EFEKTIVNÍ NUMERICKÉ METODY PRO ŘEŠENÍ DIFUZNÍCH ROVNIC

Michal Justra
KMA PřF UJEP, Klíšská 30, 400 01 Ústí nad Labem, m.justra@atlas.cz

Abstrakt

Hlavním cílem autora je vyvíjet efektivní metody pro řešení advekčně-difuzních rovnic a Navierových-Stokesových rovnic, což jsou rovnice popisující proudění newtonské tekutiny.

Zvolený postup je založen na převedení úlohy (rovnice druhého řádu) na soustavu rovnic prvního řádu. Soustavu získáme přidáním rovnice podle zavedené substituce. Tento postup bude předveden na difuzní rovnici.

Klíčová slova: *Difuzní rovnice, převod na soustavu prvního řádu, metoda typu RDS.*

1 Formulace úlohy

Z důvodu omezeného prostoru popíšeme postup pouze na difuzní rovnici. Pro jedno-dimenzionální případ budeme vycházet z rovnice (viz [2] str. 9-10)

$$u_t(x,t) - \big(k(x)u_x(x,t)\big)_x = f(x,t),$$

kde dolní indexy značí příslušné derivace a $k(x)$ je difuzní koeficient, který budeme předpokládat, že je nezávislý na prostorové proměnné (materiál je homogenní), tedy $k(x) \equiv k$. Úlohu lze interpretovat jako difuzi v trubici nebo šíření tepla v tyči. Funkce u přestavuje koncentraci popř. teplotu. Z matematického hlediska se jedná o evoluční, nehomogenní rovnici druhého řádu s lineárním operátorem $L(u) = u_t - u_{xx}$ (viz [1] str. 23).

My se budeme zabývat řešením stacionární úlohy, jinými slovy řešením úlohy v ustáleném stavu, tedy ve stavu, kdy řešení je nezávislé na čase ($u_t = 0$). Budeme také předpokládat, že funkce f je nezávislá na čase, tedy $f(x,t) = f(x)$. Za těchto předpokladů se obecná difuzní rovnice redukuje na tzv. Poissonovu rovnici

$$-u_{xx} = f, \quad x \in (a,b) \tag{1}$$

K jednoznačnému určení řešení je třeba mít k dispozici ještě další informace. U stacionárních rovnic to bývají nejčastěji tzv. okrajové podmínky, které spolu s rovnicí tvoří tzv. okrajovou úlohu.

Sumarizací předchozího získáme tvary rovnic, se kterými budeme dále pracovat. Rovnice v jedné dimenzi má tvar:

$$-ku_{xx} = f \quad \text{na } \Omega = \langle a,b\rangle \tag{2}$$

s okrajovými podmínkami

$$u(a) = \alpha, \quad u(b) = \beta. \tag{3}$$

2 Úprava na soustavu 1. řádu

Budeme vycházet z rovnice (2) a okrajovými podmínkami (3). Postup je založen na zavedení substituce (viz [3] str. 9)

$$p = u_x$$

a skutečnosti, že řešíme úlohu v ustáleném stavu $u_t = p_t = 0$. Pomocí předchozího $p = u_x \Rightarrow 0 = u_x - p$ a triviálních algebraických úprav získáme rovnost

$$p_t = 0 = \frac{0}{T_r} = \frac{u_x - p}{T_r} = \frac{u_x}{T_r} - \frac{p}{T_r},$$

kde T_r parametr. Tímto získáme soustavu dvou rovnic prvního řádu

$$u_t = kp_x + f,$$
$$p_t = \frac{u_x}{T_r} - \frac{p}{T_r},$$

s neznámými u a p, kterou můžeme zapsat v maticovém tvaru

$$U_t + AU_x = Q, \tag{4}$$

kde

$$U = \begin{bmatrix} u \\ p \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} 0 & -k \\ -1/T_r & 0 \end{bmatrix}, \quad Q = \begin{bmatrix} f \\ -p/T_r \end{bmatrix}.$$

Z předchozího úvodu plyne, že ustálené řešení (4) je řešení úlohy (2) s (3).

3 Diskretizace úlohy

Výše popsanou úlohu budeme řešit numericky. Lze samozřejmě vybírat ze široké škály již vyvinutých metod např. FVM (metoda konečných objemů), FEM (metoda konečných prvků) nebo DGFEM (nespojitá Galerkinova metoda konečných prvků). V našem případě zvolíme metodu RDS (Residual Distribution Schemes) přeloženo jako metoda distribuce reziduí.

Metoda RDS může být rozdělena do dvou kroků, stanovení reziduí a jejich distribuce. Princip metody si ukážeme na zákonu zachování v jedné dimenzi, podle [3] podkapitola 2.1

$$u_t + f_x = q. \tag{5}$$

K diskretizaci generujeme množinu uzlů $\{J\}$ se souřadnicemi x_j v oblasti Ω a uchováváme řešení v každém uzlu (u_j, p_j), $j \in \{J\}$ a předpokládáme spojitou po částech lineární aproximaci funkcí. Užijeme ekvidistantní dělení $\Delta x_C = x_{j+1} - x_j$ a definujeme množinu (buněk) C v našem případě jako $C = \langle x_j; x_{j+1} \rangle$. Poté vypočítáme reziduum v rámci každé buňky C, jako integrál z hodnoty stabilní části rovnice (5),

$$\Phi^C = -\int_C (f_x - q)dx = -(f_{j+1} - f_j) + \frac{q_{j+1} + q_j}{2}(x_{j+1} - x_j),$$

kde pravou stranu rovnice určíme podle lichoběžníkového pravidla. Poté přejdeme do druhého kroku, tj. distribuce rezidua. Určíme části rezidua distribuovaného uzlům na levé a pravé straně, Φ_j^C a Φ_{j+1}^C podle

$$\Phi_j^C = \mathcal{B}_j^C \Phi^C, \quad \Phi_{j+1}^C = \mathcal{B}_{j+1}^C \Phi^C,$$

kde $\mathcal{B}_j^C$ a $\mathcal{B}_{j+1}^C$ značí distribuční koeficienty, které splňují

$$\mathcal{B}_j^C + \mathcal{B}_{j+1}^C = 1.$$

Poté realizujeme distribuci reziduí pomocí následujícího semidiskrétního vztahu

$$\frac{dU_j}{dt} = \frac{1}{h}(\Phi_j^L + \Phi_j^P) = \frac{1}{h}(\mathcal{B}_j^L \Phi^L + \mathcal{B}_j^P \Phi^P), \tag{6}$$

kde L a P značí levou a pravou buňku bodu j.

4 Použití schématu typu RDS

Pro rovnici (4) se reziduum stanoví jako

$$\Phi^C = \int_{x_j}^{x_{j+1}} (-AU_x + Q)dx.$$

Předpokládáme-li po částech lineární variantu U přes všechny buňky, získáme

$$\Phi^C = -A\left(U_{j+1} - U_j\right) + \frac{Q_{j+1} + Q_j}{2}h. \tag{7}$$

Nyní je potřeba určit koeficienty $\mathcal{B}_j^C$ a $\mathcal{B}_{j+1}^C$. Tyto koeficienty určíme jako (pro detaily viz [3] str. 10)

$$\mathcal{B}_j^C = \frac{1}{2}I - \frac{\tau}{2h}A, \quad \mathcal{B}_{j+1}^C = \frac{1}{2}I + \frac{\tau}{2h}A. \tag{8}$$

Časovou derivaci aproximujeme pomocí metody konečných diferencí (nebo též metoda sítí) $\left.\frac{dU_j}{dt}\right|_{t=t_n} \approx \left(U_j^{n+1} - U_j^n\right)/\Delta t$. S využitím tohoto vztahu a rovností (6), (8) můžeme rovnici (4) aproximovat pomocí vztahu

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{\Delta t}{h}\left[\left(\frac{1}{2}I + \frac{\tau}{2h}A\right)\Phi_j^L + \left(\frac{1}{2}I - \frac{\tau}{2h}A\right)\Phi_j^P\right],$$

kde Φ_j^L a Φ_j^P vypočítáme podle (7) u příslušného uzlu a τ je parametr. Podrobnosti lze nalézt v [3] podkapitola 3.2.

5 Vlastnosti zavedeného schématu

V dokumentu [3] podkapitola 3.5 je ukázáno, že námi použitá metoda je druhého řádu. Dále je v tomto dokumentu navržena volba parametrů. Pro náš experiment budeme zvažovat následující volby parametrů

$$\tau = 2T_r \quad \text{a} \quad L_r = \frac{h}{\sqrt{2}} \tag{9}$$

a

$$\tau = \frac{h}{\sqrt{k/T_r}} \quad \text{a} \quad L_r = \frac{h}{4}\left(1 + \frac{1}{\sin\left(\frac{\pi h}{2}\right)}\right) \tag{10}$$

pro obě platí vztah $T_r = L_r^2/k$.

Pro tuto volbu je velikost časového kroku zvolena tak, aby splňovala nerovnost

$$\Delta t \leq \frac{T_r}{\tau k/h^2 + 1/2}.$$

Podrobnosti lze najít v [3] podkapitoly 3.2 - 3.4.

6 Numerické experimenty

Provedeme podobný experiment, jako je uveden v [3] podkapitola 6.1. Chceme najít řešení (v ustáleném stavu) rovnice

$$-ku_{xx} = -4\pi^2 \cos(2\pi x) \quad \text{na } \Omega = \langle 0{,}1\rangle$$

kde $k = 1$ a s okrajovými podmínkami $u(0) = 1$, $u(1) = 1$. Řešíme tedy soustavu rovnic

$$u_t = kp_x + 4\pi^2 \cos(2\pi x)\,,$$
$$p_t = \frac{u_x}{T_r} - \frac{p}{T_r},$$

která má přesné řešení $u = \cos(2\pi x)$ a $p = -2\pi \sin(2\pi x)$. Výše uvedený postup budeme testovat na mřížce s počtem buněk $N = 8, 16, 32, 64, 128, 256$. Výpočet začneme s počátečním řešením $u = -x^2 + x + 1$ a $p = x^2 - x$. Zastavovacím kriteriem pro náš experiment bude snížení počátečního rezidua o devět řádů.

Tabulka 1. Experiment s volbou (9).

N	Poč. itr.	Chyba u	Řád
8	392	1,26E-01	
16	1 581	2,81E-02	2,16
32	6 314	6,71E-03	2,06
64	25 216	1,66E-03	2,02
128	100 764	4,13E-04	2,01
256	402 831	1,03E-04	2,00

Tabulka 2. Experiment s volbou (10).

N	Poč. itr.	Chyba u	Řád
8	66	2,00E-01	
16	130	3,19E-02	2,65
32	252	4,45E-03	2,81
64	493	1,00E-03	2,18
128	973	2,59E-04	1,95
256	1 934	6,74E-05	1,94

V tabulkách 1 a 2 jsou vidět výsledky experimentu pomocí počtu iterací potřebných k dosažení zastavovacího kriteria a pomocí chyby řešení u, která je měřena jako $\|u - U^n\|$, kde $\|\cdot\|$ značí L_1 normu. Čtvrtý sloupec tabulek ukazuje výše uvedenou přesnost druhého řádu.

7 Závěr a další postup

Zásadní výhodou popsané metody je, že ji lze uplatnit na Navierovy-Stokesovy rovnice. Převod na soustavu prvního řádu znamená, že na advekční i difuzní členy můžeme aplikovat jeden postup. Další výhodou je, že navržené metody mohou být zobecněny i pro případ nespojitého řešení. To znamená, že jsme de facto navrhli návod, jak pro případ nespojitých dat aproximovat nejen advekční, ale i difuzní členy.

Cílem je uplatnit popsaný přístup na obecnější advekčně-difuzní rovnice a Navierovy--Stokesovy rovnice. Současně chceme nahradit „techniku ustalování“ použitou jako iterační metodu pro nalezení stacionárního řešení jinou metodou (např. GMRES a předpodmíněním).

Literatura

[1] DRÁBEK, Pavel a Gabriela HOLUBOVÁ. *Parciální diferenciální rovnice* [online]. ZČU Plzeň, 2011 [cit. 2014-03-17]. Dostupné z: http://mi21.vsb.cz/sitejs/mi21.vsb.cz/files/unit/parcialni_diferencialni_rovnice.pdf

[2] LEVEQUE, Randall J. *Finite Difference Methods for Differential Equations* [online]. University of Washington, September, 2005 [cit. 2014-03-17]. Dostupné z: http://volunteerlecturerprogram.com/wp/wp-content/uploads/2013/01/lecnotes.pdf

[3] NISHIKAWA, Hiroaki. *A First-Order System Approach for Diffusion Equation. I. Second-OrderResidual-Distribution Schemes* [online]. University of Michigan, 2007 [cit. 2014-03-17]. Dostupné z: http://www.hiroakinishikawa.com/My_papers/Nishikawa_JCP2007v227pp315-352Preprint.pdf

Abstract

The main goal of the author is to develop efficient methods for solving advection-diffusion equations and the Navier-Stokes equations, which are equations describing the flow of Newtonian fluids.

The approach is based on a conversion problem (equation of second order) to the system of equations of the first order. The system we obtain by adding equation introduced by substitution. This procedure will be presented to the diffusion equation.