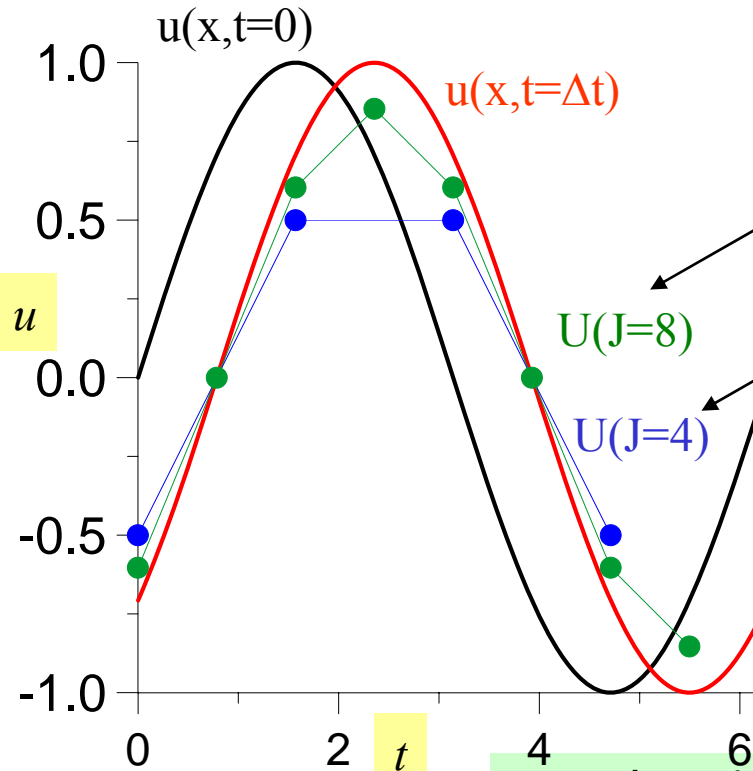
zawsze $u(0) = u(2\pi)$ = zastosujemy periodyczne warunki brzegowe

ekstrapolacja Richardsona dla równań różniczkowych cząstkowych - przykład

$$x_j = (j-1)\Delta x, \quad j=1, \dots, J, \quad \Delta x = 2\pi/J$$

$$\begin{aligned} J &= 4 \\ \Delta x &= \pi/2 \\ \Delta t &= \pi/4 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J' &= 8 \\ \Delta x' &= \Delta x/2 \\ \Delta t' &= \Delta t/2 \end{aligned}$$



po dwóch krokach $\Delta t' = \Delta t/2$

po jednym Δt

gdzie się pokrywają:

$$\Delta t [c_1 \Delta x^p + c_2 \Delta t^p] \simeq \frac{\tilde{U}_j^{n+1} - U_j^{n+1}}{1 - 1/2^p}$$

szacujemy błąd

$$u_j^{n+1} - \tilde{U}_j^{n+1} = \frac{\Delta t}{2^p} [c_1 \Delta x^p + c_2 \Delta t^p + O(\Delta x^{p+1}) + O(\Delta t^{p+1})]$$

szacujemy błąd

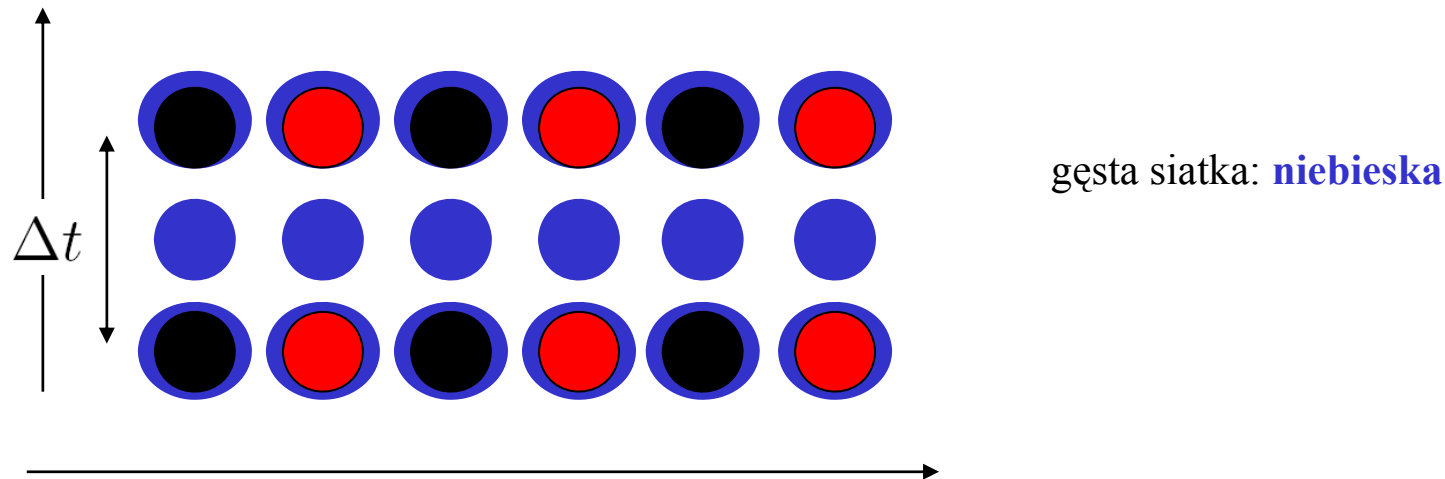
błąd faktyczny

-0.1035533365	-0.1035534603
0.1035533983	0.1035533983
0.1035533892	0.1035533892
-0.1035534073	-0.1035534073

rewelacyjny wynik

ekstrapolacja Richardsona dla równań różniczkowych cząstkowych - przykład

oszacowanie błędu w jednym kroku Δt bardzo dokładne:
wykorzystać do poprawy dokładności



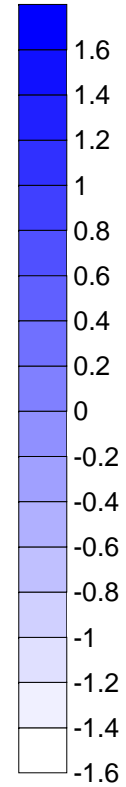
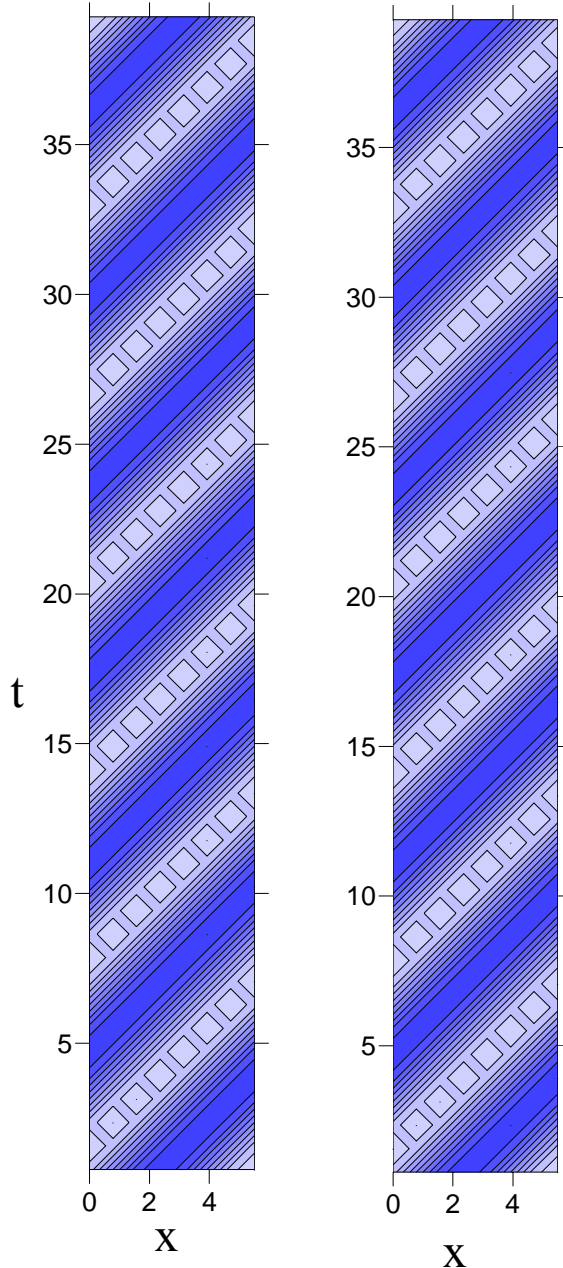
algorytm: w chwili t_n znamy wartości funkcji na gęstej siatce

- 1) przepisujemy je naprzemiennie na dwie rzadsze siatki: **czerną** i **czarną**
- 2) wykonujemy krok Δt dla każdej z nich
- 3) wykonujemy dwa kroki $\Delta t/2$ na gęstszej siatce
- 4) szacujemy i odcinamy błędy w kroku $t+\Delta t$

upwind z ekstrapolacją Richardsona
i usunięciem błędów

dokładny

upwind: bez obcięcia błędów
= rozwiązanie zanika (dyfuzja)



gęstsza: $J=8$
 $\Delta x' = \Delta x / 2$
 $\Delta t' = \Delta t / 2$

