

Numeryczne rozwiązywanie równań różniczkowych cząstkowych

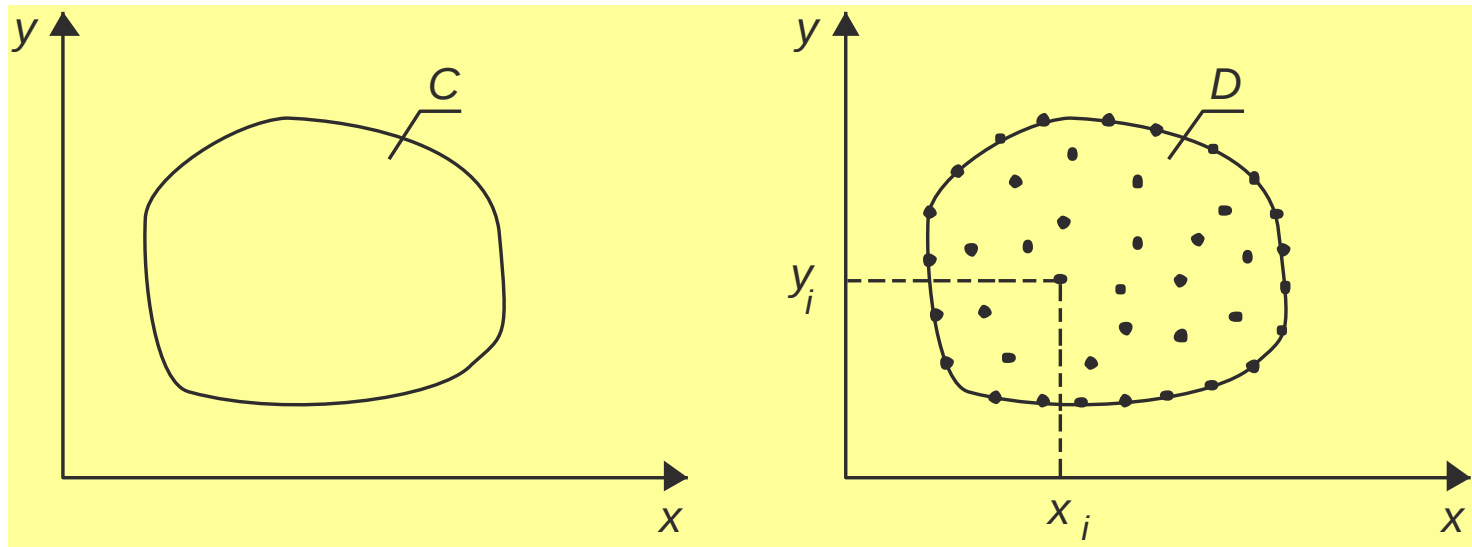
Numeryczne rozwiązywanie równań różniczkowych cząstkowych

Podstawowa cecha metod numerycznych:
operowanie liczbami, które reprezentują zarówno dane jak i wyniki.

Postępowanie w trakcie aplikacji metod numerycznych:

- **Dyskretyzacja obszaru** czyli zastąpienie obszaru ciągłego, w którym poszukuje się rozwiązania, obszarem dyskretnym.

W jej wyniku obszar ciągły C zastępuje się zbiorem wyizolowanych punktów, zwanych węzłami. Tworzą one obszar dyskretny D .



Rys. Dyskretyzacja obszaru ciągłego C

Położenie każdego węzła w przyjętym układzie definiują jego współrzędne.

Metody numeryczne umożliwiają obliczenie przybliżonej wartości rozwiązania równania różniczkowego cząstkowego tylko w węzłach obszaru dyskretnego.

- **Aproksymacja równań** czyli zastąpienie równania różniczkowego cząstkowego lub układu takich równań układem równań algebraicznych, w którym niewiadomymi będą wartości rozwiązania w węzłach:

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\partial f_1}{\partial t} + \dots = 0 \\ \vdots \\ \frac{\partial f_K}{\partial t} + \dots = 0 \end{array} \right\} \rightarrow \mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{B}$$

gdzie: **A** – macierz współczynników układu równań
X – wektor niewiadomych utworzony przez nieznane wartości rozwiązania w węzłach
B – wektor wyrazów wolnych

Różnice pomiędzy poszczególnymi metodami polegają na różnych sposobach aproksymacji równań.

Istnieje szereg metod numerycznego rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych. Do najbardziej znanych należy:

- **metoda różnic skończonych**
- **metoda elementów skończonych**
- **metoda objętości skończonych**

Wybór metody:

- Metoda różnic skończonych dla jednowymiarowych równań różniczkowych cząstkowych (z jedną zmienną przestrzenną)
- Metoda elementów skończonych w wypadku zagadnień wielowymiarowych
- Metoda objętości skończonych w przypadku występowania nieciągłości

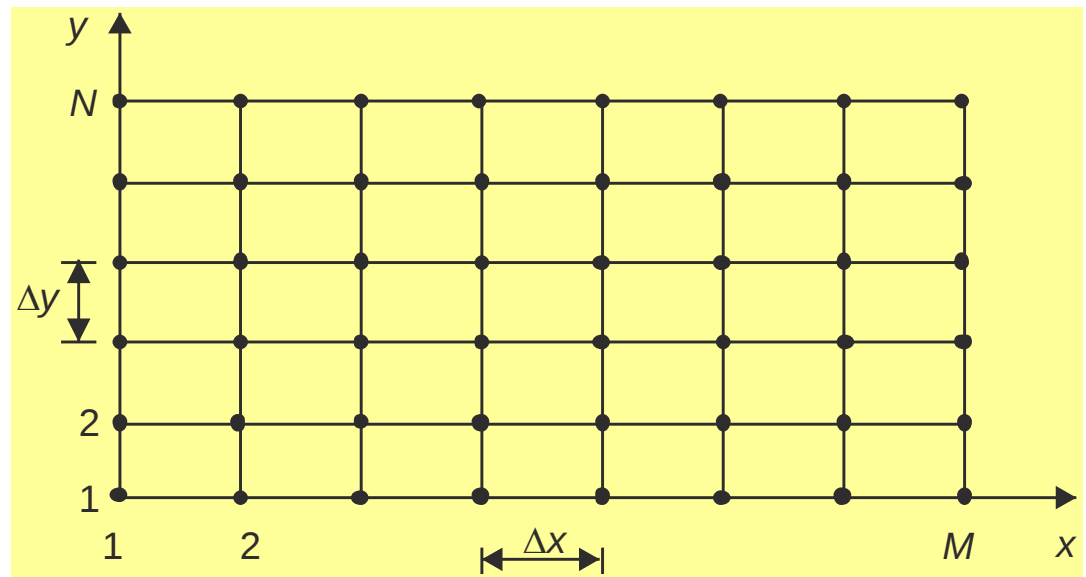
Metoda różnic skończonych

- Obszar dyskretny: zbiór punktów otrzymanych w przecięciach rodzin prostych równoległych do osi układu współrzędnych.
- W przypadku płaskim obszar ciągły zastępujemy zbiorem punktów – węzłów otrzymanych w miejscu przecięcia prostych równoległych do osi x oraz prostych równoległych do osi y .

Odległości pomiędzy prostymi: Δx i Δy

Zwykle przyjmuje się
 $\Delta x = \text{const}$, $\Delta y = \text{const}$.

Jeśli $\Delta x = \Delta y$ – siatka kwadratowa

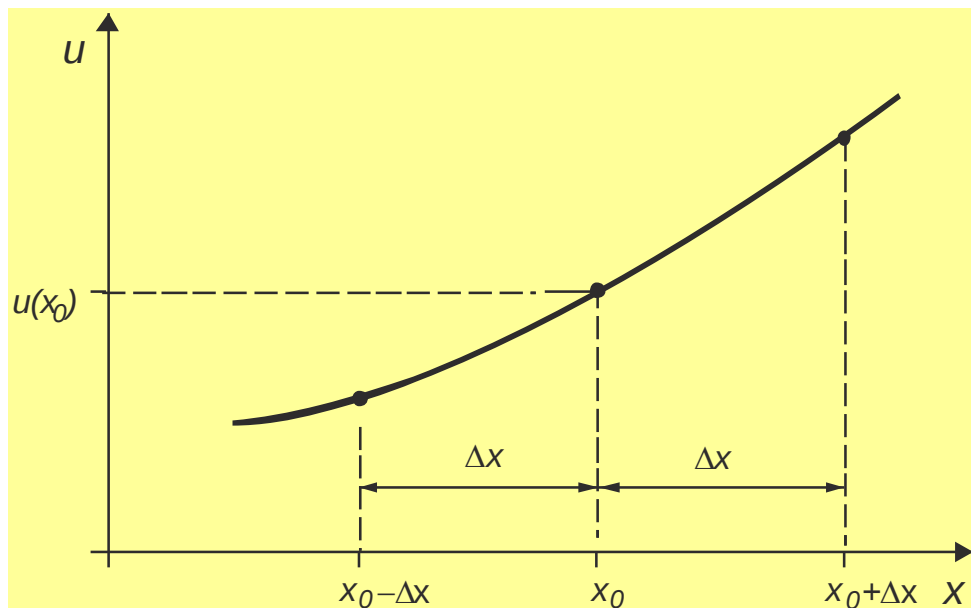


Rys. Dyskretyzacja obszaru ciągłego w metodzie różnic skończonych

Aproksymacja pochodnej I rzędu

Ilorazy różnicowe aproksymujące pochodną wyprowadza się wprost z szeregu Taylora zastosowanego do rozwinięcia funkcji wokół rozpatrywanego punktu x_0 . Dla funkcji jednej zmiennej szereg Taylora można zapisać następująco:

$$u(x_0 + \Delta x) = u(x_0) + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\Delta x^m}{m!} \left. \frac{\partial^m u}{\partial x^m} \right|_{x_0}$$



Funkcja $u(x)$ w otoczeniu punktu x_0

Dla dodatniej i ujemnej wartości Δx powyższy wzór rozpisuje się odpowiednio:

$$f(x_0 + \Delta x) = f(x_0) + \frac{\Delta x}{1!} \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{x_0} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \Big|_{x_0} + \frac{\Delta x^3}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \Big|_{x_0} + \dots$$

$$f(x_0 - \Delta x) = f(x_0) - \frac{\Delta x}{1!} \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{x_0} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \Big|_{x_0} - \frac{\Delta x^3}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \Big|_{x_0} + \dots$$

Wyznamy z szeregów pochodne I rzędu w punkcie x_0 . Są one równe:

$$\frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{x_0} = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \Big|_{x_0} - \frac{\Delta x^2}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \Big|_{x_0} - \dots$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{x_0} = \frac{f(x_0) - f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \Big|_{x_0} + \frac{\Delta x^2}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \Big|_{x_0} - \dots$$

Szeregi mają nieskończoną liczbę wyrazów. Przyjęcie skończonej ich liczby powoduje **wprowadzenie błędu obcięcia**.

W konsekwencji zamiast dokładnej wartości pochodnej funkcji $y(x_{i+1})$ otrzymujemy jej przybliżoną wartość. Błąd przybliżenia zależy od liczby uwzględnionych członów szeregu.

Jeśli więc zastąpimy pochodną wyrażeniami:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x_0} \approx \frac{u(x_0 + \Delta x) - u(x_0)}{\Delta x} \quad , \quad \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x_0} \approx \frac{u(x_0) - u(x_0 - \Delta x)}{\Delta x}$$

to otrzymamy formuły reprezentujące aproksymację pochodnej I rzędu nazywane odpowiednio **ilorazem różnicowym przednim i wstecznym**. Aproksymują one pochodną z dokładnością $O(\Delta x)$.

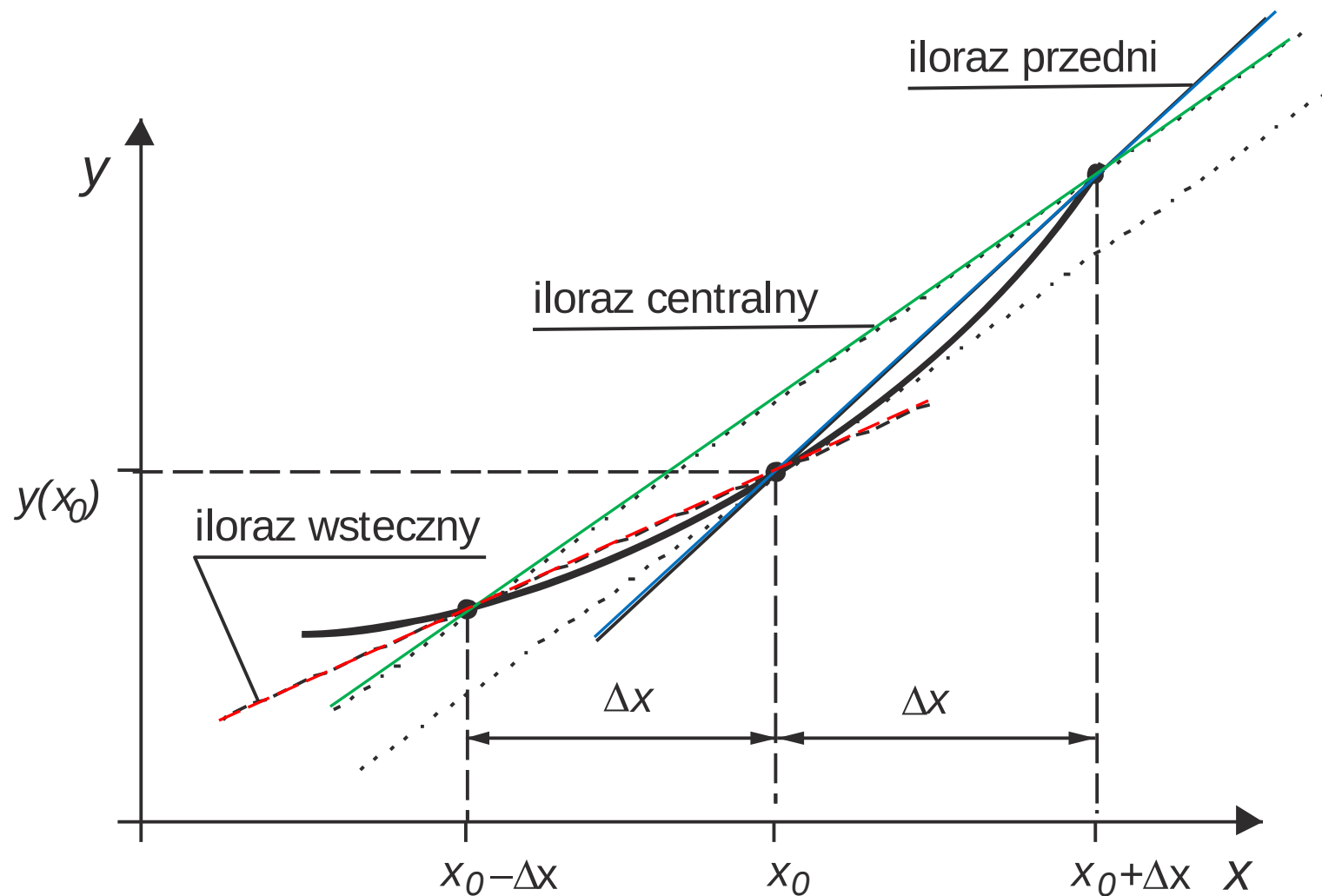
Jeżeli szeregi Taylora odejmiemy od siebie stronami i odrzucimy człony zawierające pochodne III rzędu i wyższe, otrzymamy

$$u(x_0 + \Delta x) - u(x_0 - \Delta x) \approx 2\Delta x \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_0}$$

skąd

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_0} \approx \frac{u(x_0 + \Delta x) - u(x_0 - \Delta x)}{2\Delta x}$$

W tym wypadku pochodna w punkcie x_0 aproksymowana jest za pomocą **ilorazu różnicowego centralnego** z dokładnością $O(\Delta x^2)$.



Interpretacja aproksymacji pochodnej I rzędu ilorazami różnicowymi

Aproksymacja pochodnej II rzędu

Szeregi Taylora można wykorzystać do aproksymacji pochodnej II rzędu.

Dodajemy szeregi stronami do siebie pomijając wyrazy zawierające pochodne IV rzędu i wyższe. W ten sposób otrzymujemy:

$$u(x_0 + \Delta x) + u(x_0 - \Delta x) \approx 2u(x_0) + \Delta x^2 \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{x_0}$$

skąd wynika formuła następująca aproksymująca

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{x_0} \approx \frac{u(x_0 - \Delta x) - 2u(x_0) + u(x_0 + \Delta x)}{\Delta x^2}$$

Ogólne uwagi i sugestie dotyczące różnych aspektów metody różnic skończonych, użyteczne w praktyce obliczeń inżynierskich:

- Dla funkcji gładkich błąd obcięcia szeregu Taylora jest zdominowany przez pierwszy człon obciętej części szeregu.

W konsekwencji człon ten determinuje dokładność rozwiązania.

Zasada ta obowiązuje dla wszystkich formuł aproksymacyjnych.

- Dokładność aproksymacji pochodnych rośnie z rzędem formuły aproksymującej.

Błąd aproksymacji zależy od wymiaru siatki Δx .

Można oczekiwać, że błąd ten będzie skuteczniej redukowany przez zmniejszanie Δx niż przez zwiększanie rzędu formuły aproksymującej.

Zatem zwiększając rząd aproksymacji należy jednocześnie zagęszczać siatkę.

- Negatywnym aspektem zwiększania rzędu formuły aproksymacyjnej jest włączanie do aproksymacji coraz większej liczby wartości węzłowych funkcji $f(x)$.

Ponadto zwiększanie rzędu aproksymacji poprawia bardzo wolno wyniki obliczeń na siatce rzadkiej.

- Zwiększanie rzędu formuły aproksymacyjnej nie gwarantuje poprawy dokładności w przypadku funkcji szybkozmiennych, szczególnie gdy pojawiają się nieciągłości.

Jest tak ponieważ w takiej sytuacji błąd obcięcia szeregu Taylora nie jest zdominowany tylko przez pierwszy człon obciętej części

Uwaga:

W zagadnieniach praktycznych pochodna I rzędu powinna być aproksymowana formułą II rzędu. Aproksymacje wyższego rzędu powinny być stosowane tylko w wyjątkowych okolicznościach.

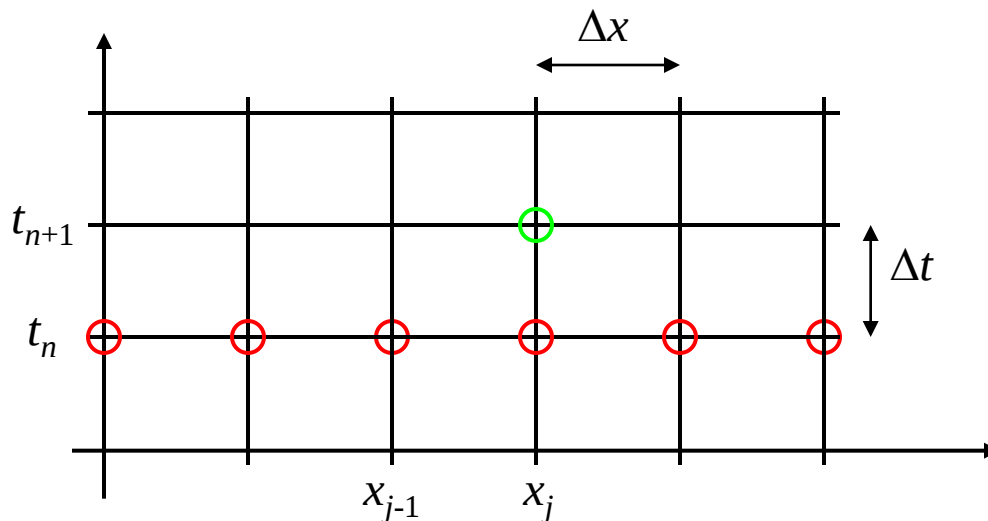
Rozwiązanie jednowymiarowego równania adwekcji metodą różnic skończonych

Rozpatrujemy równanie adwekcji

$$\frac{\partial f}{\partial t} + U \frac{\partial f}{\partial x} = 0$$

z danym $U = \text{const}$ oraz zdefiniowanymi warunkami granicznymi

Obszar rozwiązania $0 \leq x \leq L$ i $t \geq 0$ pokrywamy siatką o wymiarach $\Delta x \times \Delta t$



$$f_j^n = f(x_j, t_n)$$

Δt - krok czasowy

Δx - krok przestrzenny

Najprostszy schemat metody różnic skończonych ma postać:

$$\frac{f_j^{n+1} - f_j^n}{\Delta t} + U \frac{f_j^n - f_{j-1}^n}{\Delta x} = 0$$

Jest to tak zwany schemat "up-wind" (pod prąd)

Równanie zawiera więc tylko jedną wartość niewiadomą f_j^{n+1}

$$f_j^{n+1} = C_a \cdot f_{j-1}^n + (1 - C_a) \cdot f_j^n$$

$$j = 2, 3, \dots, M$$

$C_a = \frac{U \cdot \Delta t}{\Delta x}$	liczba Couranta (adwekcyjna)
---	---------------------------------

Przykład rozwiązania równania adwekcji schematem różnicowym „up-wind”

W kanale prostym o stałym spadku dna i długości L woda płynie ze stałą prędkością U

Przyjmijmy:

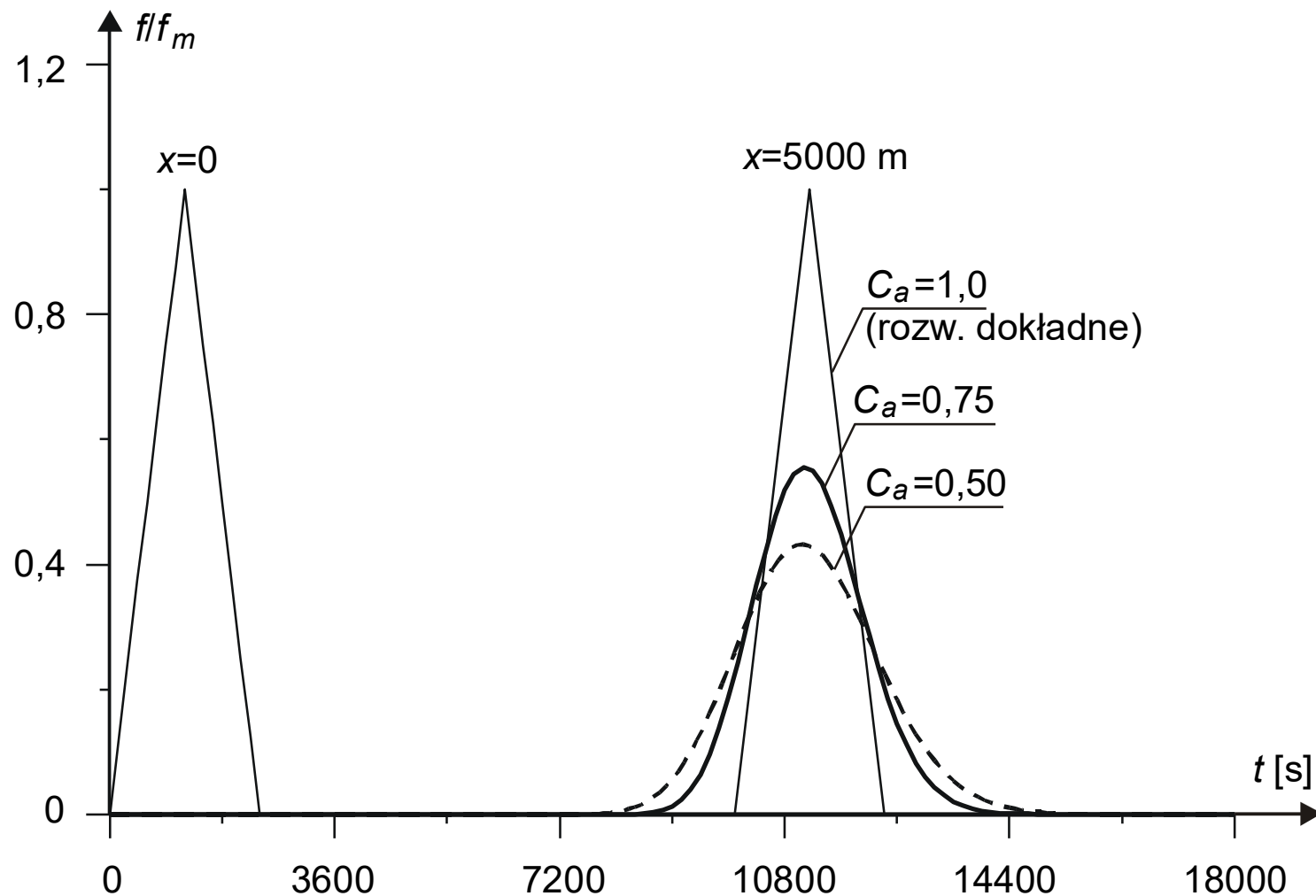
$$U = 0,5 \text{ m/s} = \text{const}, \Delta x = 100 \text{ m} = \text{const}$$

- warunek początkowy: $f(x, t = 0) = 0$ dla $0 \leq x \leq L$

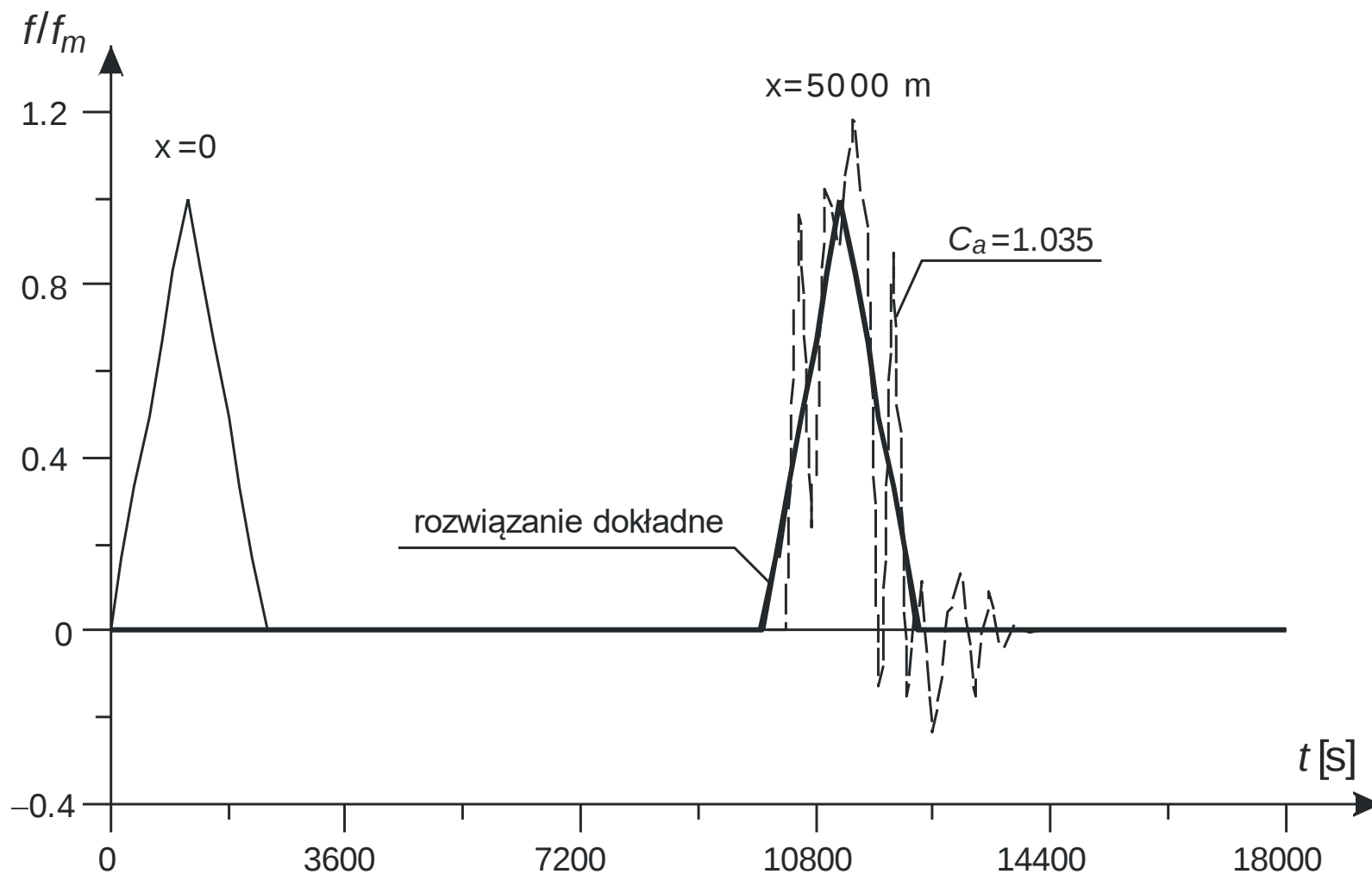
- warunek brzegowy w postaci funkcji:

$$f(x = 0, t) = \begin{cases} f_m \cdot \frac{t}{t_m} & \text{dla } 0 \leq t \leq t_m \\ f_m \cdot \left(2 - \frac{t}{t_m}\right) & \text{dla } t_m \leq t \leq 2t_m \\ 0 & \text{dla } t > 2t_m \end{cases}$$

przy czym $f_m = 100$, zaś $t_m = 1200 \text{ s}$



Rys. Rozwiązanie równania adwekcji metodą „up-wind”
dla różnych liczb Couranta z zakresu **$C_a=0.5-1.0$**



Rys. Rozwiązanie równania adwekcji schematem „up-wind” dla liczby Couranta **$C_a=1.035$**

Komentarz

Schemat „up-wind” (pod prąd):

- przy $C_a = 1$ zapewnia dokładne rozwiązanie równania adwekcji
- przy $C_a < 1$ generuje dyfuzję – ponieważ rozwiązujemy równanie czystej adwekcji dyfuzja musi mieć charakter numeryczny
- przy $C_a > 1$ wykazuje objawy niestabilności
- schemat warunkowo stabilny

$$C_a = \frac{U \cdot \Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad \rightarrow \quad \Delta t \leq \frac{\Delta x}{U}$$

Rozwiązanie jednowymiarowego równania dyfuzji metodą różnic skończonych

Rozwiązujemy jednowymiarowe równanie dyfuzji:

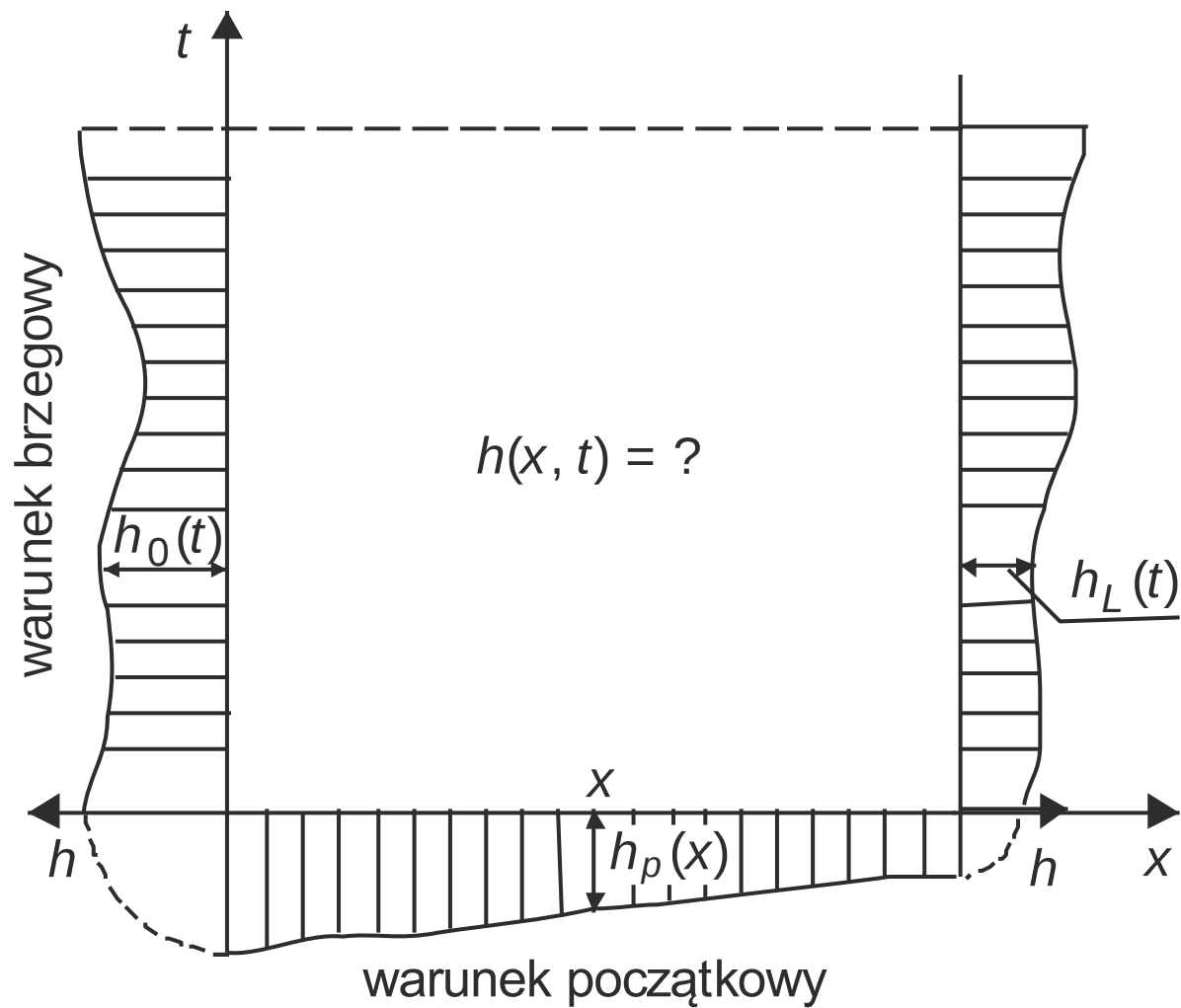
$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial h}{\partial x} \right)$$

w obszarze: $0 \leq x \leq L$ oraz $t \geq 0$.

Równanie typu parabolicznego:

z warunkiem początkowym $h(x, t=0) = h_p(x)$ dla $0 \leq x \leq L$
oraz z warunkami brzegowymi typu Dirichleta na obu końcach przedziału:

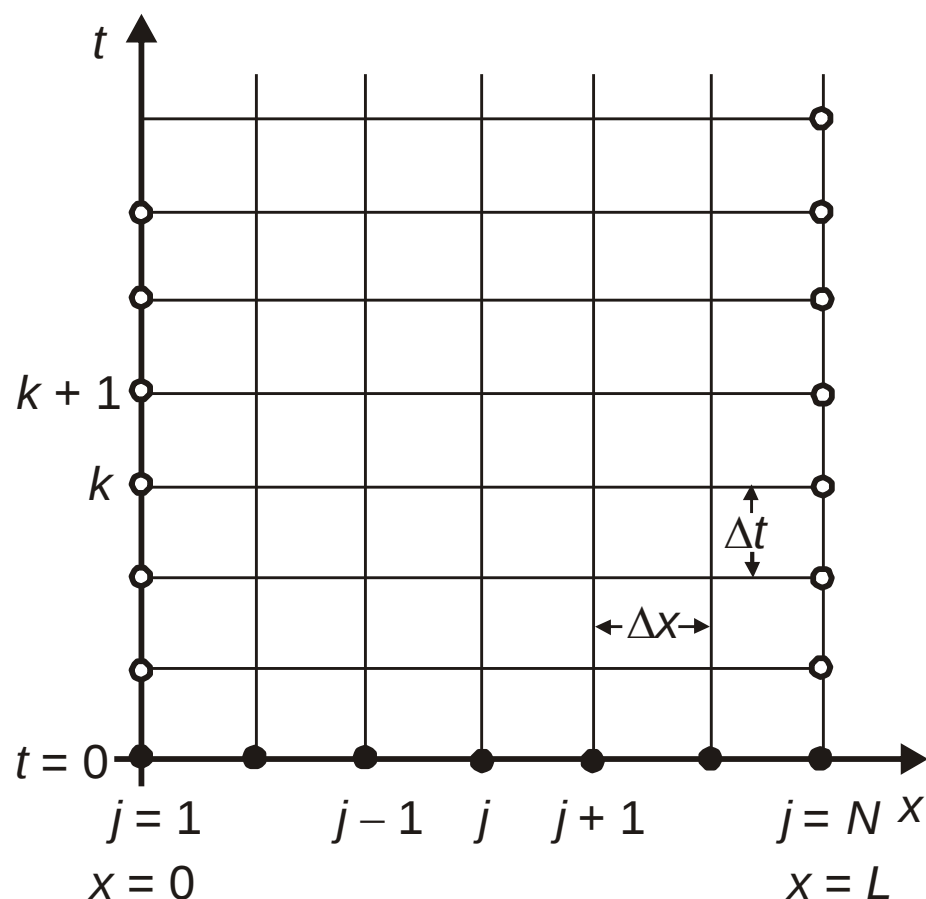
$$h(x=0, t) = h_0(t) \text{ i } h(x=L, t) = h_L(t) \text{ dla } t \geq 0$$



Rys. Warunki początkowe i brzegowe

Dyskretyzacja obszaru rozwiązania

Ciągły obszar zastępujemy obszarem dyskretnym, złożonym z punktów przecięcia się linii poziomych, poprowadzonych równoległe do osi x z odstępem Δt oraz linii pionowych, poprowadzonych równoległe do osi t z odstępem Δx .

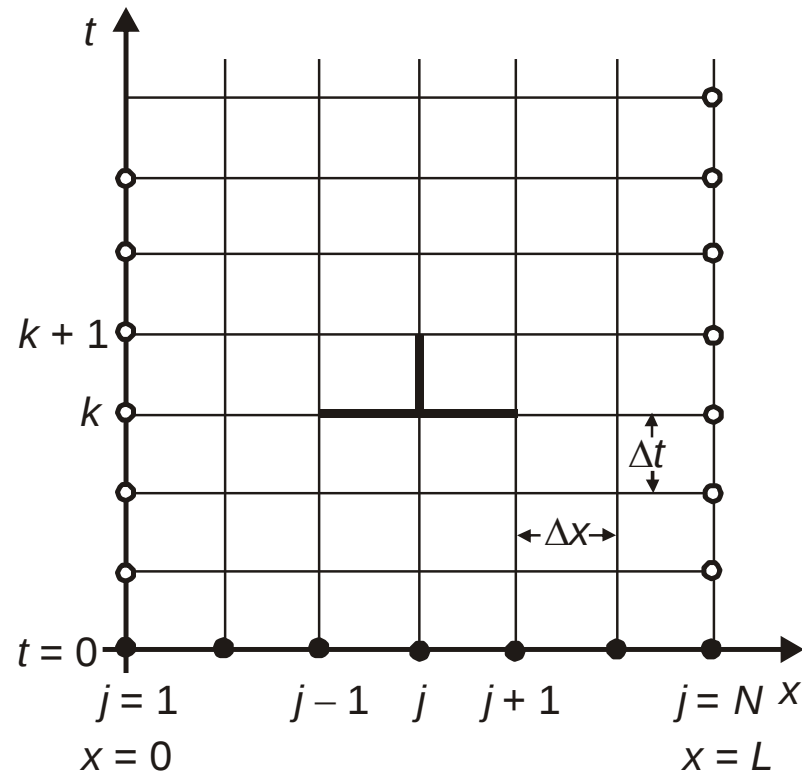


Rozwiązania poszukiwać będziemy w węzłach powstałej siatki prostokątnej.

- Z warunków początkowo-brzegowych znamy:
 - wartości funkcji $h(x, t)$ w węzłach na poziomej $t = 0$ (warunek. początkowy)
 - wartości funkcji $h(x, t)$ w węzłach na pionowej $x = 0$ i $x = L$ (warunki brzegowe).
- Współczynnik dyfuzji w ogólnym przypadku zależy od rozwiązania równania $D = D(h)$, więc układ równań algebraicznych aproksymujących równanie też będzie nieliniowy.
- Uproszczenie: przyjęcie stałego współczynnika dyfuzji $D = \text{const}$ prowadzi do standardowego równania dyfuzji ze stałym współczynnikiem:

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

a) Schemat jawny



$$\left. \frac{\partial h}{\partial t} \right|_j^k = \frac{h_j^{k+1} - h_j^k}{\Delta t}, \quad \left. \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right|_j^k = \frac{h_{j-1}^k - 2h_j^k + h_{j+1}^k}{\Delta x^2}$$

Po podstawieniu do równania różniczkowego otrzymujemy:

$$\frac{h_j^{k+1} - h_j^k}{\Delta t} = D \frac{h_{j-1}^k - 2h_j^k + h_{j+1}^k}{\Delta x^2}$$

W powyższym równaniu wartości funkcji h we wszystkich węzłach na poziomie k są znane – z warunku początkowego lub z poprzedniego kroku czasowego.

Równanie zawiera więc tylko jedną wartość niewiadomą h_j^{k+1}

$$h_j^{k+1} = h_j^k + C_d (h_{j-1}^k - 2h_j^k + h_{j+1}^k)$$

gdzie

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

jest dyfuzyjną liczbą Couranta.

Wzór ten stosujemy dla wszystkich węzłów wewnętrznych $2 \leq j \leq N-1$
Wartości h_1^{k+1} i h_N^{k+1} są znane z zadanych warunków brzegowych.
Powtarzając cykl obliczeń dla kolejnych wartości k uzyskujemy rozwiązanie dla dowolnego czasu $t > 0$.

Cechy schematu:

- Bardzo prosty algorytm obliczeń.
- Błąd aproksymacji rzędu **$O(\Delta t, \Delta x^2)$** .
- Schemat wymaga stosowania **ograniczonego kroku czasowego Δt** .
Jego dopuszczalna wielkość wynika z tzw. kryterium stabilności

$$C_d = \frac{D \cdot \Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2} \quad \rightarrow \quad \Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2D}$$

b) schemat niejawny

Rozpatrzmy ponownie liniowe równanie filtracji

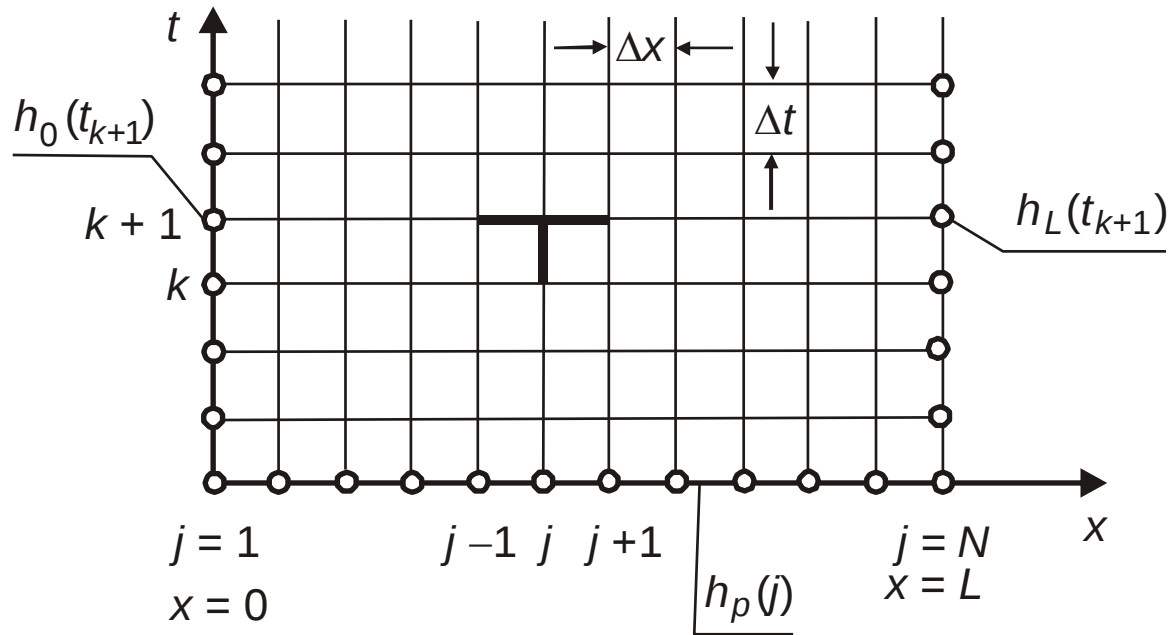
$$\frac{\partial h}{\partial t} = D \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}$$

z warunkiem początkowym

$$h(x, t=0) = h_p(x) \text{ dla } 0 \leq x \leq L$$

oraz z warunkami brzegowymi przedziału:

$$h(x=0, t) = h_0(t) \text{ i } h(x=L, t) = h_L(t) \text{ dla } t \geq 0$$



Zastąpmy pochodne w równaniu ilorazami różnicowymi w sposób następujący:

$$\left. \frac{\partial h}{\partial t} \right|_j^{k+1} = \frac{h_j^{k+1} - h_j^k}{\Delta t}, \quad \left. \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right|_j^{k+1} = \frac{h_{j-1}^{k+1} - 2h_j^{k+1} + h_{j+1}^{k+1}}{\Delta x^2}$$

Ilorazy wstawmy do równania różniczkowego. Otrzymamy:

$$\frac{h_j^{k+1} - h_j^k}{\Delta t} = D \frac{h_{j-1}^{k+1} - 2h_j^{k+1} + h_{j+1}^{k+1}}{\Delta x^2}$$

Równanie to można uporządkować, zapisując niewiadome po jednej, zaś wiadome po drugiej stronie znaku równości. Otrzymujemy

$$-C_d \cdot h_{j-1}^{k+1} + (1 + 2C_d)h_j^{k+1} - C_d h_{j+1}^{k+1} = h_j^k$$

W równaniu występują 3 niewiadome. Podobne równanie można napisać dla każdego węzła wewnętrznego $j=2, 3, \dots, N-1$.

Otrzymujemy układ $N-2$ równań algebraicznych liniowych. Układ zamykamy wprowadzając 2 równania wynikające z war. brzegowych:

$$h_1^{k+1} = h_0(t_{k+1}), \quad h_N^{k+1} = h_L(t_{k+1})$$

Układ ten można zapisać w notacji macierzowej:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{W},$$

gdzie: $\mathbf{A}$ – macierz współczynników,
 $\mathbf{X}$ – wektor niewiadomych,
 $\mathbf{W}$ – wektor prawych stron.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & & & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ & & & & & & a_N & b_N \end{bmatrix}, \quad \mathbf{X} = \begin{Bmatrix} h_1^{k+1} \\ h_2^{k+1} \\ h_3^{k+1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ h_{N-1}^{k+1} \\ h_N^{k+1} \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{W} = \begin{Bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ w_{N-1} \\ w_N \end{Bmatrix}$$

przy czym: $b_1 = 1, \quad c_1 = 0, \quad w_1 = h_0(t_{k+1})$

$$a_j = -C_d, \quad b_j = 1 + 2C_d, \quad c_j = -C_d, \quad w_j = h_j^k \\ \text{dla } j = 2, 3, \dots, N-1$$

$$a_N = 0, \quad b_N = 1, \quad w_N = h_L(t_{k+1})$$

Układ równań liniowych ma trójdagonalną macierz współczynników. Można go rozwiązać stosując algorytm Thomasa omówiony wcześniej.

Cechy schematu:

- Bardziej skomplikowany algorytm obliczeń.
- Błąd aproksymacji rzędu $\mathcal{O}(\Delta t, \Delta x^2)$.
- Schemat jest **bezwarunkowo stabilny**, tzn. nie ma ograniczeń na wielkości kroku całkowania w czasie Δt .

c) Schemat Cranka-Nicolsona

Rozpatrzmy ponownie liniowe równanie filtracji

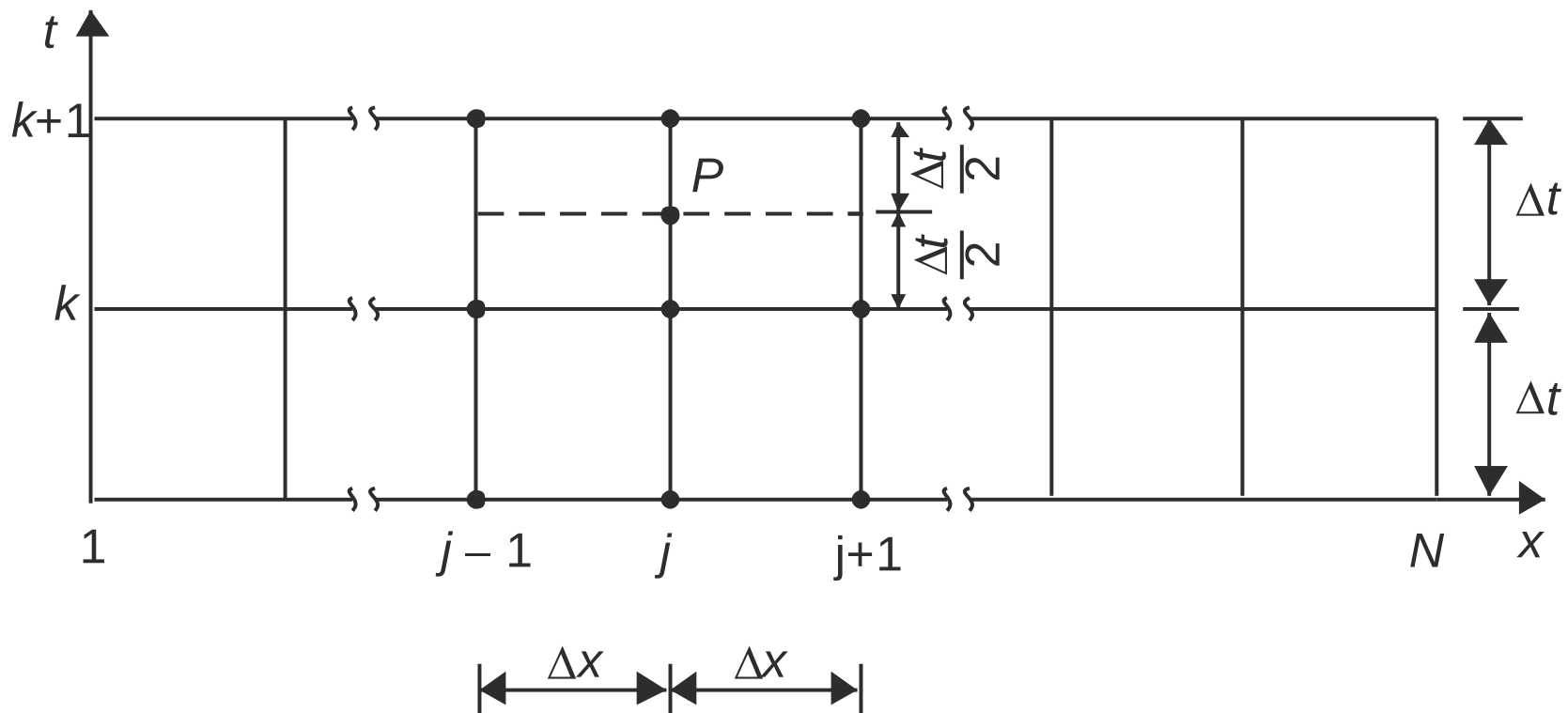
$$\frac{\partial h}{\partial t} = D \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}$$

z warunkiem początkowym

$$h(x, t=0) = h_p(x) \text{ dla } 0 \leq x \leq L$$

oraz z warunkami brzegowymi przedziału:

$$h(x=0, t) = h_0(t) \text{ i } h(x=L, t) = h_L(t) \text{ dla } t \geq 0$$



Rys. Siatka węzłów stosowana w schemacie Cranka-Nicolsona

W celu zwiększenia dokładności schematu pochodne aproksymuje się w punkcie P w następujący sposób:

$$\left. \frac{\partial h}{\partial t} \right|_p = \frac{h_j^{k+1} - h_j^k}{\Delta t}$$

$$\left. \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right|_p \approx \frac{1}{2} \left(\left. \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right|_j^k + \left. \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right|_j^{k+1} \right) \approx \frac{1}{2} \left(\frac{h_{j-1}^k - 2h_j^k + h_{j+1}^k}{\Delta x^2} + \frac{h_{j-1}^{k+1} - 2h_j^{k+1} + h_{j+1}^{k+1}}{\Delta x^2} \right)$$

Podstawiając powyższe aproksymacje do równania filtracji otrzymujemy równanie algebraiczne

$$\frac{h_j^{k+1} - h_j^k}{\Delta t} = \frac{D}{2} \left(\frac{h_{j-1}^k - 2h_j^k + h_{j+1}^k}{\Delta x^2} + \frac{h_{j-1}^{k+1} - 2h_j^{k+1} + h_{j+1}^{k+1}}{\Delta x^2} \right)$$

Po wprowadzeniu znanej już dyfuzyjnej liczby Couranta i po uporządkowaniu równanie ma postać:

$$-\frac{C_d}{2}h_{j-1}^{k+1} + (1 + C_d)h_j^{k+1} - \frac{C_d}{2}h_{j+1}^{k+1} = h_j^k + \frac{C_d}{2}(h_{j-1}^k - 2h_j^k + h_{j+1}^k)$$

Podobne równanie można napisać dla każdego węzła wewnętrznego $j=2, 3, \dots, N-1$.

Otrzymujemy układ $N-2$ równań algebraicznych liniowych, który zamykamy wprowadzając 2 równania wynikające z warunków brzegowych:

$$h_1^{k+1} = h_0(t_{k+1}), \quad h_N^{k+1} = h_L(t_{k+1})$$

Układ ten można zapisać w notacji macierzowej:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{W},$$

gdzie: $\mathbf{A}$ – macierz współczynników,
 $\mathbf{X}$ – wektor niewiadomych,
 $\mathbf{W}$ – wektor prawych stron.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & & & a_{N-1} & b_{N-1} & c_{N-1} \\ & & & & & & a_N & b_N \end{bmatrix}, \quad \mathbf{X} = \begin{Bmatrix} h_1^{k+1} \\ h_2^{k+1} \\ h_3^{k+1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ h_{N-1}^{k+1} \\ h_N^{k+1} \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{W} = \begin{Bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ w_{N-1} \\ w_N \end{Bmatrix}$$

Elementy macierzy i wektorów są równe:

$$b_1 = 1, \quad c_1 = 0, \quad w_1 = h_0(t_{k+1}),$$

$$a_j = -\frac{C_d}{2}, \quad b_j = 1 + C_d, \quad c_j = -\frac{C_d}{2} \quad (j = 2, 3, \dots, N-1)$$

$$w_j = h_j^k + \frac{C_d}{2}(h_{j-1}^k - 2h_j^k + h_{j+1}^k) \quad (j = 2, 3, \dots, N-1)$$

$$a_N = 0, \quad b_N = 1, \quad w_N = h_L(t_{k+1})$$

Rozwiązując układ metodą Thomasa, otrzymujemy poszukiwane wartości funkcji h we wszystkich węzłach na poziomie czasu $k + 1$.

Cechy schematu:

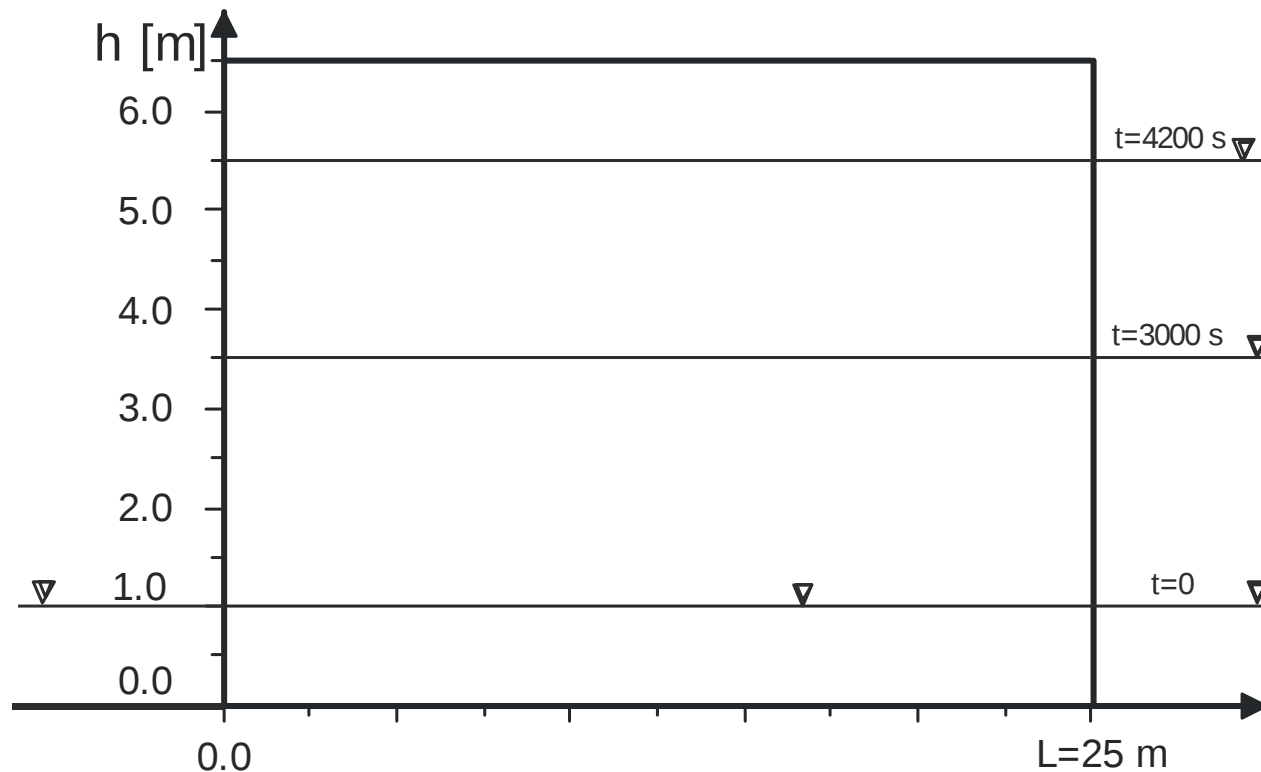
- Bardziej skomplikowany algorytm obliczeń.
- Błąd aproksymacji rzędu $\mathcal{O}(\Delta t^2, \Delta x^3)$.
- Schemat jest **bezwarunkowo stabilny**, tzn. nie ma ograniczeń na wielkości kroku całkowania w czasie Δt .

Schemat Cranka - Nicolsona jest najczęściej stosowanym schematem rozwiązywania równania dyfuzji.

Przykład rozwiązania równania dyfuzji – filtracja przez groblę

Zadanie:

Prostokątna grobla posadowiona na gruncie nieprzepuszczalnym i wykonana z gruntu przepuszczalnego oddziela 2 zbiorniki.



Wyznaczyć położenia zwierciadła wody w grobli wywołane zmianami napełnienia jednego ze zbiorników.

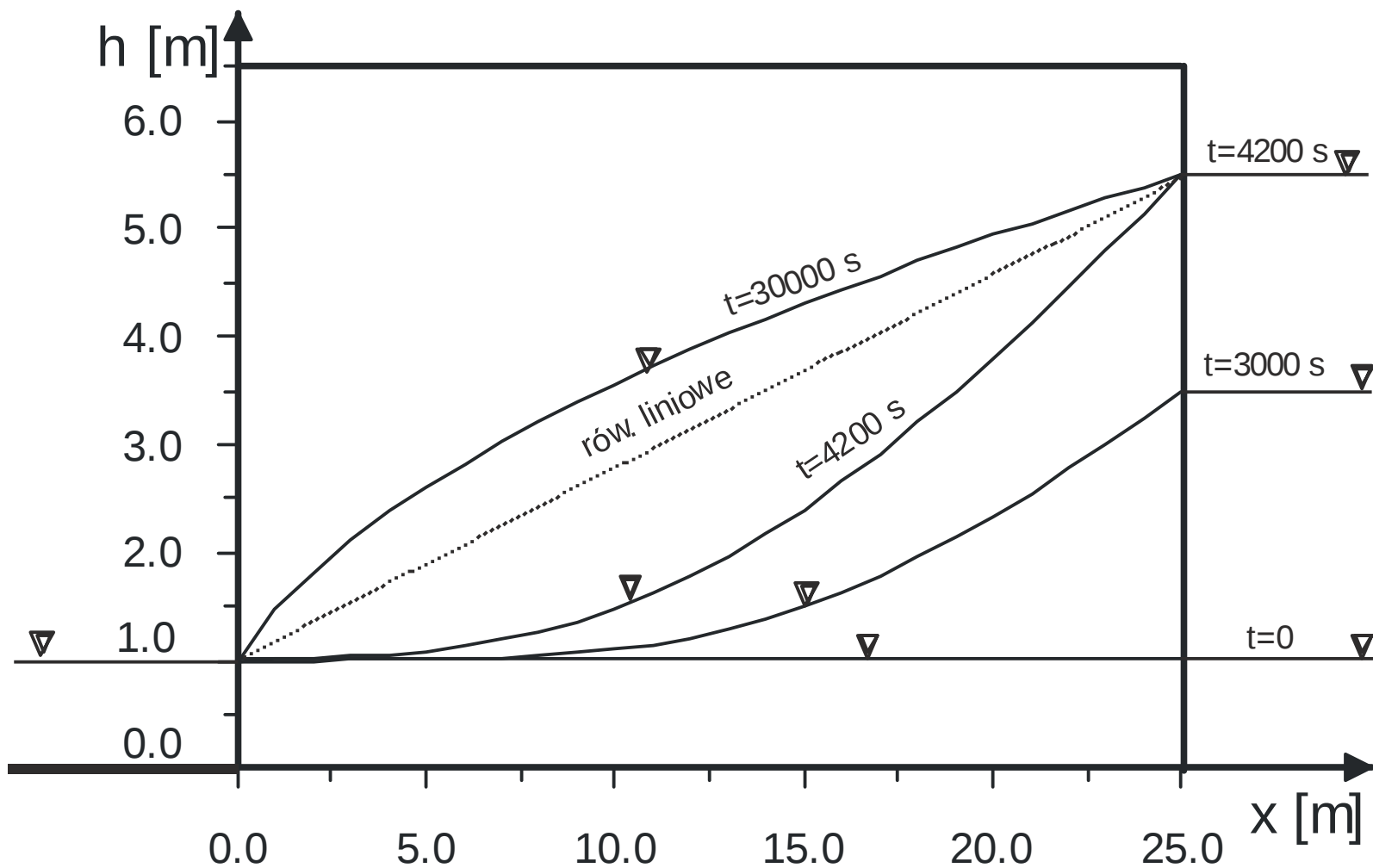
Współczynnik dyfuzji opisany jest następującą formułą:

$$D = \frac{k \cdot (h - z)}{\mu}$$

Dane: $z(x) = 0.0$ m – rzędna spągu warstwy wodonośnej,
 $h(x, t=0) = 1.0$ m – wysokość piezometryczna,
 $L = 25.0$ m – szerokość grobli,
 $k = 0.002$ m/s – współczynnik filtracji,
 $\mu = 0.20$ – porowatość efektywna,
 $\Delta x = 1.0$ m – krok przestrzenny,
 $\Delta t = 300$ s – krok czasowy.

Metoda rozwiązania:

metoda różnic skończonych – schemat Cranka-Nicolsona.



Rys. Wyliczone układy zwierciadła wody w grobli

Rozwiązanie dwuwymiarowego równania dyfuzji metodą różnic skonczonych

Rozpatrujemy dwuwymiarowe równanie dyfuzji:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) + w$$

z zdefiniowanymi warunkami granicznymi, w którym:

$h = h(x, y, t)$ – rzędna swobodnego zwierciadła wody gruntowej,

$w = w(x, y, t)$ – zasilanie zewnętrzne niezależne od h ,

D - współczynnik dyfuzji,

x, y – współrzędne przestrzenne,

t – czas.

Równanie typu parabolicznego.

Problem rozwiązania formułujemy jako zagadnienie początkowo-brzegowe:

Poszukujemy funkcji $h(x, y, t)$, która w obszarze rozwiązania spełni równanie oraz:

- warunek początkowy

$$h(x, y, t = 0) = h_p(x, y)$$

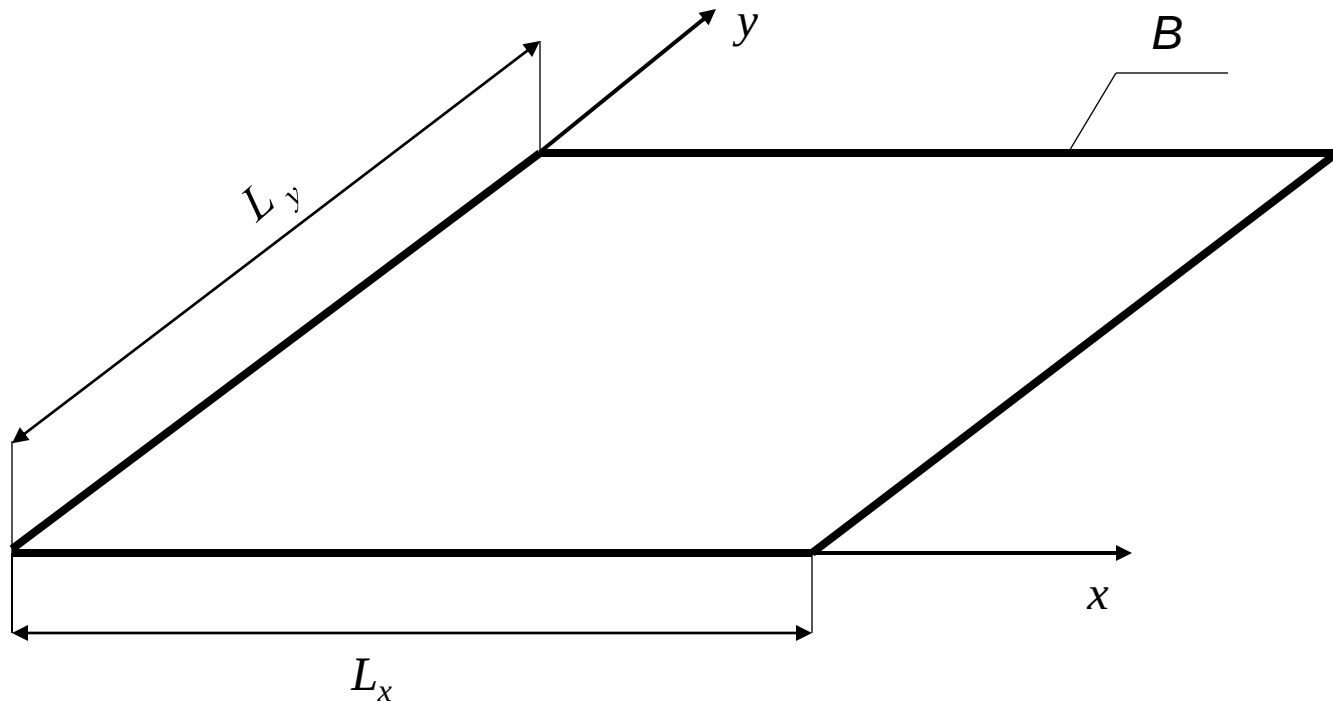
- warunki brzegowe:

$$H(x_B, y_B, t) = h_B(t)$$

gdzie B oznacza brzeg obszaru.

Założenia:

- Rozważany obszar ma kształt prostokąta o wymiarach L_x i L_y
 $0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad t \geq 0;$
- Przyjmujemy stały współczynnik dyfuzji: $D = \text{const};$
- Pomijamy człon źródłowy czyli $w = 0.$



Rys. Szkic obszaru rozwiązywania równania filtracji

Obszar ograniczony brzegiem B pokrywamy siatką węzłów o wymiarach $\Delta x \times \Delta y$.

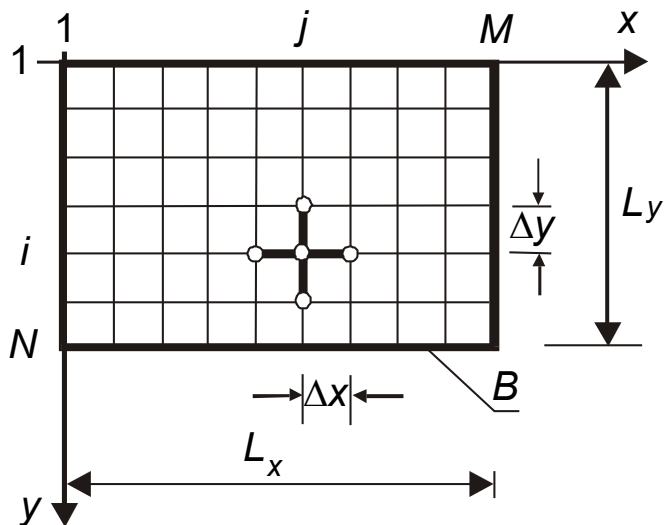
Siatkę tworzy $N \times M$ węzłów (N – liczba wierszy, M – liczba kolumn).

Równanie można rozwiązać:

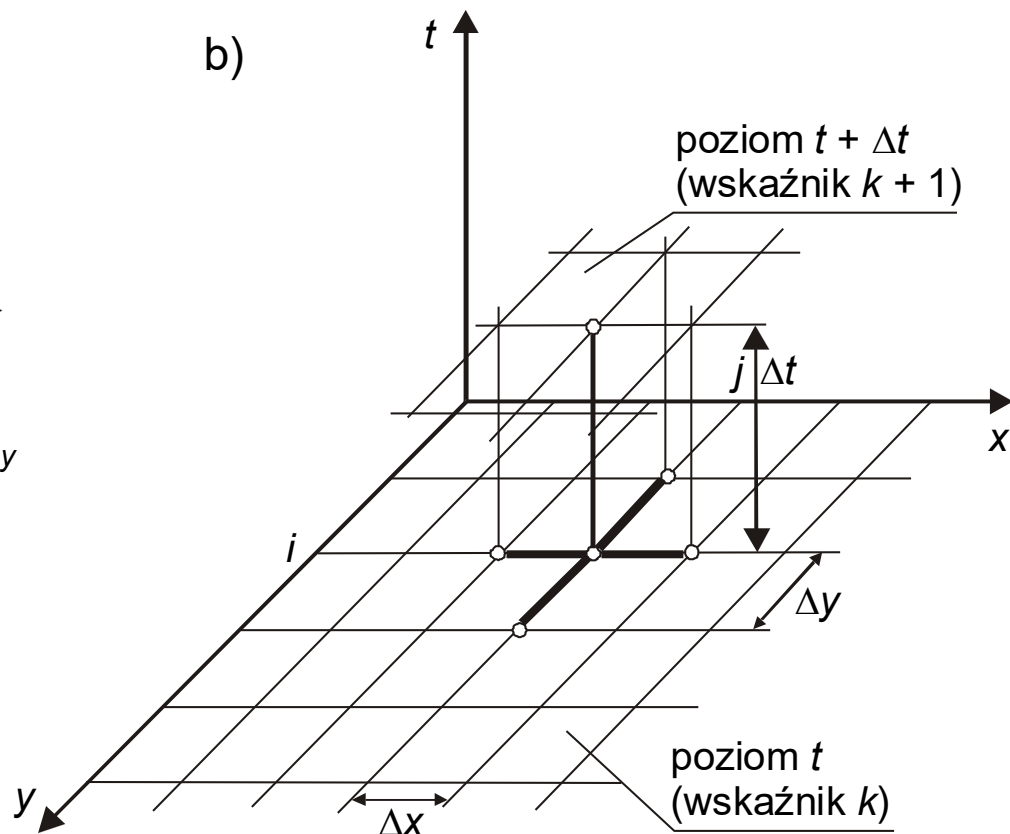
- a) schematem jawnym,
- b) schematem niejawnym,
- c) schematem naprzemiennych kierunków.

Ad a) Schemat jawny

a)



b)



Rys. Siatka stosowana w jawnym schemacie aproksymacji różnicowej 2D równania dyfuzji

Aproksymację pochodnej względem czasu wykonujemy jak dla równania jednowymiarowego. Pochodne II rzędu aproksymujemy na poziomie t .

Ponieważ odległości Δx i Δy są stałe, dowolny węzeł siatki można zidentyfikować poprzez indeksy i oraz j (patrz rys.).

Indeks k oznacza poziom czasowy t .

W efekcie otrzymujemy w węźle (i, j) równanie algebraiczne

$$\frac{h_{i,j}^{k+1} - h_{i,j}^k}{\Delta t} = D \left(\frac{h_{i,j+1}^k - 2h_{i,j}^k + h_{i,j-1}^k}{(\Delta x)^2} + \frac{h_{i+1,j}^k - 2h_{i,j}^k + h_{i-1,j}^k}{(\Delta y)^2} \right)$$

gdzie: i, j – indeksy węzła określające jego położenie względem osi x, y ,
 k – indeks poziomu czasowego.

W otrzymanym równaniu występuje tylko jedna niewiadoma:

$$h_{i,j}^{k+1} = h_{i,j}^k + \Delta t \cdot D \left(\frac{h_{i,j+1}^k - 2h_{i,j}^k + h_{i,j-1}^k}{(\Delta x)^2} + \frac{h_{i+1,j}^k - 2h_{i,j}^k + h_{i-1,j}^k}{(\Delta y)^2} \right)$$

Formuła jest bardzo prosta. Jest to liniowe równanie algebraiczne, które obowiązuje we wszystkich węzłach wewnętrznych obszaru, tzn. dla $i = 2, 3, \dots, N-1$; $j = 2, 3, \dots, M-1$.

W węzłach brzegowych wartości h określają zadane warunki brzegowe.

W praktyce bardzo często stosuje się siatkę kwadratową. Przyjmując jednakowy krok przestrzenny siatki, tj. $\Delta x = \Delta y = \Delta$, otrzymujemy

$$h_{i,j}^{k+1} = h_{i,j}^k + C_d (h_{i,j+1}^k + h_{i,j-1}^k + h_{i+1,j}^k + h_{i-1,j}^k - 4h_{i,j}^k)$$

gdzie

$$C_d = \frac{D \cdot \Delta t}{\Delta^2}$$

jest dyfuzyjną liczbą Couranta.

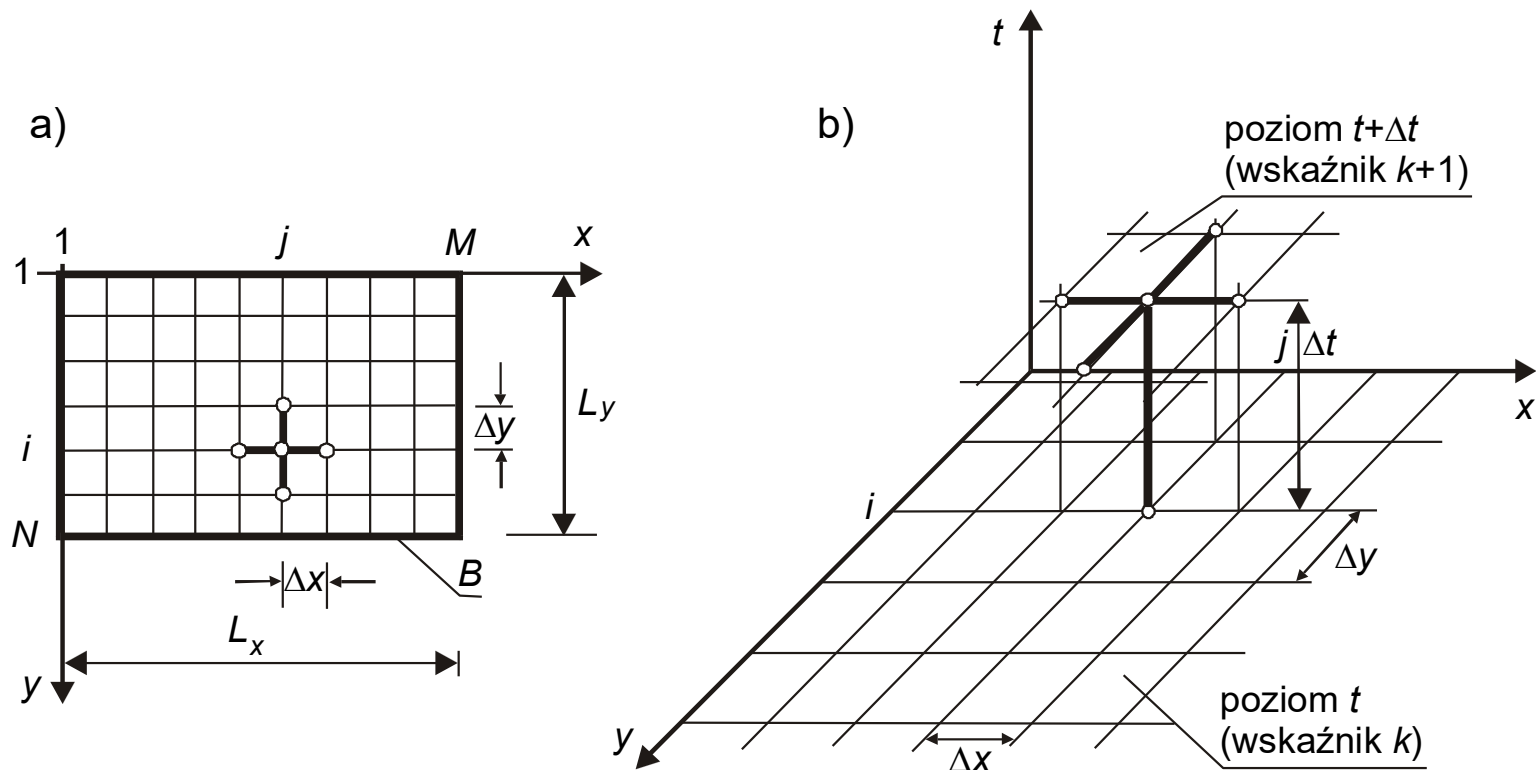
Schemat ten, jak każdy schemat jawny, jest warunkowo stabilny. Dla zachowania stabilności musi być spełniona relacja

$$C_d \leq 0,25$$

z której wynika warunek:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta^2}{4D}$$

Ad b) Schemat niejawny



W tym przypadku aproksymację pochodnych II rzędu w równaniu dyfuzji wykonujemy na poziomie czasu $k + 1$, czyli w chwili $t + \Delta t$.

Jest to więc poziom czasowy, na którym poszukujemy wartości funkcji h .

Będziemy mieli odpowiednio (patrz rys.):

$$\left. \frac{\partial h}{\partial t} \right|_{i,j}^{k+1} \approx \frac{h_{i,j}^{k+1} - h_{i,j}^k}{\Delta t}$$

$$\left. \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right|_{i,j}^{k+1} \approx \frac{h_{i,j-1}^{k+1} - 2h_{i,j}^{k+1} + h_{i,j+1}^{k+1}}{\Delta x^2}$$

$$\left. \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right|_{i,j}^{k+1} \approx \frac{h_{i-1,j}^{k+1} - 2h_{i,j}^{k+1} + h_{i+1,j}^{k+1}}{\Delta y^2}$$

Przy założeniu, że siatka węzłów jest kwadratowa, o wymiarach $\Delta x = \Delta y = \Delta$, po wstawieniu powyższych aproksymacji do równania otrzymujemy:

$$-h_{i,j-1}^{k+1} - h_{i,j+1}^{k+1} - h_{i-1,j}^{k+1} - h_{i+1,j}^{k+1} + (4 + s)h_{i,j}^{k+1} = sh_{i,j}^k$$

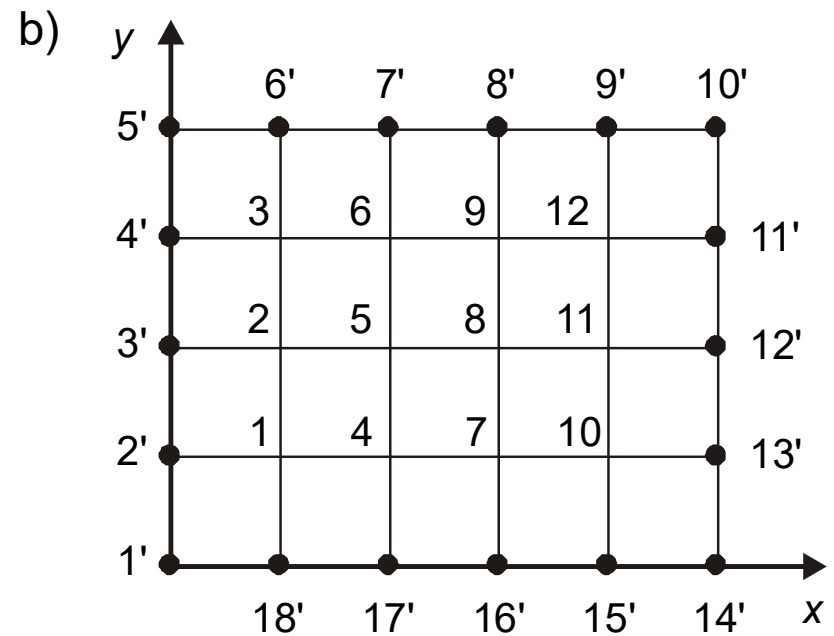
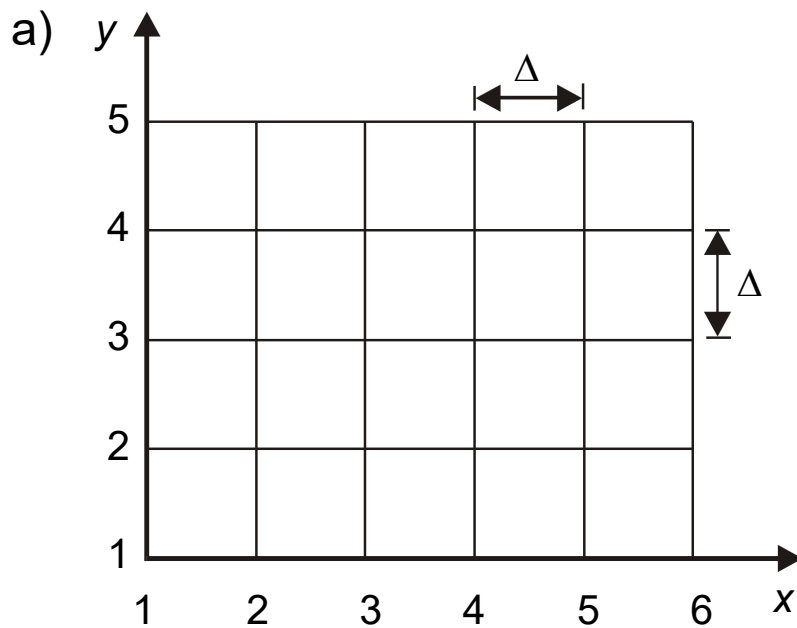
gdzie

$$s = \frac{\Delta^2}{D \cdot \Delta t}$$

jest odwrotnością dyfuzyjnej liczby Couranta C_d .

W otrzymanym równaniu wartości z górnym indeksem $k+1$ są nieznane. Jednak równania tego typu można napisać dla każdego węzła wewnętrznego. Utworzą one układ równań o liczbie równań równej liczbie niewiadomych.

Przykładowa struktura układu dla siatki węzłów, w której występuje $N = 5$ wierszy i $M = 6$ kolumn, co razem daje 30 węzłów. Wymiary oczek są równe $\Delta \times \Delta$ a zadane warunki brzegowe są typu Dirichleta.



Numeracja węzłów w przyjętej siatce

W każdym węźle na obwodzie obszaru znane są wartości funkcji h . Definiują je zadane warunki brzegowe Dirichleta.

Dla ułatwienia konstrukcji układu zamieńmy dwuindeksowy system oznaczeń węzłów jednym indeksem, który określa kolejny numer węzła w przyjętym sposobie numeracji. Numerację wykonujemy wzdłuż pionowych linii, kontynuując ją od dołu w górę.

Wydzielmy węzły brzegowe, oznaczając ich numery dodatkowym symbolem „prim” (patrz rys.). W węzłach tych wartość funkcji określają zadane warunki brzegowe. Wewnątrz obszaru występuje 12 węzłów, w których będziemy poszukiwali wartości h .

Dla każdego węzła wewnętrznego można napisać wyprowadzone równanie aproksymujące. Równania utworzą układ, który można zapisać w postaci:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{h}^{k+1} = \mathbf{W}.$$

4+s	-1		-1								
-1	4+s	-1		-1							
	-1	4+s			-1						
-1			4+s	-1		-1					
	-1		-1	4+s	-1		-1				
		-1		-1	4+s			-1			
			-1			4+s	-1		-1		
				-1		-1	4+s	-1		-1	
					-1		-1	4+s			-1
						-1			4+s	-1	
							-1		-1	4+s	-1
								-1		-1	4+s

*

=

h_1^{k+1}	$sh_1^k + h_{2'} + h_{18'}$
h_2^{k+1}	$sh_2^k + h_{3'}$
h_3^{k+1}	$sh_3^k + h_{4'} + h_{6'}$
h_4^{k+1}	$sh_4^k + h_{17'}$
h_5^{k+1}	sh_5^k
h_6^{k+1}	$sh_6^k + h_{7'}$
h_7^{k+1}	$sh_7^k + h_{16'}$
h_8^{k+1}	sh_8^k
h_9^{k+1}	$sh_9^k + h_{8'}$
h_{10}^{k+1}	$sh_{10}^k + h_{13'} + h_{15'}$
h_{11}^{k+1}	$sh_{11}^k + h_{12'}$
h_{12}^{k+1}	$sh_{12}^k + h_{9'} + h_{11'}$

Cechy układu równań:

- Macierz współczynników układu jest macierzą pasmową rzadką.
- Szerokość pasma zależy od przyjętego sposobu numerowania węzłów.
- Numeracja wzdłuż linii transwersalnych (poprzecznych) do dłuższej osi daje szerokość minimalną.
- W praktycznych zagadnieniach układ ma duże rozmiary (tysiące węzłów) więc do rozwiązywania stosuje się metody iteracyjne
- Schemat jest absolutnie stabilny (nie ma ograniczeń co do wartości Δt).
- Macierz współczynników ma dominującą główną przekątną.

Wada schematu:

konieczność rozwiązywania układu równań o dużych wymiarach.

Przykład:

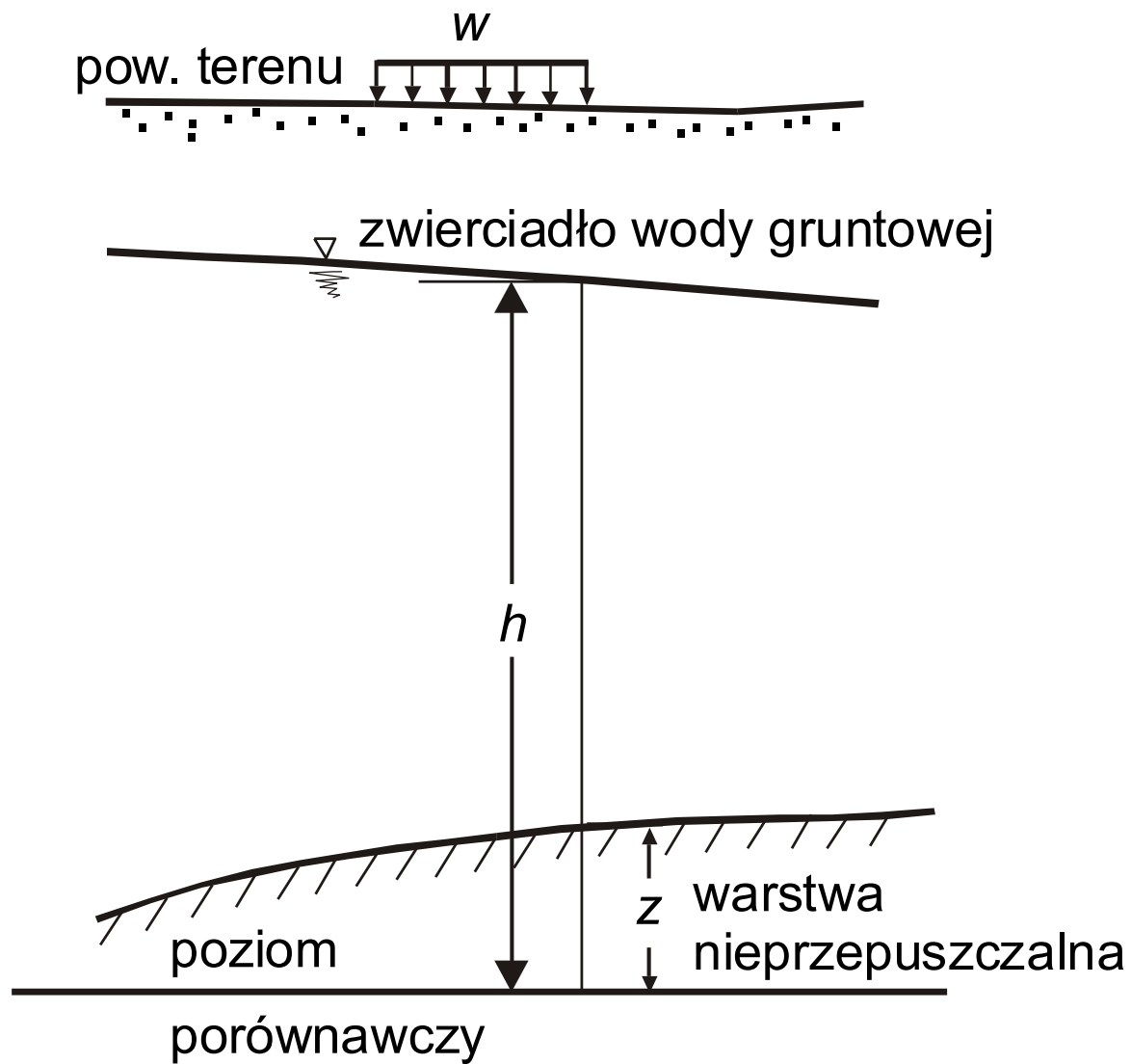
Ewolucja zwierciadła wody gruntowej pod wpływem infiltracji

$$\frac{\partial h}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) + w$$

gdzie: $h(x, y, t)$ – miąższość warstwy wodonośnej,
 D – współczynnik dyfuzji,
 w – człon źródłowy reprezentujący zasilanie zewnętrzne,
 x, y – współrzędne przestrzenne,
 t – czas

Zjawisko:

Zwierciadło wody ewoluuje w czasie i w przestrzeni pod wpływem poboru wody z warstwy wodonośnej bądź jej zasilania zewnętrznego.



Rys. Filtracja obszarowa ze swobodnym zwierciadłem

Do równania wstawiamy zależności:

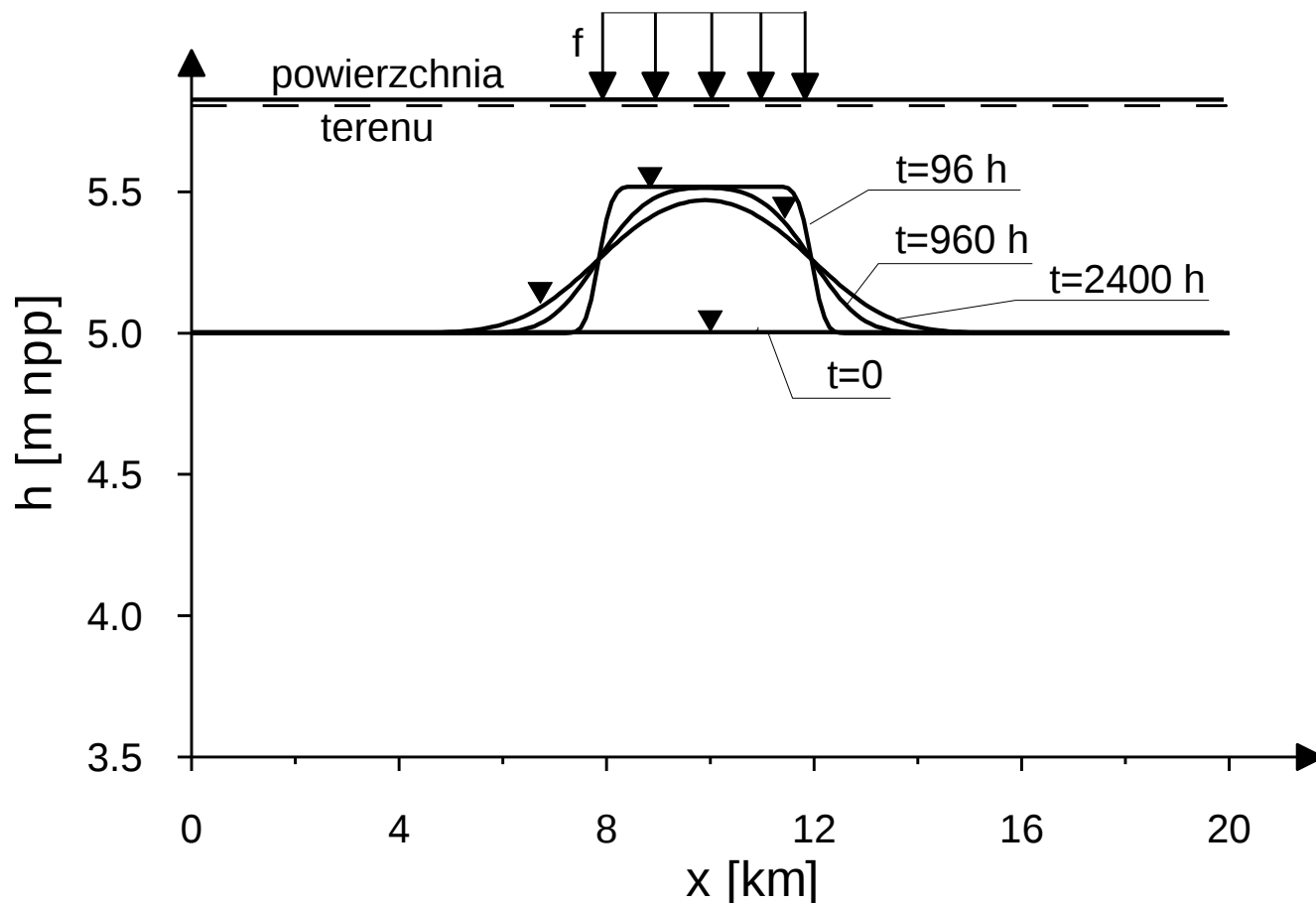
$$D = \frac{k \cdot (h - z)}{\mu} \qquad w = \frac{f}{\mu}$$

gdzie: $h(x, y, t)$ – miąższość warstwy wodonośnej,
 k – współczynnik filtracji,
 f – natężenie infiltracji wody opadowej,
 μ – porowatość,
 z – rzędna spągu warstwy nieprzepuszczalnej,

2D równanie filtracji ze swobodną powierzchnią rozwiązano na ograniczonym obszarze o wymiarach 20x20 km przyjmując opad atmosferyczny wywołujący infiltrację o stałym natężeniu f w okresie 48 h.

Poszczególne krzywe ilustrują ewolucję w czasie swobodnego zwierciadła wody pod wpływem zasilania wód gruntowych wodą infiltrującą.

W miarę upływu czasu, zwierciadło zmierza do stanu początkowego.



Rys. Ewolucja w czasie zwierciadła wody wzdłuż centralnej osi obszaru.

c) Rozwiązanie metodą naprzemiennych kierunków

Poprzednie schematy - bezpośrednie przejście z poziomu czasu t na poziom $t + \Delta t$.

Metoda naprzemiennych kierunków - przejście na poziom czasu $t + \Delta t$ po wykonaniu obliczeń na poziomie pośrednim $t + \Delta t/2$.

Pomimo dwóch etapów obliczeń w jednym kroku czasowym Δt , metoda jest bardziej ekonomiczna.

Jest ona jednym z wariantów tzw. techniki dekompozycji, która umożliwia sprowadzenie rozwiązania równania wielowymiarowego do rozwiązania ciągu równań jednowymiarowych.

Punkt wyjścia – właściwość całki oznaczonej

Scałkowanie równania filtracji:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right)$$

w czasie daje wynik

$$h(x, y, t + \Delta t) - h(x, y, t) = \int_t^{t+\Delta t} D \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) dt$$

który można zapisać w równoważnej postaci

$$h(x, y, t + \Delta t) = h(x, y, t) + \underbrace{\int_t^{t+\Delta t/2} \left(D \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + D \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) dt + \int_{t+\Delta t/2}^{t+\Delta t} \left(D \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + D \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) dt}_{\text{ }}$$

Wprowadzając oznaczenie

$$h(x, y, t + \Delta t/2) = h(x, y, t) + \int_t^{t+\Delta t/2} \left(D \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + D \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) dt$$

równanie zapisujemy następująco

$$h(x, y, t + \Delta t) = h(x, y, t + \Delta t/2) + \int_{t+\Delta t/2}^{t+\Delta t} \left(D \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + D \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) dt$$

Efekt

przejście z poziomu czasowego t na poziom $t + \Delta t$ odbywa się dwuetapowo:

- 1) z t na $t + \Delta t/2$,
- 2) z $t + \Delta t/2$ na $t + \Delta t$.

- zmienne ciągłe zastępuje się odpowiednimi indeksami,
- pochodne pod całką zastępuje się ilorazami różnicowymi na poziomie $t + \Delta t/2$ względem x oraz na poziomie t względem y ,
- całki oblicza się metodą prostokątów,

Pierwszy etap obliczeń

Aproksymacja równania pierwszego w węźle (i, j) :

$$\frac{h_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} - h_{i,j}^k}{\Delta t} = \frac{D}{2} \left(\frac{h_{i,j+1}^{k+\frac{1}{2}} - 2h_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} + h_{i,j-1}^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta x^2} + \frac{h_{i+1,j}^k - 2h_{i,j}^k + h_{i-1,j}^k}{\Delta y^2} \right)$$

Wskaźnik $k + 1/2$ - wartości na poziomie $t + \Delta t/2$.

Przy siatce kwadratowej: $\Delta x = \Delta y = \Delta$ otrzymuje się:

$$h_{i,j-1}^{k+\frac{1}{2}} - (2+s)h_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} + h_{i,j+1}^{k+\frac{1}{2}} = P^k$$

gdzie: $s = \frac{2\Delta^2}{D\Delta t} \quad P^k = -h_{i+1,j}^k + (2-s)h_{i,j}^k - h_{i-1,j}^k$

Równanie zawiera 3 niewiadome - wartości h w trzech kolejnych węzłach danego wiersza.

Równanie zapisujemy dla każdego węzła wewnętrznego: $j=2, 3, \dots, M-2$.

Dla każdego wiersza i otrzymuje się układ $M-2$ równań z $M-2$ niewiadomymi. W węzłach $j=1$ oraz $j=M$ wartości h są zadane.

Układ z macierzą trójdagonalną - rozwiązujemy metodą Thomasa.

Postępując analogicznie z każdym wierszem oblicza się wartości h we wszystkich węzłach na poziomie czasu $t+\Delta t$.

Drugi etap obliczeń

Aproksymacja równania:

$$\frac{h_{i,j}^{k+1} - h_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta t} = \frac{D}{2} \left(\frac{h_{i,j+1}^{k+\frac{1}{2}} - 2h_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} + h_{i,j-1}^{k+\frac{1}{2}}}{\Delta^2} + \frac{h_{i+1,j}^{k+1} - 2h_{i,j}^{k+1} + h_{i-1,j}^{k+1}}{\Delta^2} \right)$$

Niewiadome – wartości h na poziomie czasu $k+1$

$$h_{i-1,j}^{k+1} - (2+s)h_{i,j}^{k+1} + h_{i+1,j}^{k+1} = P^{k+\frac{1}{2}}$$

$$\text{gdzie } P^{k+\frac{1}{2}} = -h_{i,j+1}^{k+\frac{1}{2}} + (2-s)h_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} - h_{i,j-1}^{k+\frac{1}{2}}$$

Dla każdej kolumny zapisuje się $N - 2$ równania z $N - 2$ niewiadomymi.
W węzłach leżących na brzegu zadaje się warunki brzegowe.

Układy z macierzą trójdagonalną – rozwiązuje się metodą Thomasa.
Operację powtarza się dla wszystkich kolumn j ($1 < j < M$).

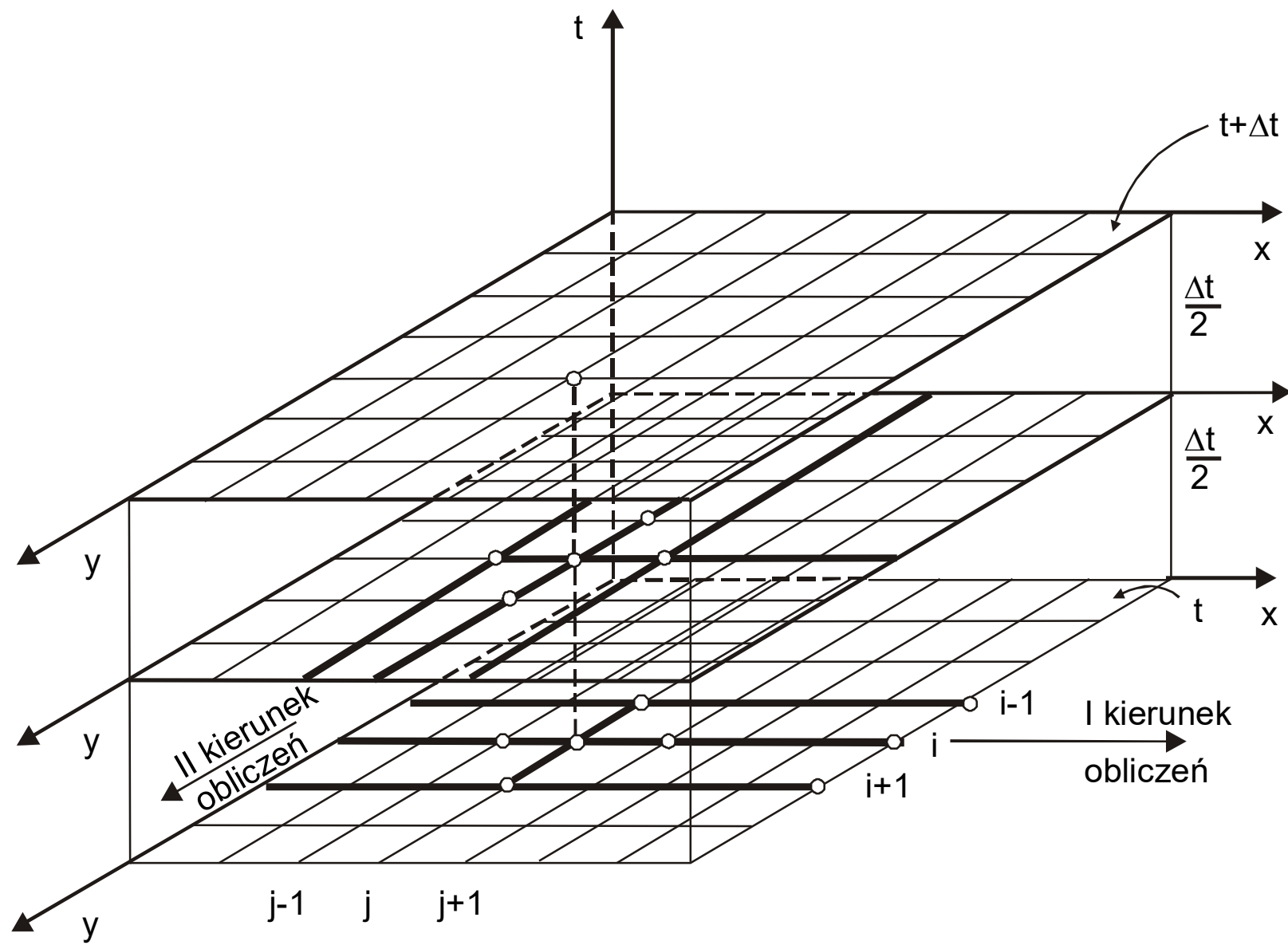
Wynik - poszukiwane rozwiązanie na poziomie $t + \Delta t$.

W następnym kroku czasowym cały cykl powtarza się.

Metoda ADI (od angielskiej nazwy *Alternating Direction Implicit method*).
W polskiej terminologii – **metoda naprzemiennych kierunków**.

Metoda jest bezwarunkowo stabilna.

Metoda jest bardzo ekonomiczna – w poszczególnych etapach rozwiązuje się sekwencje zagadnień jednowymiarowych, których dyskretyzacja prowadzi do układów algebraicznych równań liniowych z trójdagonalnymi macierzami współczynników.



Rys. Ilustracja postępowania w metodzie ADI

Przyczyna efektywności

Założenie:

równanie filtracji rozwiązujemy w obszarze prostokątnym pokrytym siatką węzłów o wymiarach $N \times M$.

Czas rozwiązania układu równań z pasmową macierzą współczynników jest proporcjonalny do liczby równań i kwadratu szerokości pasma.

Schemat niejawny

czas rozwiązania układu równań w każdym kroku czasowym jest proporcjonalny do

$$T_1 \sim (N \times M) \cdot n^2$$

gdzie: N – liczba wierszy,
 M – liczba kolumn,
 n – szerokość pasma.

Wykonanie obliczeń metodą naprzemiennych kierunków wymaga na każdym etapie rozwiązywania odpowiednio N oraz M układów z macierzami trójdziagonalnymi, czyli o szerokości pasma $n=3$. Czas obliczeń jest więc proporcjonalny do

$$T_2 \sim N \cdot (M \cdot 3^2) + M \cdot (N \cdot 3^2) = 18 \cdot N \cdot M$$

Stosunek czasów obliczeń wykonywanych w jednym kroku czasowym wymienionymi metodami jest równy

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{18 \cdot N \cdot M}{N \cdot M \cdot n^2} = \frac{18}{n^2}$$

Szerokość pasma n macierzy w schemacie niejawnym: rzędu 100.

Zaprogramowanie metody naprzemiennych kierunków jest bardzo łatwe gdy obszar rozwiązania jest regularny, najlepiej prostokątny.

W przypadku obszaru o dużej nieregularności zaprogramowanie algorytmu obliczeń jest kłopotliwe.

W przypadku rozwiązania równań nieliniowych może być generowany tzw. **błąd dekompozycji**.