

Analiza dokładności i stabilności numerycznego rozwiązania

Zbieżność

- Zbieżność jest podstawową cechą każdej metody numerycznej stosowanej do rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych
- Metoda zbieżna: w miarę redukowania wymiarów siatki węzłów rozwiązanie przybliżone zmierza do rozwiązania dokładnego

Warunek zbieżności:

$$f_j^n \rightarrow f(x_j, t_n), \quad \text{gdy} \quad \Delta x, \Delta t \rightarrow 0$$

gdzie:

f_j^n – przybliżona wartość funkcji f w węźle (j, n)

$f(x_j, t_n)$ – dokładna wartość funkcji f w węźle o współrzędnych (x_j, t_n)

$\Delta x, \Delta t$ – wymiary siatki węzłów

- Stwierdzenie, intuicyjnie oczywiste, zwykle trudno wykazać teoretycznie

- **Błąd rozwiązania** – różnica pomiędzy dokładnym rozwiązaniem równania różniczkowego cząstkowego a dokładnym rozwiązaniem układu równań algebraicznych:

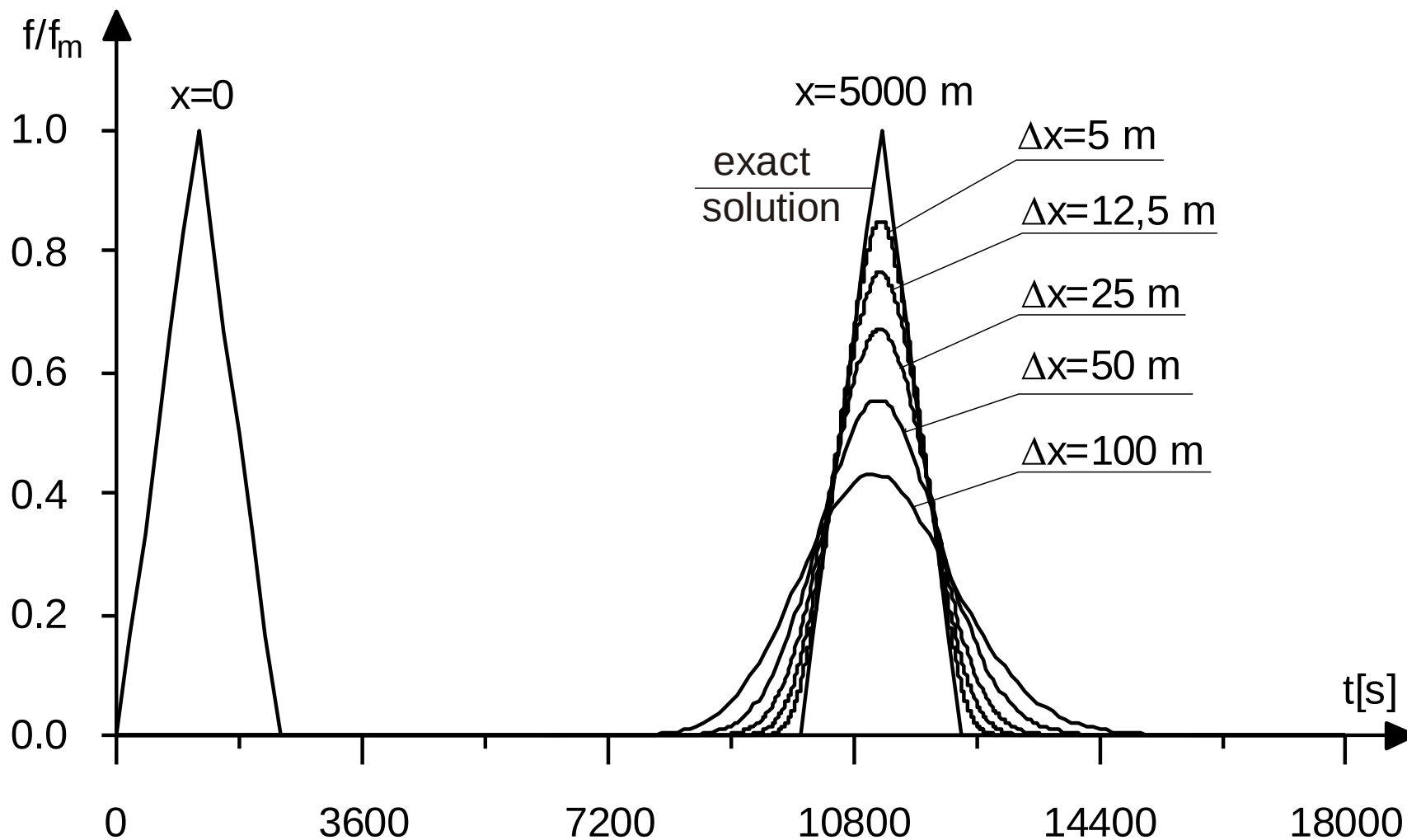
$$E_j^n = f(x_j, t_n) - f_j^n$$

- Błąd rozwiązania w węźle (j, n) zależy od dokładności aproksymacji tzn. od wymiarów siatki Δx i Δt oraz od pochodnych wyższych rzędów pominiętych w trakcie aproksymacji

Zadanie:

Rozpatrzmy równanie adwekcji rozwiązane schematem „up-wind” dla danych jak poprzednio.

Startując z $\Delta x = 100$ m i $\Delta t = 100$ s, co daje $C_a = 0.5$, siatkę węzłów systematycznie zagęszczamy w taki sposób, aby zachować stałą wartość liczby Couranta.



Rys. Wpływ zagęszczania siatki węzłów na dokładność rozwiązania równania adwekcji schematem „up-wind” przy $C_a = 0.5$

Wniosek:

- Schemat „up-wind” jest zbieżny ponieważ w miarę redukcji wymiarów siatki błąd rozwiązania systematycznie maleje.
- Zbieżność metody numerycznej została wykazana w sposób eksperymentalny - jeśli otrzymywane rozwiązanie jest coraz bliższe rozwiązaniu dokładnemu, to uzasadnione jest wnioskowanie o zbieżności zastosowanej metody numerycznej.
- Warunek stosowania metody – znajomość rozwiązania dokładnego równania
- Rozwiązując zagadnienia inżynierskie zwykle rozwiązanie dokładne równania nie jest znane. Z tego powodu zbieżność metody numerycznej wykazuje się w sposób pośredni.

W tym celu wykorzystuje się **twierdzenie Laxa**.

Twierdzenie Laxa:

Dla liniowego zagadnienia początkowego metoda numeryczna, która jest:

- zgodna
- stabilna

jest metodą zbieżną.

zgodność + stabilność = zbieżność

Twierdzenie Laxa jest bardzo użyteczne ponieważ stosunkowo łatwo dowodzi się zgodności i stabilności metody numerycznej.

Zgodność

- Metoda numeryczna jest zgodna, jeśli w każdym węźle równanie algebraiczne aproksymujące równanie różniczkowe jest z nim zgodne, gdy $\Delta x \rightarrow 0$ i $\Delta t \rightarrow 0$.
- Proces badania zgodności metody numerycznej przebiega odwrotnie do procesu aproksymacji – wartości węzłowe funkcji występujące w aproksymującym równaniu algebraicznym zastępuje się rozwinięciami w szereg Taylora wokół węzła w którym wykonuje się aproksymację.

Analiza zgodności schematu up-wind

Równanie adwekcji

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

aproxymuje następujące równanie algebraiczne

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

Funkcję dwóch zmiennych $f(x, t)$ rozwijamy w szereg Taylora:

$$f(x + \Delta x, t + \Delta t) = f(x, t) + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\Delta x \frac{\partial}{\partial x} + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \right)^m f(x, t)$$

czyli:

$$\begin{aligned} f(x + \Delta x, t + \Delta t) = & f_j^n + \Delta x \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_j^n + \Delta t \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_j^n + \\ & + \frac{\Delta x^2}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_j^n + \frac{\Delta t^2}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \right|_j^n + \Delta x \cdot \Delta t \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial t} \right|_j^n + \dots \end{aligned}$$

i wyznaczamy wartości funkcji f w węzłach $(j, n + 1)$ oraz $(j - 1, n)$:

$$f_j^{n+1} = f_j^n + \Delta t \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_j^n + \frac{\Delta t^2}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \right|_j^n + \dots$$

$$f_{j-1}^n = f_j^n - \Delta x \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_j^n + \frac{\Delta x^2}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_j^n + \dots$$

Wstawiamy je do równania aproksymującego równanie różniczkowe:

$$\frac{f_j^n + \cancel{\Delta t} \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_j^n + \frac{\cancel{\Delta t}^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \Big|_j^n + \dots - f_j^n}{\cancel{\Delta t}} + U \frac{f_j^n - \left(f_j^n - \cancel{\Delta x} \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_j^n + \frac{\cancel{\Delta x}^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \Big|_j^n + \dots \right)}{\cancel{\Delta x}} = 0$$

Po uproszczeniu otrzymujemy:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + U \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{U \cdot \Delta x}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} + \dots$$

Równanie to obowiązuje w węźle (j, n) – dla uproszczenia zapisu indeksy zostały pominięte.

Ogólniej:
$$\frac{\partial f}{\partial t} + U \frac{\partial f}{\partial x} = R(f)$$

gdzie
$$R(f) = -\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} - \frac{U \cdot \Delta x}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\Delta t^2}{6} \frac{\partial^3 f}{\partial t^3} - \frac{U \cdot \Delta x^2}{6} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + \dots$$

Człon $R(t)$ wynika z błędu obcięcia i zależy od zastosowanej metody rozwiązania. Można oczekiwać, że $R(t)$ będzie zanikać przy wymiarach siatki węzłów zmierzających do zera.

Fakt ten potwierdza postać tego członu z której wynika, że

$$\text{jeśli } \Delta x \rightarrow 0 \text{ i } \Delta t \rightarrow 0 \text{ to } R(f) \rightarrow 0$$

W konsekwencji równanie zmodyfikowane przez schemat „up-wind” staje się oryginalnym równaniem adwekcji.

Identyczne podejście pozwala zbadać zgodność dowolnego schematu numerycznego.

- **Stabilność:**

Metoda numeryczna jest stabilna jeśli małym zmianom danych wejściowych odpowiadają małe zmiany wyników.

Metoda stabilna wytłumia przypadkowe błędy obliczeń nie dopuszczając do ich kumulacji.

Metoda w której błędy obliczeń mają tendencję do kumulowania się jest metodą niestabilną.

Objawem niestabilności są gwałtowne oscylacje rozwiązania, które w przypadku równań powodują załamanie obliczeń.

Podział metod:

- a) absolutnie stabilne**
- b) warunkowo stabilne**
- c) absolutnie niestabilne**

Ad.a

Nie ma ograniczeń na wymiary siatki z powodu stabilności rozwiązania numerycznego.

Ad.b

Jest ograniczenie wymiarów siatki z powodu stabilności rozwiązania numerycznego.

Ad.c

Nie można uzyskać stabilnego rozwiązania numerycznego.

Badanie stabilności schematów numerycznych

- Analizę stabilności można przeprowadzić **metodą macierzową** (szczegóły – *Computational techniques for fluid dynamics* (Fletcher 1991)).
- Metoda najbardziej popularna – **metoda Neumanna**.

Numeryczne rozwiązanie jest przybliżeniem dokładnego rozwiązania równania różniczkowego cząstkowego. Zatem zawsze wystąpi różnica:

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

gdzie: E_j^n – błąd rozwiązania w węźle (j, n)

$f(x_j, t_n)$ – dokładne rozwiązanie w węźle (j, n)

f_j^n – przybliżone rozwiązanie w węźle (j, n)

Błąd ten wprowadzany jest w każdym węźle (j, n) ($j = 1, 2, 3, \dots, M$ oraz $n = 0, 1, 2, \dots$)

- W **metodzie Neumanna** błędy w węzłach na poziomie n rozwija się w skończony **szereg Fouriera**.
- O stabilności bądź niestabilności wnioskuje się badając zachowanie pojedynczej składowej szeregu przy przejściu z poziomu czasu n na poziom $n + 1$.

Szereg Fouriera pozwala wyrazić błąd w węźle x_j w następujący sposób:

$$E_j^n = \sum_{k=1}^K A_k^n \cdot e^{i \cdot k \cdot m \cdot j \cdot \Delta x}$$

gdzie: $j = 2, 3, \dots, M$ – indeks węzła

$i = (-1)^{1/2}$ – jednostka urojona

n – indeks poziomu czasowego

k – indeks składowej Fouriera

m – liczba falowa

Δx – przestrzenny wymiar siatki

A_k^n – wsp. Fouriera (amplituda składowej k na poziomie czasu n)

K – indeks o skończonej wartości

Przykład: Równanie adwekcji rozwiązane schematem „up-wind”

Schemat „up-wind” zapewni stabilne rozwiązanie liniowego równania adwekcji tylko, gdy liczba Couranta < 1 .

$$C_a \leq 1$$

Wymaganie to ogranicza maksymalną wartość kroku całkowania w czasie Δt , który można zastosować dla danego kroku przestrzennego Δx .

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{U}$$

Schemat „up-wind” jest schematem warunkowo stabilnym

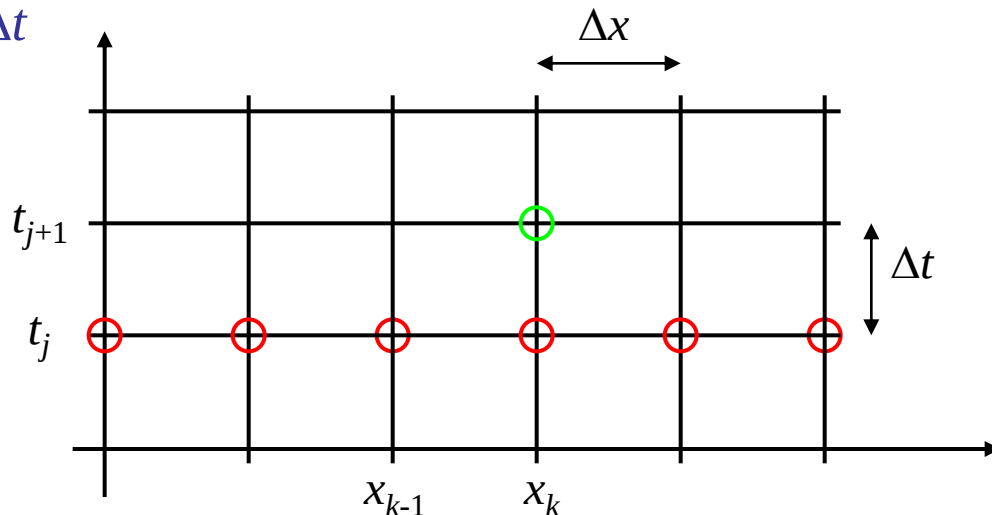
Rozwiązanie równania adwekcji metodą różnic skończonych

- Rozpatrujemy równanie adwekcji

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

z $C = \text{const}$ i z wcześniej zdefiniowanymi warunkami początkowo – brzegowymi

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



$$f_k^j = f(x_k, t_j)$$

Δt krok czasowy

Δx krok przestrzenny

- Metoda różnic skończonych - **schemat "upwind" (pod prąd):**

$$\frac{f_k^{j+1} - f_k^j}{\Delta t} + C \frac{f_k^j - f_{k-1}^j}{\Delta x} = 0$$

- Niewiadomą jest f_k^{j+1}

$$f_k^{j+1} = C_a \cdot f_{k-1}^j + (1 - C_a) \cdot f_k^j \quad C_a = \frac{C \cdot \Delta t}{\Delta x} \quad \text{liczba Couranta (adwekcyjna)}$$

$k = 1, 2, 3, \dots, M$

- właściwości numeryczne schematu „upwind”

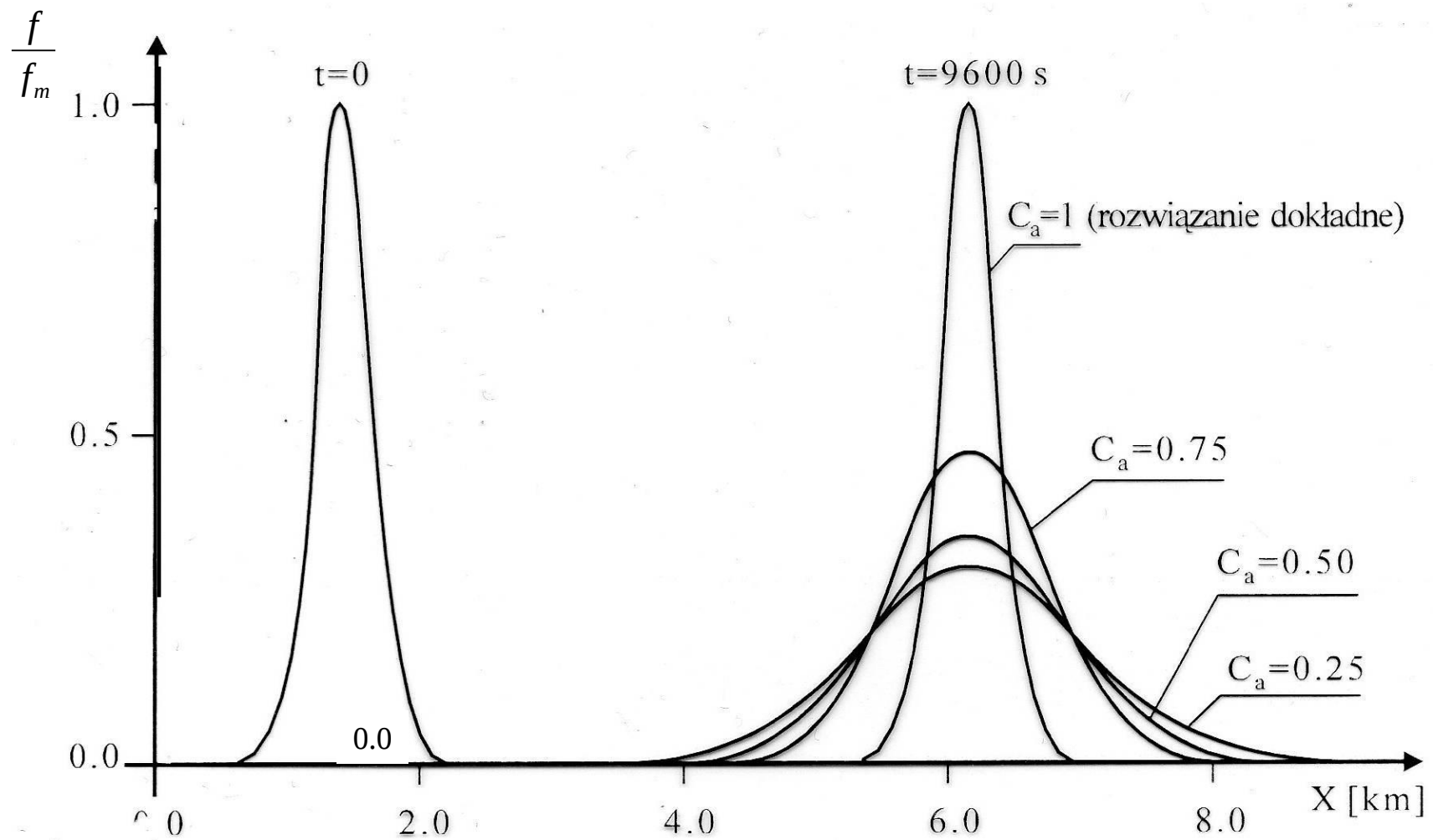
- schemat **warunkowo stabilny**
- przy $C_a = 1$ zapewnia dokładne rozwiązanie równania adwekcji
- przy $C_a > 1$ jest niestabilny
- przy $C_a < 1$ generuje dyfuzję numeryczną

Przykład

Rozwiązanie równania adwekcji metodą różnic skończonych

- dane
 - kanał prosty o stałym spadku dna i stałych przekrojach
 - $C = 0.5$ m/s
 - warunek początkowy - rozkład Gaussa o parametrach
 $s = 264$ m, $m = 1400$ m
 - warunki brzegowe: $f(x = 0, t) = f(x = L \rightarrow \infty, t) = 0$ dla $t \geq 0$

Rozwiązanie równania adwekcji ze stałą prędkością dla różnych C_a



Analiza dokładności rozwiązania

- Funkcję $f(x, t)$ rozwijamy w szereg Taylora w otoczeniu węzła (x_k, t_j) :

$$\begin{aligned} f(x, t) = & f_k^j + (x - x_k) \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_k^j + (t - t_j) \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_k^j + \\ & + \frac{(x - x_k)^2}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_k^j + \frac{(t - t_j)^2}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \right|_k^j + (x - x_k)(t - t_j) \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial t} \right|_k^j + \dots \end{aligned}$$

i wyznaczamy wartości funkcji f w węzłach $(k, j + 1)$ oraz $(k - 1, j)$:

$$f_k^{j+1} = f_k^j + \Delta t \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_k^j + \frac{\Delta t^2}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \right|_k^j + \dots$$

$$f_{k-1}^j = f_k^j - \Delta x \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_k^j + \frac{\Delta x^2}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_k^j + \dots$$

- Wymienione zależności wstawiamy do równania aproksymującego

$$\frac{f_k^{j+1} - f_k^j}{\Delta t} + C \frac{f_k^j - f_{k-1}^j}{\Delta x} = 0$$

- Po uproszczeniu i przekształceniach otrzymujemy tzw. **równanie zmodyfikowane**:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + C \frac{\partial f}{\partial x} = \nu_n \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \dots$$

ν_n - współczynnik dyfuzji numerycznej $\nu_n = \frac{C \cdot \Delta x}{2} (1 - C_a)$

Równanie adwekcji zmodyfikowane

$$\frac{\partial f}{\partial t} + C \frac{\partial f}{\partial x} = \boxed{v_n \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \dots}$$

Równanie adwekcji

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

- Dodatkowy człon dyfuzyjny reprezentuje wpływ członów drugiego rzędu zaniedbanych w trakcie aproksymacji ilorazami różnicowymi - jest on efektem obcięcia szeregu Taylora
- Efektem błędu wprowadzonego na etapie aproksymacji równania adwekcji jest obecność w rozwiązaniu sztucznej dyfuzji (numerycznej dyfuzji) objawiającej się spłaszczeniem fali

- Dyfuzja numeryczna zależy od liczby Couranta C_a , czyli od wymiarów siatki

$$\boxed{v_n = \frac{C \cdot \Delta x}{2} (1 - C_a)} \quad C_a = \frac{C \cdot \Delta t}{\Delta x} = 1$$

□ $v_n = 0$, gdy $C_a = 1 \rightarrow$ rozwiązanie dokładne

□ $v_n < 0$, gdy $C_a > 1 \rightarrow$ schemat jest niestabilny, gdyż dla równania

$$\frac{\partial f}{\partial t} + C \frac{\partial f}{\partial x} = -v_n \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$

nie można uzyskać rozwiązania

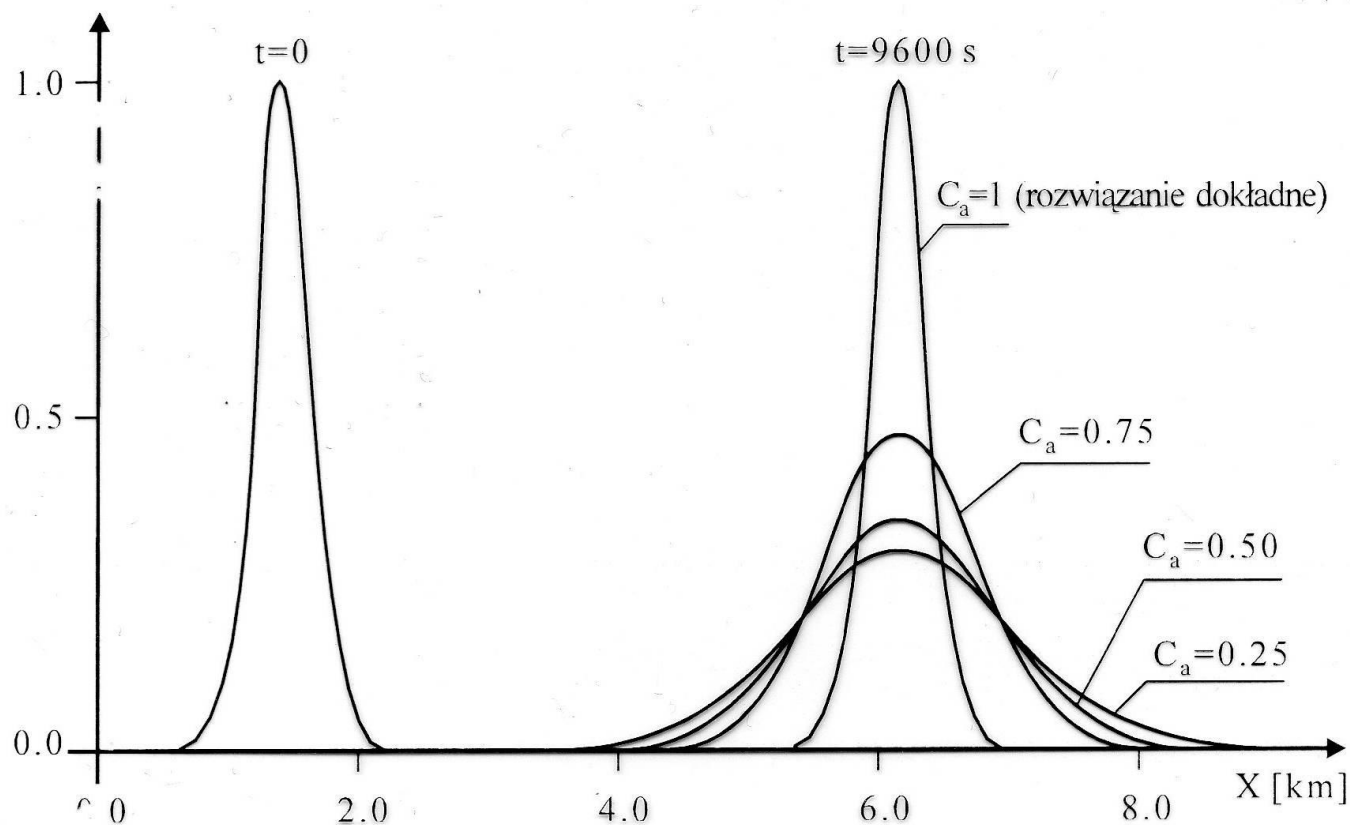
□ $v_n > 0$, gdy $C_a < 1 \rightarrow$ schemat jest stabilny, gdyż problem rozwiązania równania:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + C \frac{\partial f}{\partial x} = v_n \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$

jest poprawnie sformułowany - rozwiązanie uzyskamy zawsze, lecz będzie ono **obarczone błędem dyfuzji numerycznej**

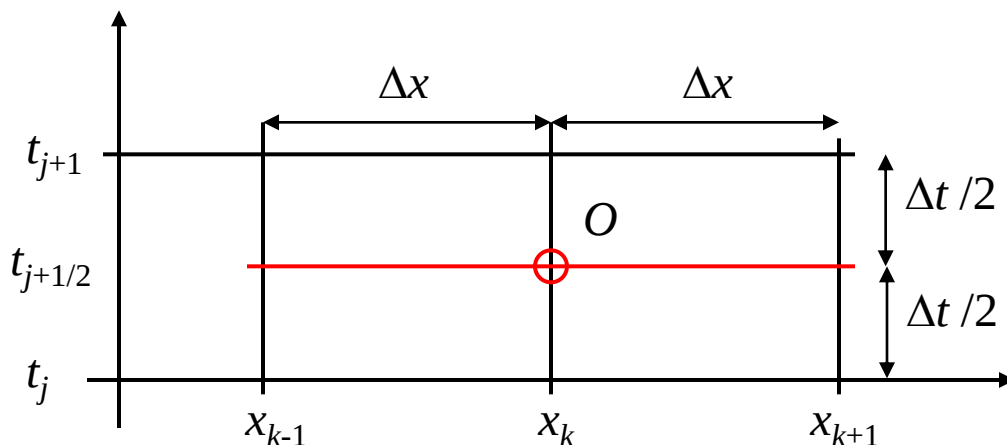
- Wartości współczynnika dyfuzji numerycznej generowanej przez schemat "upwind" przy $C = 0.5$ m/s i $\Delta x = 200$ m:

C_a	0.25	0.50	0.75	1.00
ν_n [m ² /s]	37.5	25.0	12.5	0.0



Rozwiązanie równania adwekcji schematem Cranka – Nicolsona

- Schemat zapewnia większą dokładność aproksymacji (dokładność II rzędu względem x oraz t)



$$\frac{f_k^{j+1} - f_k^j}{\Delta t} + C \frac{f_{k+1}^{j+1/2} - f_{k-1}^{j+1/2}}{2\Delta x} = 0$$

$$f_{k+1}^{j+1/2} = \frac{1}{2} (f_{k+1}^j + f_{k+1}^{j+1})$$

$$f_{k-1}^{j+1/2} = \frac{1}{2} (f_{k-1}^j + f_{k-1}^{j+1})$$

- Po podstawieniu otrzymujemy:

$$\frac{f_k^{j+1} - f_k^j}{\Delta t} + \frac{C}{4\Delta x} \left[\left(f_{k+1}^j + f_{k+1}^{j+1} \right) - \left(f_{k-1}^j + f_{k-1}^{j+1} \right) \right] = 0 \quad k = 1, 2, 3, \dots, M$$

- Powyższy schemat modyfikuje równanie adwekcji do postaci:

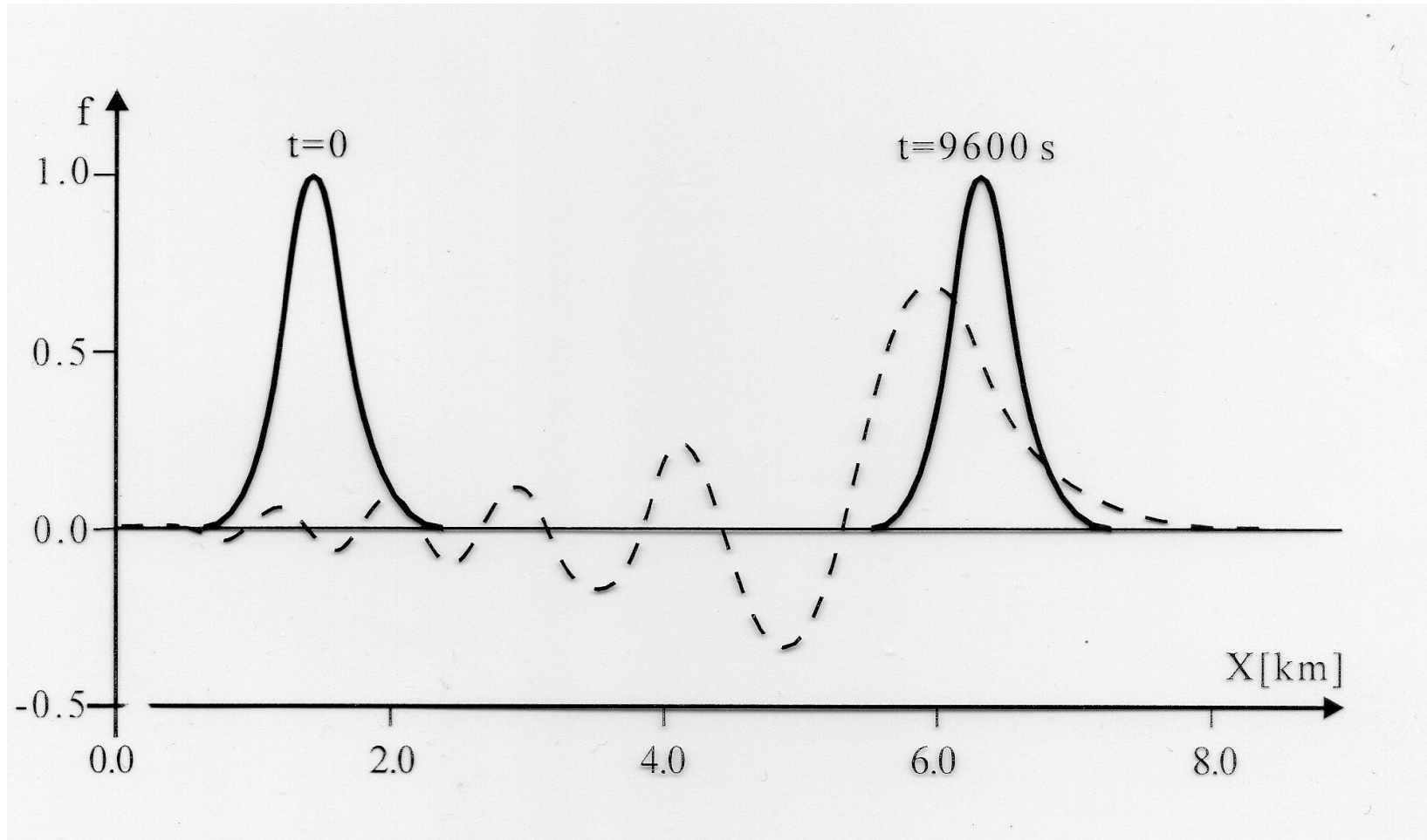
$$\frac{\partial f}{\partial t} + C \frac{\partial f}{\partial x} = \nu_n \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \varepsilon_n \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + \dots$$

$$\boxed{\nu_n = 0} \quad \leftarrow \text{współczynnik **dyfuzji numerycznej**}$$

$$\boxed{\varepsilon_n = -\frac{C \cdot \Delta x}{12} (C_a + 2)} \quad \leftarrow \text{współczynnik **dyspersji numerycznej**}$$

- schemat Cranka - Nicolsona nie generuje dyfuzji numerycznej (jest niedyssypatywny)
- jest on zawsze dyspersyjny gdyż dla dowolnej liczby Couranta C_a $\varepsilon_n \neq 0$, czyli **wystąpią oscylacje numeryczne**

Porównanie rozwiązania równania adwekcji metoda Cranka – Nicolsona dla $C_a = 0.25$ z rozwiązaniem dokładnym



Dyspersyjność schematu powoduje powstawanie w rozwiązaniu niefizycznych oscylacji

Błąd amplitudowy i błąd fazowy metody numerycznej

- Równania różniczkowe cząstkowe typu hiperbolicznego (jak np. równanie adwekcji) nie zawierają żadnego mechanizmu dyssypacji.
- Rozwiązanie ma postać fali o określonej amplitudzie i prędkości propagacji.
- Jest sprawą zasadniczą, aby w trakcie numerycznego rozwiązywania takich równań metoda numeryczna nie zmieniała ani amplitudy ani prędkości fazowej fali.

Wobec tego metoda rozwiązania nie powinna wprowadzać do rozwiązania ani **sztucznej dyssypacji** ani **sztucznej dyspersji**.

Metoda dyssypatywna – metoda generująca sztuczną (numeryczną) **dyssypację**.

Metoda dyspersyjna - metoda generująca sztuczną (numeryczną) **dyspersję**.

Efekty:

- Metoda **dyssypatywna** wywołuje **niefizyczne wygładzanie** rozwiązania
- Metoda **dyspersyjna** wywołuje **niefizyczne oscylacje** rozwiązania
 - Numeryczna dyssypacja i dyspersja powodują, że numeryczne rozwiązywanie równań hiperbolicznych jest znacznie większym wyzwaniem niż rozwiązywanie równań eliptycznych.
 - Dotyczy to również równań parabolicznych zawierających człony adwekcji jak np. równanie transportu adwekcyjno - dyfuzyjnego.
 - Obydwa zjawiska, mając genezę numeryczną, muszą być badane z wykorzystaniem odpowiednich analiz numerycznych.
np. za pomocą **metody równania zmodyfikowanego**

Równanie zmodyfikowane

$$\frac{\partial f}{\partial t} + C \frac{\partial f}{\partial x} = \nu_n \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \varepsilon_n \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + \dots$$

- Równanie zmodyfikowane umożliwia ocenę dyssypatywnych i dyspersyjnych właściwości schematu
- Jego człony z pochodnymi rzędu parzystego związane są z dyssypacją, zaś z pochodnymi rzędu nieparzystego - z dyspersją
- Pierwszy wyraz prawej strony równania zmodyfikowanego będzie decydował o rodzaju błędu dominującego w rozwiązaniu

Pochodna nieparzysta - schemat dyspersyjny

Pochodna parzysta - schemat dyssypatywny

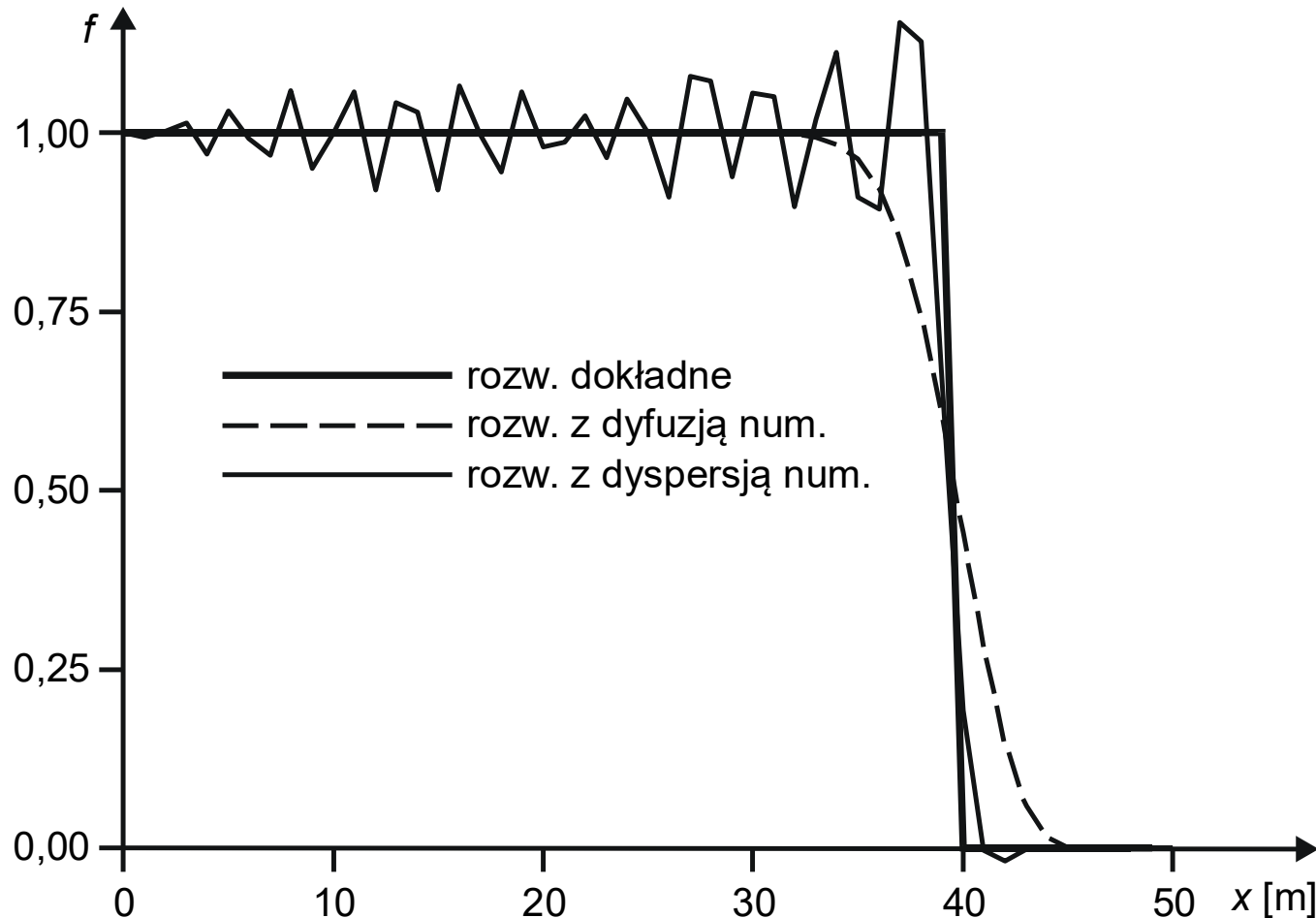
Najniższy rząd parzysty - proces dyfuzji numerycznej.

Zależnie od dominującego członu w błędzie obciążenia:

- albo wygładzenie rozwiązania
- albo oscylacje rozwiązania

Efekty szczególnie wyraźne przy dużych gradientach funkcji f .

Skrajna sytuacja - propagacja frontu koncentracji lub temperatury:



Rys. Przykład rozwiązania równania adwekcji w przypadku występowania dużych gradientów funkcji f

- Metoda rozwiązywania niedyssypatywna - w rozwiązaniu pojawią się oscylacje.
- Metoda eliminacji oscylacji - wprowadzenie dyfuzji numerycznej. Jeśli jest ona wystarczająco intensywna – oscylacje znikają. Jednocześnie redukowane są gradienty funkcji f (front jest wygładzany).
- Jeśli funkcja f zawiera bardzo duże gradienty, niefizyczne oscylacje rozwiązania wystąpią nawet wtedy, gdy schemat numeryczny jest umiarkowanie dyssypatywny.
- Efekty dyssypatywności i dyspersyjności metody nie występują jednocześnie.
- Problem generowania dyfuzji numerycznej jest niezależny od wymiarowości zagadnienia.

Dla zagadnień 2D i 3D zamiast współczynnika dyfuzji pojawia się tensor dyfuzji numerycznej i tensor dyspersji numerycznej.

Równanie adwekcji-dyfuzji

- Przy $C = \text{const}$ i $D = \text{const}$ równanie fali dyfuzyjnej można rozwiązać analitycznie dla szczególnego zestawu warunków początkowo - brzegowych:

$$Q(x, t = 0) = 0 \quad \text{dla } x \geq 0$$

$$Q(x = 0, t) = \delta(t)$$

$$Q(x = L, t) = 0 \quad \text{przy } L \rightarrow \infty$$

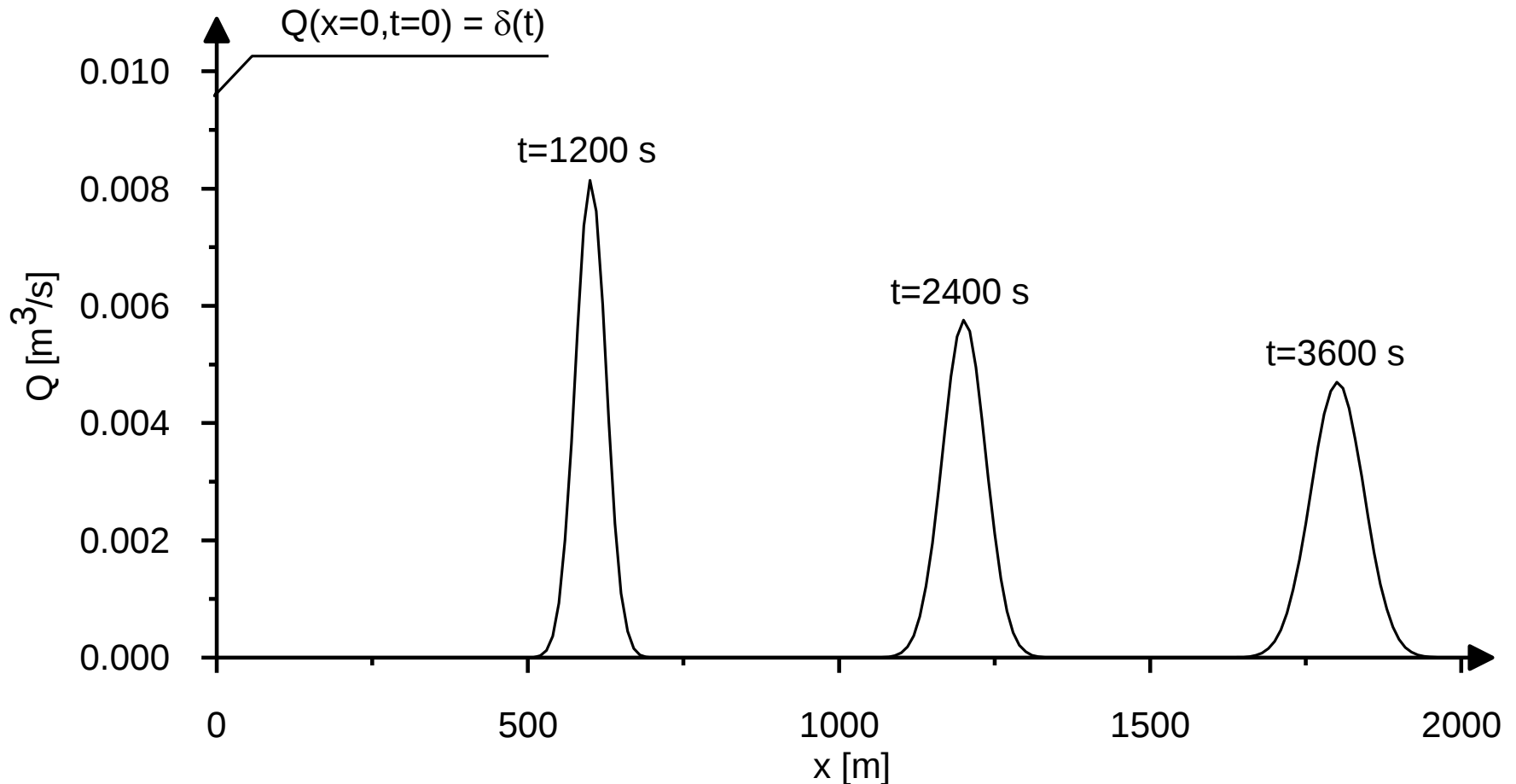
- W takim przypadku równanie adwekcji-dyfuzji:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \bar{C} \frac{\partial Q}{\partial x} - \bar{D} \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2} = 0$$

ma następujące rozwiązanie analityczne (dla $x > 0$):

$$Q(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi \bar{D}}} \frac{x}{t^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\bar{C} t - x)^2}{4 \bar{D} t}\right)$$

Rozwiązanie równania adwekcji-dyfuzji dla $C=0.5$ m/s oraz $D=0.25\text{m}^2/\text{s}$



Obowiązuje warunek: $\int_0^{\infty} Q(x, t) dx = 1$

Numeryczne rozwiązanie równania adwekcji - dyfuzji

- Rozpatrzmy najprostszy przypadek transportu opisany liniowym równaniem adwekcji - dyfuzji bez członu źródłowego:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + C \frac{\partial f}{\partial x} - D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 0 \quad \text{obszar rozwiązania:}$$
$$0 \leq x \leq L, t \geq 0$$

$C = \text{const}$ prędkość kinematyczna

$D = \text{const}$ współczynnik dyfuzji

- Przy $C = \text{const}$ i $D = \text{const}$ równanie fali dyfuzyjnej można rozwiązać dla szczególnego zestawu warunków początkowo - brzegowych:

$$Q(x, t = 0) = 0 \quad \text{dla } x \geq 0$$

$$Q(x = 0, t) = \delta(t)$$

$$Q(x = L, t) = 0 \quad \text{przy } L \rightarrow \infty$$

- Do rozwiązania numerycznego równania adwekcji - dyfuzji należy podchodzić z dużą ostrożnością ze względu na możliwość popełnienia dużych błędów
- Równanie transportu jest efektem **superpozycji** dwóch procesów o różnej naturze fizycznej: **adwekcji i dyfuzji**
- W każdym konkretnym przypadku ich udział w procesie transportu może być różny
- Proporcje pomiędzy przenoszeniem adwekcyjnym a dyfuzyjnym definiuje **liczba Pecleta**:

$$P = \frac{C \cdot l}{D}$$

C - prędkość

D - współczynnik dyfuzji

l - liniowy wymiar charakterystyczny

W obliczeniach numerycznych $l = \Delta x$, zatem:

$$P = \frac{C \Delta x}{D}$$

- Zakres zmienności liczby Pecleta:

$$P \in \langle 0, +\infty \rangle$$

- $P = 0$ gdy $C = 0 \rightarrow$ czysta dyfuzja

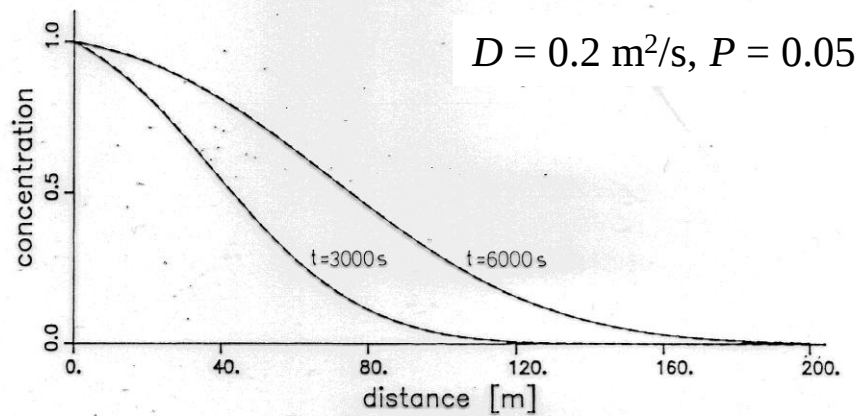
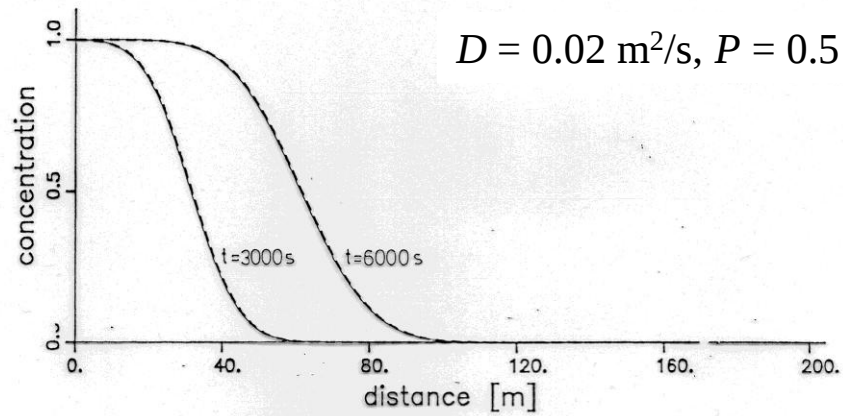
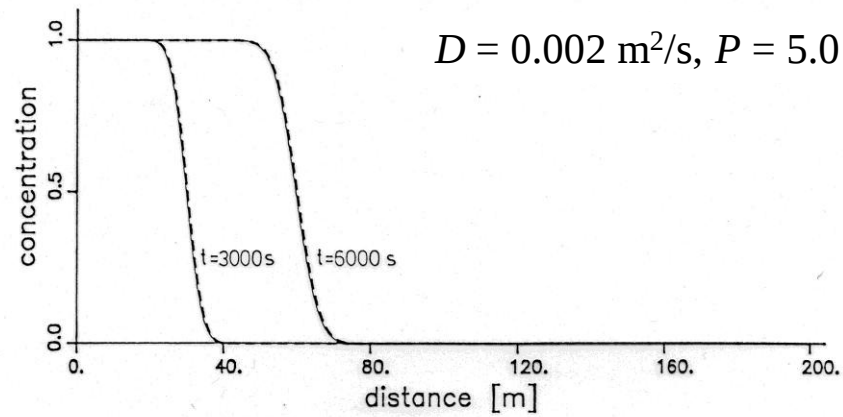
$$\frac{\partial f}{\partial t} - D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 0 \quad \text{typ paraboliczny}$$

- $P = \infty$ gdy $D = 0 \rightarrow$ czysta adwekcja

$$\frac{\partial f}{\partial t} + C \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad \text{typ hiperboliczny}$$

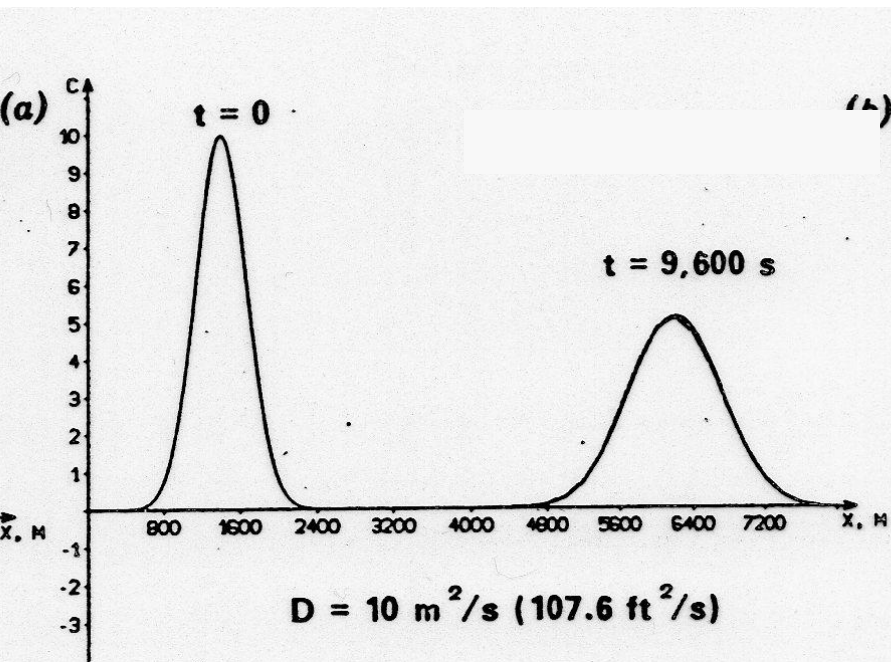
- Trudności pojawiają się w trakcie rozwiązywania zagadnień przenoszenia, w których dominuje adwekcja, tzn. przy dużych liczbach Pecleta - wówczas w równaniu dominują własności hiperboliczne

- Źródłem problemów numerycznych jest człon: $C \frac{\partial f}{\partial x}$



- Przy $P \leq 2$ dobrą jakość rozwiązania zapewniają nawet schematy niedyssypatywne
- Obecność członu dyfuzyjnego poprawia warunki rozwiązania, jednak wpływ błędu dyspersji numerycznej na jakość wyników zanika dopiero przy znaczącym przenoszeniu dyfuzyjnym
- Mechanizm fizycznej dyssypacji, którą reprezentuje człon dyfuzyjny, musi być na tyle silny, aby wygładził oscylacje wywołane ewentualną dyspersją numeryczną generowaną przez aproksymację członu adwekcji
- W przypadku przeciwnym należy w sposób kontrolowany wprowadzić mechanizm dyssypacji numerycznej

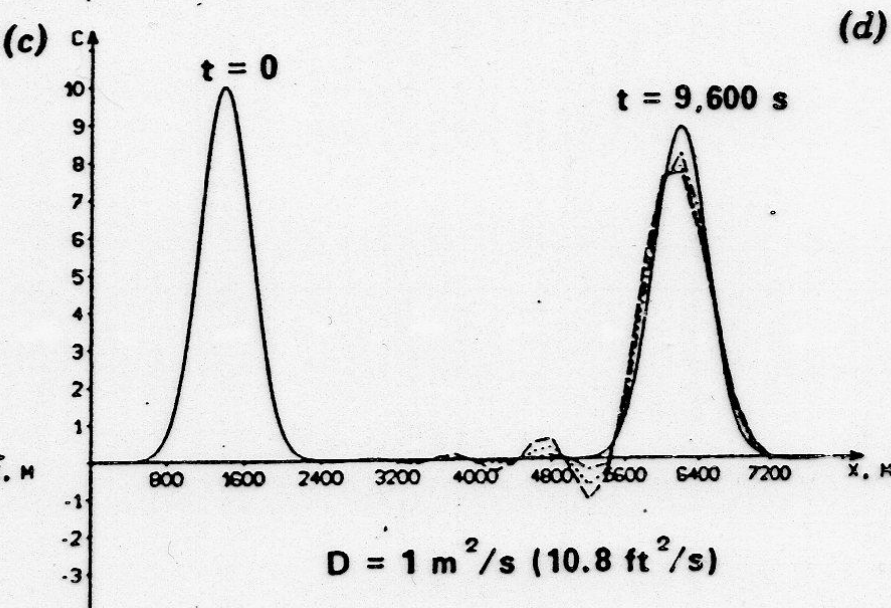
Rozwiązanie równania adwekcji - dyfuzji przy silnej i słabej dyfuzji



silna dyfuzja $D=10 \text{ m}^2/\text{s}$

-silne tłumienie

-brak oscylacji



słaba dyfuzja $D=1 \text{ m}^2/\text{s}$

- słabe tłumienie

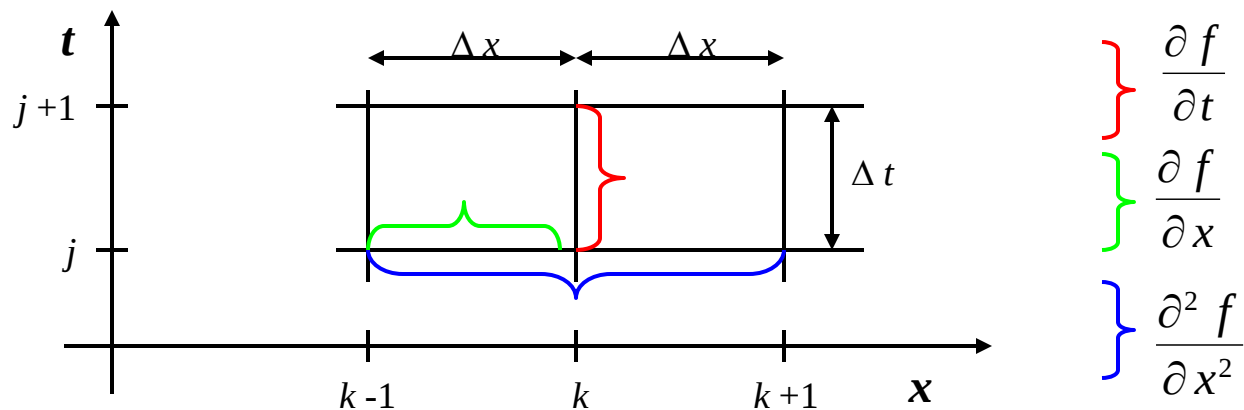
- pojawiają się oscylacje

- Równanie adwekcji - dyfuzji można rozwiązać:
 - bezpośrednio aproksymując metodą różnic lub elementów skończonych
 - wykonując dekompozycję względem procesów
- Rozwiązanie metodą różnic skończonych
 - do aproksymacji członu adwekcyjnego należy stosować iloraz różnicowy wsteczny, przedni lub centralny, zaś człon dyfuzyjny aproksymuje się ilorazem różnicowym centralnym o dokładności III rzędu:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \approx \frac{f_{k-1} - 2f_k + f_{k+1}}{(\Delta x)^2}$$

- przyjęty sposób aproksymacji pochodnej względem czasu decyduje o typie schematu (jawny, niejawny)

- Schemat jawny z różnicą wsteczną



$$\frac{f_k^{j+1} - f_k^j}{\Delta t} + C \frac{f_k^j - f_{k-1}^j}{\Delta x} - D \frac{f_{k+1}^j - 2f_k^j + f_{k-1}^j}{(\Delta x)^2} = 0$$

– kryterium stabilności dla schematu jawnego:

$$C_a \leq 1, C_d \leq \frac{1}{2}$$

$$C_a = \frac{C \cdot \Delta t}{\Delta x}$$

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

→

$$\Delta t \leq \min \left(\frac{\Delta x}{C}, \frac{(\Delta x)^2}{2D} \right)$$

Przykład

- kanał prosty o stałym spadku dna i stałych wymiarach, stała prędkość:

$$C = 0.01 \text{ m/s}$$

- warunki początkowe:

$$t = 0 \quad f(x, t) = 0, \quad x \geq 0$$

- warunki brzegowe:

$$\begin{aligned} x = 0 \quad f(x, t) &= \begin{cases} 0 & \text{dla } t = 0 \\ 1 & \text{dla } t > 0 \end{cases} \\ x = L \rightarrow \infty \quad f(x, t) &= 0 \end{aligned}$$

- rozwiązanie analityczne:

$$f(x, t) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{x - Ct}{\sqrt{4Dt}}\right) + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{Cx}{D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x + Ct}{\sqrt{4Dt}}\right)$$

Zaprezentowany schemat generuje dyfuzję numeryczną, której współczynnik jest równy:

$$\nu_n = \frac{C \cdot \Delta x - \Delta t \cdot C^2}{2}$$

– przy $\Delta x = 100 \text{ m}$, $C = 1 \text{ m/s}$, $\Delta t = 50 \text{ s}$

$$\nu_n = 25 \text{ m}^2/\text{s}$$

– w kanale o głębokości $H=2 \text{ m}$, spadku $s=0.00013$ współczynnik dyfuzji fizycznej podłużnej wg Fischera wynosi:

$$D = 250 \cdot H \cdot U^* = 250 \cdot H \cdot \sqrt{g \cdot H \cdot s}$$

$$D = 27 \text{ m}^2/\text{s}$$

Błąd numeryczny generowany przez schemat jest porównywalny z efektem dyfuzji fizycznej w procesie transportu !!!

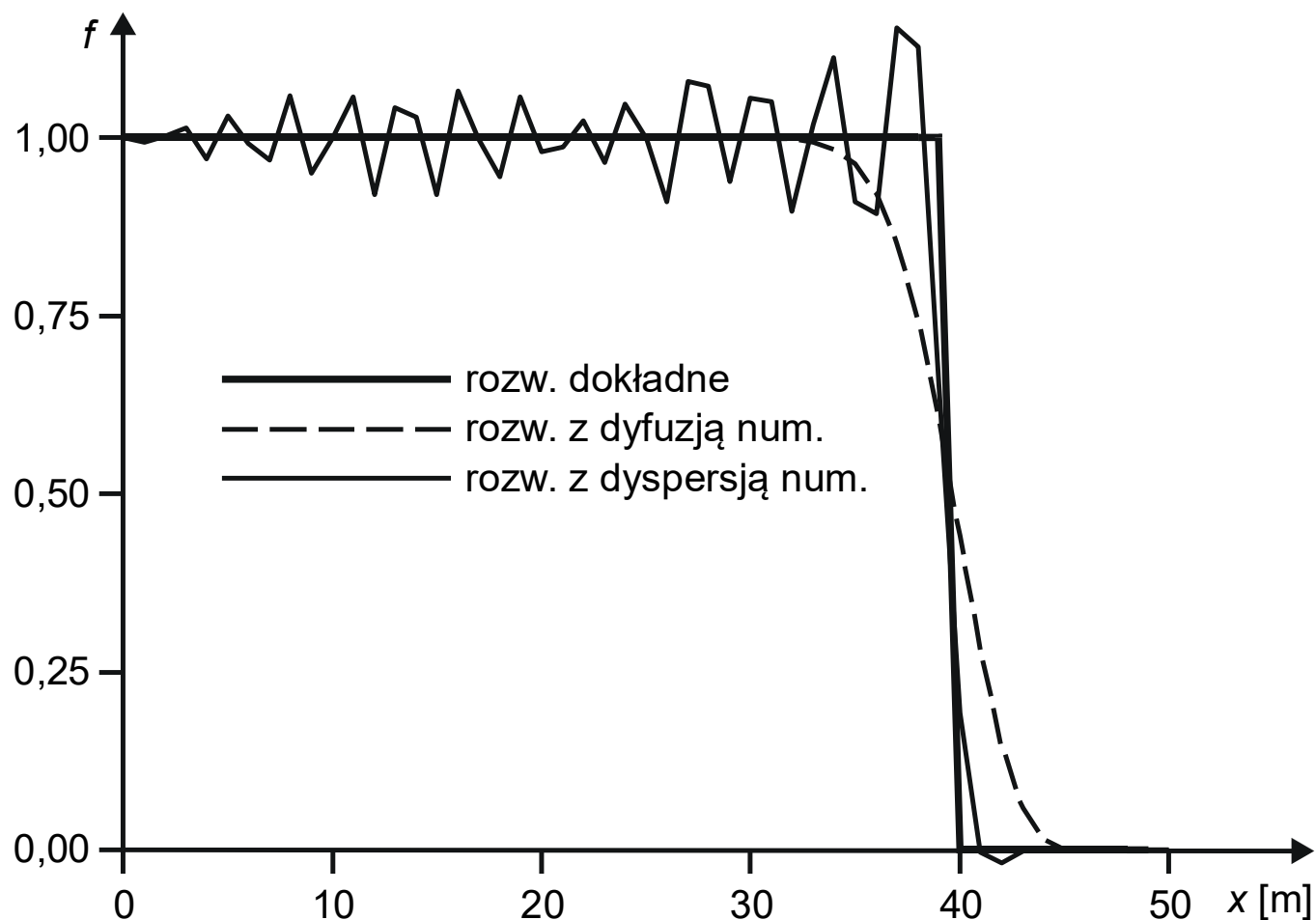
Metody całkowania w czasie równania różniczkowego a dokładność rozwiązania

Dwa etapy dyskretyzacji:

- I etap - dyskretyzacja przestrzenna
- II etap dyskretyzacja czasowa

W MOS na poziomie dyskretyzacji przestrzennej w celu wyeliminowania (wygładzenia) нефизycznych oscylacji związanych z nieciągłościami wprowadza się do rozwiązania (w sposób ściśle kontrolowany) dyfuzję numeryczną

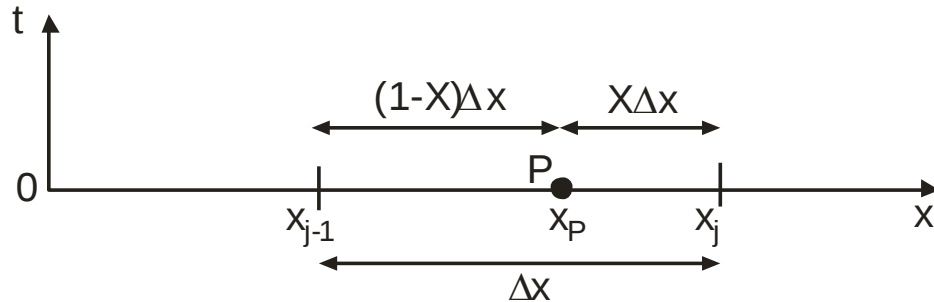
- najwyższa dokładność II rzędu w obszarach rozwiązania gładkiego (np. schemat Laxa- Wendroffa)
- dokładność I rzędu w obszarach występowania nieciągłości (np. schemat pod prąd), wprowadzenie maksymalnej dyfuzji numerycznej



Rys. Przykład rozwiązania równania adwekcji w przypadku występowania bardzo dużych gradientów funkcji f (lub jęciągłości)

Półdyskretyzacja równania adwekcji (dyskretyzacja przestrzenna)

$$\frac{\partial U}{\partial t} + C \frac{\partial U}{\partial x} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{dU_P}{dt} + C \frac{U_j^n - U_{j-1}^n}{\Delta x}$$



$$U_P = XU_{j-1} + (1-X)U_j$$

Dyskretyzacja przestrzenna równania wprowadza błąd zależny od dokładności aproksymacji

Analiza dokładności procesu półdyskretyzacji równania adwekcji

Równanie zmodyfikowane

$$\frac{\partial U}{\partial t} + C \frac{\partial U}{\partial x} = \nu_P \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

współczynnik dyfuzji numerycznej

$$\nu_P = C\Delta x \left(\frac{1}{2} - X \right)$$

Metody całkowania w czasie

Jawny schemat Eulera (dokładność I-go rzędu)

$$U_j^{n+1} = U_j^n - C \frac{\Delta t}{\Delta x} (U_j^n - U_{j-1}^n)$$

Metoda Rungego-Kutty (dokładność II-go rzędu)

$$U_j^* = U_j^n - C \frac{\Delta t}{2\Delta x} (U_j^n - U_{j-1}^n) \quad U_j^{n+1} = U_j^n - C \frac{\Delta t}{\Delta x} (U_j^* - U_{j-1}^*)$$

Niejawny schemat trapezowy (dokładność II-go rzędu)

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

Analiza dokładności procesu aproksymacji równania adwekcji dla schematu „skrzynkowego” MRS

$$X \frac{U_{i-1}^{n+1} - U_{i-1}^n}{\Delta t} + (1-X) \frac{U_{j-1}^{n+1} - U_{j-1}^n}{\Delta t} + C \left[(1-\theta) \frac{(U_j^{n+1} - U_{j-1}^{n+1})}{\Delta x} + \theta \frac{(U_j^n - U_{j-1}^n)}{\Delta x} \right] = 0$$

X – dyskretyzacja przestrzenna,

θ – dyskretyzacja czasowa (wybór metody całkowania w czasie)

Równanie zmodyfikowane

$$\frac{\partial U}{\partial t} + C \frac{\partial U}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

gdzie: ν – wsp. dyfuzji numerycznej:

$$\nu = \nu_p + \nu_t$$

Dyskretyzacja przestrzenna

$$\nu_p = C \Delta x \left(\frac{1}{2} - X \right)$$

Dyskretyzacja czasowa

$$\nu_t = C^2 \Delta t \left(\theta - \frac{1}{2} \right)$$

$$v = C\Delta x \left(\frac{1}{2} - X \right) + C^2 \Delta t \left(\theta - \frac{1}{2} \right)$$

Dla $X=0$ wprowadzamy maksymalną dyfuzję numeryczną - dokładność I-go rzędu ze względu na dyskretyzację w przestrzeni (np. schemat pod prąd)

$\theta=0 \quad \longrightarrow \quad$ schemat Eulera (**metoda I-go rzędu**)

$$v_I = C\Delta x \left(\frac{1}{2} - 0 \right) + C^2 \Delta t \left(0 - \frac{1}{2} \right) \quad \longrightarrow \quad v_I = \frac{1}{2} C\Delta x \left(1 - C \frac{\Delta t}{\Delta x} \right)$$

$\theta=1/2 \quad \longrightarrow \quad$ schemat trapezowy (**metoda II-go rzędu**)

$$v_I = C\Delta x \left(\frac{1}{2} - 0 \right) + C^2 \Delta t \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right) \quad \longrightarrow \quad v_{II} = v_P = \frac{1}{2} C\Delta x$$

$\theta=0 \longrightarrow$ schemat Eulera (metoda I-go rzędu)

$$v_I = \frac{1}{2} C \Delta x \left(1 - C \frac{\Delta t}{\Delta x} \right)$$

$\theta=1/2 \longrightarrow$ schemat trapezowy (metoda II-go rzędu)

$$v_{II} = \frac{1}{2} C \Delta x$$

WNIOSEK

$$\boxed{\left(1 - C \frac{\Delta t}{\Delta x} \right) < 1} \longrightarrow \text{Zawsze } v_I < v_{II}$$

jeśli $0 \leq X < 0.5$ to metoda Eulera I-go rzędu generuje zawsze mniejszą dyfuzję numeryczną niż schemat trapezowy II-go rzędu

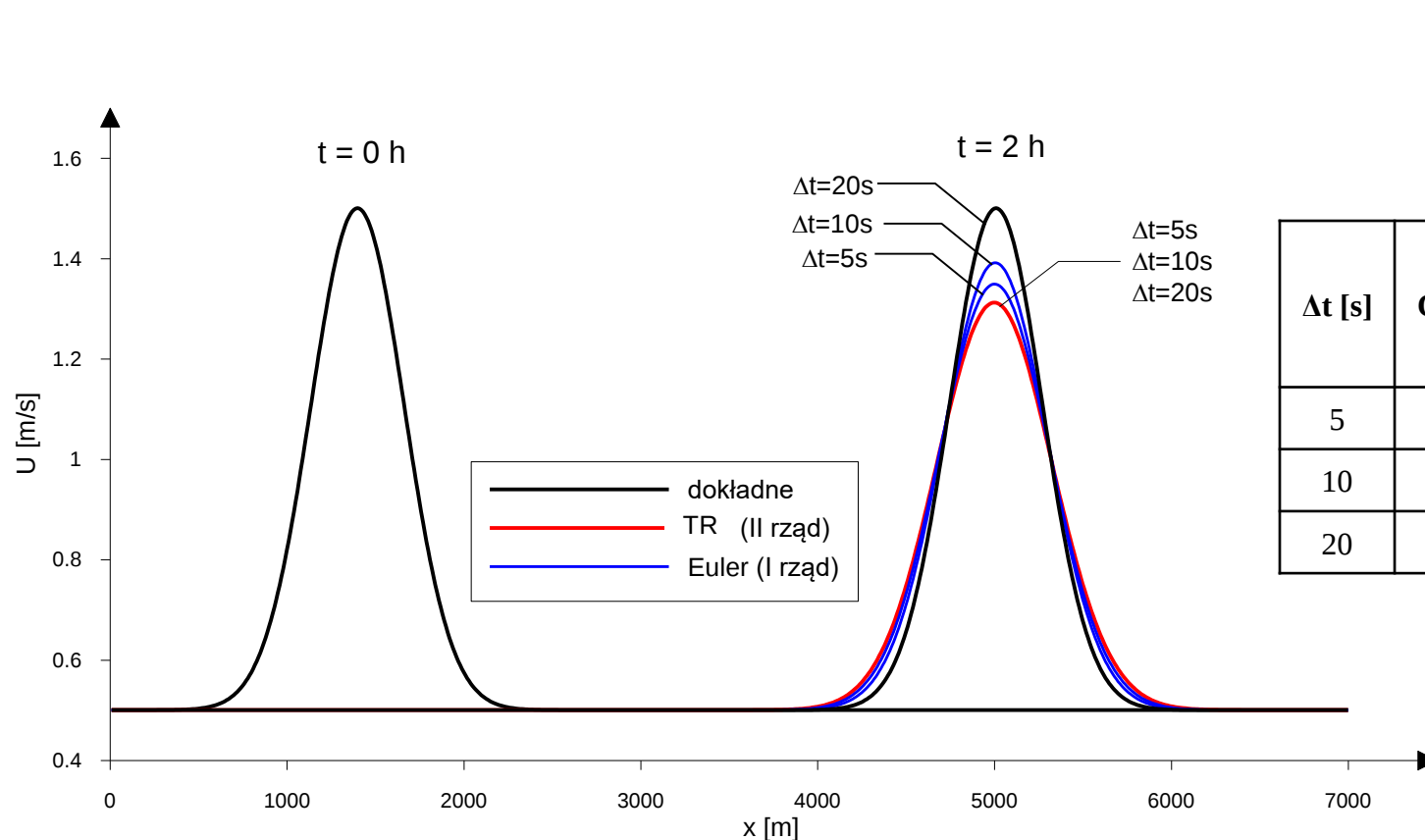
TEST NUMERYCZNY

Porównanie rozwiązań metody Eulera i trapezowej (TR) dla $X=0$

Kanał prostokątny pryzmatyczny: $C = 0.5 \text{ m/s}$, $\Delta x = 10 \text{ m}$

W chwili początkowej $t = 0$ fala ma kształt krzywej Gaussa

Na brzegu lewym $x = 0$ zadano warunek $U_0 = 0.5 \text{ m/s}$ dla $t \geq 0$



liczba Couranta

$$Cr = C \frac{\Delta t}{\Delta x}$$

Δt [s]	C_r [-]	Euler	TR
		v_I [m ² /s]	v_{II} [m ² /s]
5	0.25	1.87	2.50
10	0.5	1.25	2.50
20	1.0	0.00	2.50