

Differenciasémák

Kristóf Gergely
2012.09.03

Véges differenciák módszere a numerikus hiba és a konvergencia

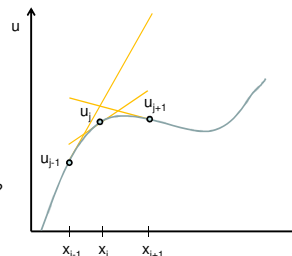
Diszkrétizálás: x_j, u_j

Próbáljuk meghatározni, a megoldás változását az érintők alapján:

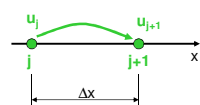
$$u_{j+1} - u_j$$

A felosztás sűrítésével a hiba csökken.

De milyen gyorsan csökken? A lehetséges módszerek nagyon eltérnek pontosság szempontjából.



Euler-módszer



A Taylor-polinomból kifejezhetünk egy elsőrendű pontosságú differencia sémát is:

$$u'_j = \frac{u_{j+1} - u_j}{\Delta x} + o(1)$$

(A hibát itt egy nagyságrenddel nagyobb.)

Az u_j -n áthaladó (analitikus) megoldás Taylor-sora j pontból a $j+1$ pontba:

$$u_{j+1} = u_j + u'_j \Delta x + u''_j \frac{\Delta x^2}{2} + \dots$$

$$u_{j+1} = u_j + u'_j \Delta x + o(\Delta x)$$

Ez egy elsőrendű pontosságú integrálási séma.

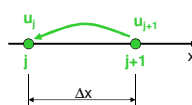
Feltesszük, hogy a differenciálegyenlet az alábbi formában adott:

$$u'_j = f(u_j, x_j)$$

Lépcsénként közelíthetjük u -t:

$$u_{j+1} \approx u_j + f(u_j, x_j) \Delta x$$

A Backward Euler séma, implicit diszkrétizálás



Ha F a $j+1$ pontban kap értéket, akkor u_{j+1} -re általában egyenletet kell megoldanunk, ezt a módszert **implicit** diszkrétizálásnak nevezzük.

$$F(u'_{j+1}, u_{j+1}, x_{j+1}) = 0 \rightarrow F\left(\frac{u_{j+1} - u_j}{\Delta x}, u_{j+1}, x_{j+1}\right) \equiv 0$$

Egy másik lehetséges elsőrendű séma:

$$u_j = u_{j+1} + u'_{j+1}(-\Delta x) + o(\Delta x)$$

a backward Euler módszerből kifejezve:

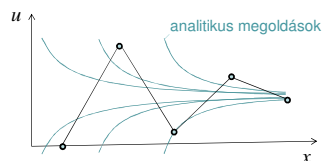
$$u'_{j+1} = \frac{u_{j+1} - u_j}{\Delta x} + o(1)$$

az Euler-módszerrel azonos differenciasémát kapunk u'_{j+1} -re. Feltételezzük a differenciál egyenletet az alábbi általános alakban:

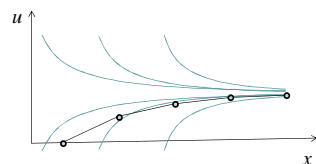
$$F(u', u, x) = 0$$

A viselkedésük nagyon eltér...

Sok esetben a fizikai folyamatok valamilyen egyensúlyi állapot felé tartanak.

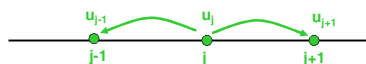


Explicit Euler módszer:



Implicit Euler módszer:

Centrális differenciaséma: CDS



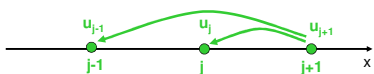
$$u_{j+1} = u_j + u'_j \Delta x + u''_j \frac{\Delta x^2}{2} + o(\Delta x^2)$$

$$u_{j-1} = u_j + u'_j(-\Delta x) + u''_j \frac{\Delta x^2}{2} + o(\Delta x^2)$$

$$u'_j = \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2 \Delta x} + o(\Delta x)$$

Numerikus áramlástanban sok helyen alkalmazzák térbeli diszkrétizálásra.

Egy implicit, másodrendű differenciaséma



$$u_j = u_{j+1} + u'_{j+1}(-\Delta x) + u''_{j+1} \frac{\Delta x^2}{2} + o(\Delta x^2)$$

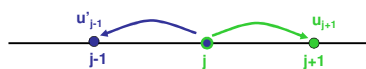
$$u_{j-1} = u_{j+1} + u'_{j+1}(-2\Delta x) + u''_{j+1} 2\Delta x^2 + o(\Delta x^2)$$

$$u_j - \frac{u_{j-1}}{4} = \frac{3}{4}u_{j+1} + u'_{j+1} \left(-\frac{\Delta x}{2}\right) + o(\Delta x^2)$$

$$u'_{j+1} = \frac{3}{2}u_{j+1} - 2u_j + \frac{1}{2}u_{j-1} + o(\Delta x)$$

Alkalmazás: **pl. a határreteg egyenlet diszkrétizálására.**

Adams-Basforth séma



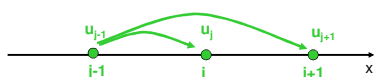
$$u_{j+1} = u_j + u'_j \Delta x + u''_j \frac{\Delta x^2}{2} + o(\Delta x^2)$$

$$u'_{j-1} = u'_j + u''_j(-\Delta x) + o(\Delta x) \quad \Bigg/ \quad + \dots \times \frac{\Delta x}{2}$$

$$u_{j+1} = u_j + \frac{3}{2}u'_j \Delta x - \frac{1}{2}u'_{j-1} \Delta x + o(\Delta x^2)$$

Másodrendű pontosságú explicit integrálási séma.
Alkalmas a **NS egyenlet időbeli integrálására.**

Egy kétlépéses, másodrendű, explicit Runge-Kutta típusú séma



1st step: Az Euler módszert alkalmazva eljutunk a j-edik pontba:

$$u_j = u_{j-1} + u'_{j-1} \Delta x + o(\Delta x)$$

Értéket adunk a deriváltnak a j-edik pontban:

$$d = f(u_j + o(\Delta x), x_j) = f(u_j, x_j) + \frac{df}{du}|_{u_j, x_j} \cdot o(\Delta x) = u'_j + o(\Delta x)$$

2nd step: Alkalmazzuk a CDS sémát a j-edik pont körül:

$$u_{j+1} = u_j + d 2 \Delta x + o(\Delta x^2) = u_{j-1} + u'_j 2 \Delta x + o(\Delta x^2)$$

Alkalmazás: **összenyomható áramlások esetén** (ld. kétlépéses Lax-Wendroff msz.)

A Navier-Stokes egyenlet diszkrétizálása...

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} = 0$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2}{\partial x} + \frac{\partial \rho uv}{\partial y} + \frac{\partial \rho uw}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \rho g_x + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right)$$

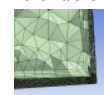
$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial \rho vu}{\partial x} + \frac{\partial \rho v^2}{\partial y} + \frac{\partial \rho vw}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \rho g_y + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right)$$

$$\frac{\partial \rho w}{\partial t} + \frac{\partial \rho wu}{\partial x} + \frac{\partial \rho wv}{\partial y} + \frac{\partial \rho w^2}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \rho g_z + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right)$$

A gazdaságos számítás érdekében a háló igazodjon a megoldáshoz...



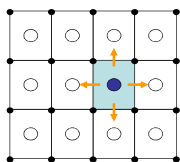
A görbe vonalú, nem egyenközü, struktúrátlan, hibrid hálókön.



A véges differenciák módszere bonyolulttá válik.

Véges térfogatok módszere

Mezőváltozók értékei



U: valamilyen megmaradó mennyiség térfogati sűrűsége

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V U dV + \oint_A \vec{F} \cdot d\vec{A} = \int_V S_V dV + \oint_A \vec{S}_A \cdot d\vec{A}$$

A megmaradó mennyiség egységnyi tömegre vonatkoztatva:

$$\Phi = U / \rho$$

Konvektív és konduktív fluxusok:

$$\vec{F}_C = \rho \Phi \vec{v} \quad \vec{F}_D = -\Gamma \nabla \Phi$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \Phi dV + \oint_A \rho \Phi \vec{v} \cdot d\vec{A} = \oint_A (\Gamma \nabla \Phi + \vec{S}_A) \cdot d\vec{A} + \int_V S_V dV$$

A fluxusok a számítás során tényleges számértéket kapnak.

Konzervatív tulajdonság: a numerikus közelítés hibái a megmaradási tételeket nem rontják el. (Pl. a teljes tartományra pontosan teljesül a tömeg és az energia megmaradása.)

Véges térfogatok módszere

Az általános transzportegyenlet differenciál alakja:

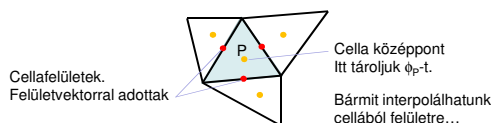
$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \phi \vec{v}) = \nabla \cdot \vec{S}_A + \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_V$$

Amelyben ϕ valamilyen megmaradó jellemző tömegkoncentrációja. (Pl. kg/kg).

A hely szerinti differenciálást mindig $\text{div}(\dots)$, $\text{grad}(\dots)$, vagy $\text{div}(\text{grad}(\dots))$ alakban kell elvégezni, csak ezekre kell tehát közelítő sémákat találni.

Véges térfogatok módszere esetében a fenti operátorokat felületi és térfogati integrálokra valamint a hálón végzett interpolációkra vezetjük vissza.

A numerikus háló egy részlete az i-edik cella körül:



A divergencia közelítő alakja

Véges térfogatos módszere esetében a divergencia operátort felületi integrálásra visszavezetve közelítjük, ezért a Gauss-tételből kell kiindulni:

$$\int_V \nabla \cdot \underline{u} \, dV = \oint_A \underline{u} \cdot d\underline{A}$$

Az \underline{u} vektor Descartes koordinátáit u_i -val jelölve az alábbi módon definiálhatjuk a divergencia operátor diszkrét alakját P pontban:

$$\tilde{\nabla} \cdot \underline{u}_i = \frac{\sum_k \int_{A_k} u_{\perp} \, dA}{V_p}$$

ahol A_k a cella oldalfalainak indexe.

A felületi integrál a felületvektor és a felületre interpolált \underline{u} skaláris szorzata azaz:

$$\int_{A_k} \underline{u}_{\perp} \, dA = \sum_{i=1}^3 u_i \, dA_{k,i}$$

(i a koordináta irányokat jelöli)

A gradiens közelítő alakja

Egy skaláris mennyiség gradiensét a Gauss-tételből levezetett alábbi integrál átalakító tételből határozhatjuk meg:

$$\int_V \nabla \phi \, dV = \oint_A \phi \cdot d\underline{A}$$

A gradiens operátor i komponensét tehát az alábbi alakban számolhatjuk:

$$\tilde{\nabla} \Big|_i \phi = \frac{\sum_k \int_{A_k} \phi \, dA_i}{V_p}$$

A_i a felületvektor i komponensét jelöli Descartes koordináta-rendszerben.

A Laplace-operátor közelítő alakja

Egy skaláris mennyiségre vonatkozó Laplace operátor felírható a gradiens divergenciájaként:

$$\Delta \phi = \nabla \cdot \nabla \phi$$

Diszkrét közelítés elvégzéséhez a belső gradienst a cella felületére Interpolálnunk kell. Jelöljük ezt $\langle \rangle$ zárójelekkel:

$$\tilde{\Delta} \phi = \tilde{\nabla} \cdot \langle \tilde{\nabla} \Big|_i \phi \rangle$$

Gyakorlatilag a nyomás kivételével (pl. hőmérséklet vagy transzportált passzív skalárok esetében) a gradiens felületre merőleges komponensét egyszerűbben is közelíthetjük a két szomszédos cellában tárolt ϕ értékek alapján. Ilyen esetben a Laplace operátor közelítő alakja a P pontban és a szomszédos cellákban tárolt Φ értékek lineáris kombinációja lesz:

$$\tilde{\Delta} \phi = A_p \phi_p + \sum A_r \phi_r$$

Az A együtthatók csak a háló méreteitől függenek.