Áramlások numerikus modellezése

Bene Gyula
Eötvös Loránd Tudományegyetem, Elméleti Fizikai Tanszék
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A

2003. április 22.

1 Előadás. Bevezetés. A numerikus szimulációk összetevői.

Tematika: ld. http://arpad.elte.hu/~bene/

Ajánlott irodalom:

- Joel H.Ferziger, Milovan Perić: Computational Methods for Fluid Dynamics (Springer, 1996).
- Francois Thomasset: Implementation of Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations (Springer, 1981).
- C.Canuto, M.Y.Hussaini, A.Quarteroni, T.A.Zang: Spectral Methods in Fluid Dynamics (Springer, 1988).
- Stoyan Gisbert, Takó Galina: Numerikus módszerek I-III. (ELTE Typotex, 1993).
- Stoyan Gisbert (szerk.): Parciális differenciálegyenletek numerikus megoldási módszerei (Nemzeti Tankönyvkiadó, 1993)
- http://www.cfd-online.com/

1.1 CFD (Computational Fluid Dynamics)

Tárgykör, lehetőség, fejlődési irányok

1.2 Matematikai modell

1.3 Az egyenletek diszkretizálása

- Rácstípusok
- Véges differencia módszerek
- Véges térfogat módszerek
- Végeselem-módszerek
- Spektrálmódszerek

1.4 Diszkretizált egyenletek megoldása, külső és belső iteráció, konvergenciakritériumok

1.5 Eredmények grafikus megjelenítése

IDL, Gnuplot, Pgplot stb.

1.6 Numerikus megoldások tulajdonságai

- Konzisztencia (a rács finomításával a diszkrét egyenletek egyre pontosabban közelítik az eredeti, egzakt egyenletet)
- Stabilitás (hibák nem növekednek)
- Konvergencia (a rács finomításával a diszkrét egyenletek *megoldása* egyre pontosabban közelíti az eredeti, egzakt egyenlet *megoldását*)
- Megmaradási tételek teljesülése, konzervatív és nem konzervatív sémák
- Korlátosság (pl. koncentrációk pozitívak)
- Pontosság, hibaforrások

– Modellezési hibák (az alapegyenletek közelítéseket tartalmaznak)
– Diszkretizálási hibák
– Konvergenciahibák (az iteráció véges lépésszámú)

2 Előadás. Parciális differenciálegyenletek diszkretizálása 1. Véges differencia módszerek

- Példa (konvekció, diffúzió és forrás egyensúlyban):

$$\frac{\partial(\rho u_j \phi)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\partial \phi}{\partial x_j}\right) + q_\phi$$

  Itt ϕ az ismeretlen, ρ, u_j, q_ϕ adottak.

- Differenciálhányados közelítése differenciahányadossal. Forward, backward, central difference
- Első deriváltak közelítése
- Második deriváltak közelítése
- Határfeltételek

3 Előadás. Parciális differenciálegyenletek diszkretizálása 2.

3.1 A diszkretizálás néhány általános kérdése

- UDS (upwind difference scheme): FDS vagy BDS használata az áramlás irányától függően (amerről az áramlás érkezik, azon oldali függvényértéket használjuk)
  - Előnye: numerikus stabilitás (nem lépnek fel oszcillációk)
  - Hátránya: numerikus diffúzió

$$\frac{\phi^i - \phi^{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \approx \left.\frac{\partial \phi}{\partial x}\right|_{x_i} - \frac{x_i - x_{i-1}}{2} \left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right|_{x_i}$$

  (Megjegyzés: CDS esetén a harmadrendű deriváltat tartalmazó maradéktag okozza az oszcillációt.)

- Nem egyenletes felosztású rácsok finomítása

ábra 1: Fent: durva rács, lent: finom rács. Expanziós tényezők: $r_{e,h}$ ill. $r_{e,2h}$.

$$(x_{2i,h} - x_{2i-1,h}) + r_{e,h}(x_{2i,h} - x_{2i-1,h}) = x_{i,2h} - x_{i-1,2h}$$

$$(1 + r_{e,h})(x_{2i,h} - x_{2i-1,h}) = x_{i,2h} - x_{i-1,2h}$$

$$r_{e,h}^2(x_{2i,h} - x_{2i-1,h}) + r_{e,h}^3(x_{2i,h} - x_{2i-1,h}) = x_{i+1,2h} - x_{i,2h} = r_{e,2h}(x_{i,2h} - x_{i-1,2h})$$

$$r_{e,h}^2(1 + r_{e,h})(x_{2i,h} - x_{2i-1,h}) = r_{e,2h}(x_{i,2h} - x_{i-1,2h})$$

$$r_{e,h}^2 = r_{e,2h}$$

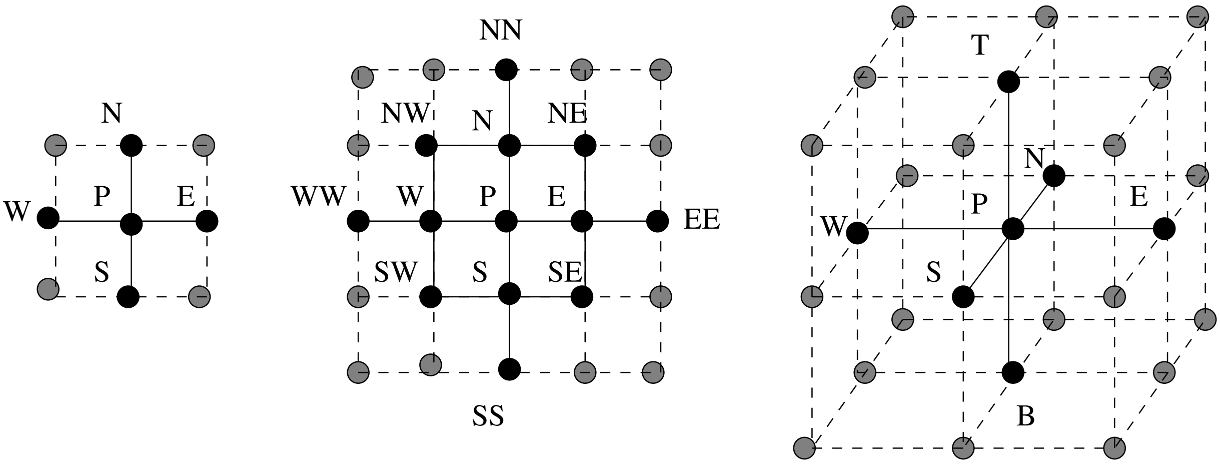
$$\boldsymbol{r}_{e,h} = \sqrt{r_{e,2h}}$$

Következmény: CDS aszimptotikusan másodrendű módszer

- A diszkretizálással kapott algebrai egyenletek szerkezete, jelölések

$$A_P \phi^P + \sum_l A_l \phi^l = Q_P$$

"számítási molekula" (computational molekule)



ábra 2: Példák számítási molekulákra két és három dimenzióban

Mátrixjelölés:

$$\boldsymbol{A}\phi = Q$$

Rácspozíció	Égtáj-jelölés	Tárolási pozíció
i, j, k	P	$l = (k-1)N_j N_i + (i-1)N_j + j$
$i-1, j, k$	W	$l - N_j$
$i, j-1, k$	S	$l - 1$
$i, j+1, k$	N	$l + 1$
$i+1, j, k$	E	$l + N_j$
$i, j, k-1$	B	$l - N_j N_i$
$i, j, k+1$	T	$l + N_j N_i$

$$A_{l,l-N_j}\phi^{l-N_j} + A_{l,l-1}\phi^{l-1} + A_{l,l}\phi^{l} + A_{l,l+1}\phi^{l+1} + A_{l,l+N_j}\phi^{l+N_j} = Q_l$$
$$A_W\phi^W + A_S\phi^S + A_P\phi^P + A_N\phi^N + A_E\phi^E = Q_P$$

- Csonkítási és diszkretizálási hiba

  Csonkítási hiba (τ_h):

$$\mathcal{L}(\Phi) = L_h(\Phi) + \boldsymbol{\tau}_h = 0$$
$$L_h(\phi^h) = (\boldsymbol{A}\phi - Q)_h = 0$$

  Diszkretizálási hiba (ϵ_h^d):

$$\Phi = \phi^h + \boldsymbol{\epsilon}_h^d$$

  Lineáris probléma esetén

$$L_h(\epsilon_h^d) = -\tau_h$$

  Hibabecslés:

  Tegyük fel, hogy vezető rendben

$$\epsilon_h^d = \alpha\ h^d + ...$$

  Ekkor

$$\Phi \approx \phi^h + \alpha\ h^d \approx \phi^{2h} + \alpha\ (2h)^d \approx \phi^{4h} + \alpha\ (4h)^d$$

  Ebből

$$p = \frac{\ln\left(\frac{\phi^{2h}-\phi^{4h}}{\phi^h-\phi^{2h}}\right)}{\ln 2}$$

  és

$$\epsilon_h^d \approx \frac{\phi^h - \phi^{2h}}{2^p - 1} = \frac{(\phi^h - \phi^{2h})^2}{2\phi^{2h} - \phi^{4h} - \phi^h}$$

- Diszkretizálási hiba vizsgálata spektrálmódszerrel

  Másodrendű CDS:

$$\frac{\delta \mathrm{e}^{ikx}}{\delta x} = \frac{\mathrm{e}^{ik(x+\Delta x)} - \mathrm{e}^{ik(x-\Delta x)}}{2\Delta x} = i\frac{\sin(k\Delta x)}{\Delta x}\mathrm{e}^{ikx} = ik_{\text{eff}}\mathrm{e}^{ikx}$$
$$k_{\text{eff}} = \frac{\sin(k\Delta x)}{\Delta x} = k - \frac{1}{6}k^3(\Delta x)^2 + ...$$

Negyedrendű CDS:

$$k_{\text{eff}} = \frac{\sin(k\Delta x)}{3\Delta x}\left[4 - \cos(k\Delta x)\right] = k - \frac{1}{30}k^5(\Delta x)^4 + ...$$

UDS:

$$k_{\text{eff}} = \frac{1 - \mathrm{e}^{-ik\Delta x}}{i\Delta x} = k - \frac{i}{2}k^2\Delta x + ...$$

3.2 Véges térfogat módszerek

- Az egyenleteknek az egyes cellákra felírt integrális alakjából indulunk ki:

  differenciális alak:

  $$\boldsymbol{\nabla}\left(\rho\phi\boldsymbol{v}\right) = \boldsymbol{\nabla}\left(\Gamma\boldsymbol{\nabla}\phi\right) + q_\phi$$

  integrális alak:

  $$\oint_S \rho\phi\boldsymbol{v}\boldsymbol{n}dS = \oint_S \Gamma\boldsymbol{\nabla}\phi\boldsymbol{n}dS + \int_\Omega q_\phi d\Omega$$

- Rácstípusok. Szabályos rácsok esetén a lehetőségek (nem egyenletes felosztás):

  (i) rácspontok a cellaközépen

  (ii) cellafelszínek felezik a rácspontok közötti távolságot

- A diszkretizálás lépései:

  (i) a fellépő felületi ill. térfogati integrálok közelítése (előbbit a cellafelszíneken felvett függvényértékek határozzák meg)

  (ii) a közelítésben használt függvényértékek interpolációja

  a rácspontokbeli függvényértékekkel

  – Felületi integrálok közelítése

  $$\oint_S f dS = \sum_k \int_{S_k} f dS$$

Másodrendű közelítések:

$$F_e = \int_{S_e} f dS = \bar{f}_e S_e \approx f_e S_e$$

$$F_e = \int_{S_e} f dS \approx \frac{S_e}{2}(f_{ne} + f_{se})$$

Negyedrendű közelítés (Simpson-formula):

$$F_e = \int_{S_e} f dS \approx \frac{S_e}{6}(f_{ne} + 4f_e + f_{se})$$

– Térfogati integrálok közelítése

Másodrendű közelítés:

$$Q_p = \int_{\Omega} q d\Omega = \bar{q}\delta\Omega \approx q_P \delta\Omega$$

Negyedrendű közelítés 2D-ban:

alakfüggvény:

$$q(x,y) = a_0 + a_1\, x + a_2\, y + a_3\, x^2 + a_4\, y^2 + a_5\, xy + a_6\, x^2y + a_7\, xy^2 + a_8\, x^2y^2$$

$$Q_p = \int_{\Omega} q d\Omega \approx \Delta x \Delta y \left[a_0 + \frac{a_3}{12}(\Delta x)^2 + \frac{a_4}{12}(\Delta y)^2 + \frac{a_8}{144}(\Delta x)^2(\Delta y)^2\right]$$

Egyenletes felosztású négyszögrácson:

$$Q_p = \frac{\Delta x \Delta y}{36}\left(16 q_P + 4q_s + 4q_n + 4q_w + 4q_e + q_{se} + q_{sw} + q_{ne} + q_{nw}\right)$$

– Függvényértékek interpolációja

∗ Upwind interpoláció (UDS)

$$\phi^e = \begin{cases} \phi^P \text{ , ha} & (v\; n)_e > 0 \\ \phi^E \text{ , ha} & (v\; n)_e < 0 \end{cases}$$

∗ Lineáris interpoláció (CDS)

$$\phi^e = \phi^E\ \lambda_e + \phi^P(1-\lambda_e)$$
$$\lambda_e = \frac{x_e - x_P}{x_E - x_P}$$
$$()_e \approx \frac{\phi^E - \phi^P}{x_E - x_P}$$

∗ Kvadratikus upwind interpoláció (QUICK)

$$\phi^e = \begin{cases} g_1\phi^E - g_2\phi^W + (1-g_1+g_2)\phi^P\ , & \text{ha} \quad (v\ n)_e > 0 \\ g_3\phi^E - g_4\phi^W + (1-g_3+g_4)\phi^P\ , & \text{ha} \quad (v\ n)_e < 0 \end{cases}$$

Szabályos négyszögrácson $(v\ n)_e > 0$ esetén

$$\phi^e = \frac{6}{8}\phi^P + \frac{3}{8}\phi^E - \frac{1}{8}\phi^W - \frac{3(\Delta x)^3}{48}\left(\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right)_P + ...$$

∗ Magasabbrendű közelítések
Negyedrendű közelítés:

$$\phi(x) = a_0 + a_1\ x + a_2\ x^2 + a_3\ x^3$$

Szabályos négyszögrácson

$$\phi^e = \frac{27}{48}\phi^P + \frac{27}{48}\phi^E - \frac{1}{16}\phi^W - \frac{1}{16}\phi^{EE}$$

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_e = a_1 + 2a_2\ x + 3a_3\ x^2$$

Szabályos négyszögrácson

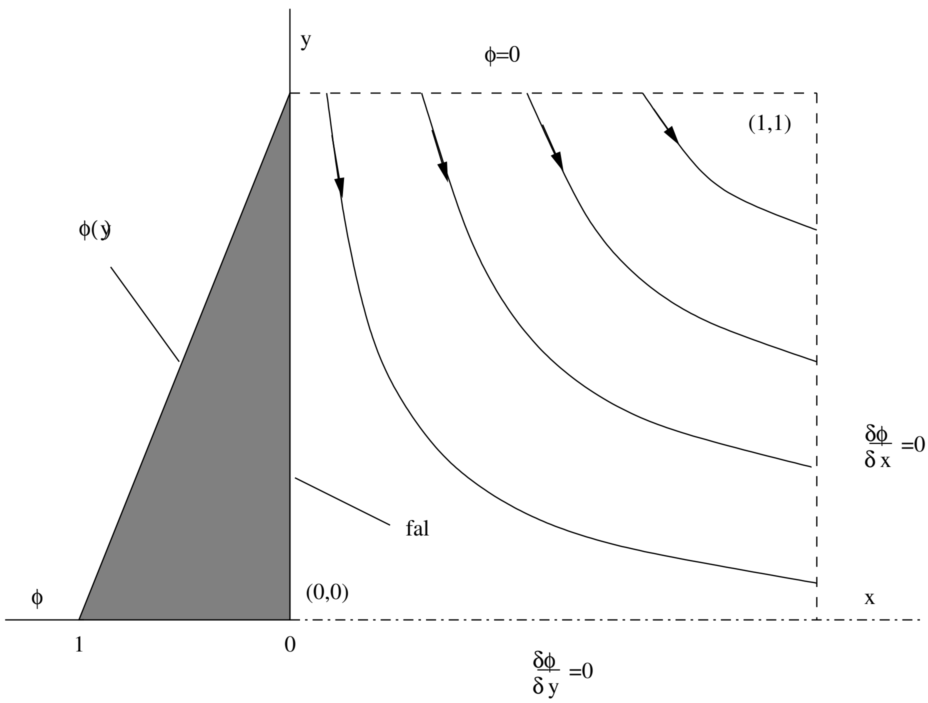
$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_e = \frac{27\phi^E - 27\phi^P + \phi^W - \phi^{EE}}{24\Delta x}$$

- Késleltetett korrekció (deferred correction)

$$F_e = F_e^L + (F_e^H - F_e^L)^{\text{old}}$$

- Határfeltételek
- Algebrai egyenletrendszer

Példák:



ábra 3: Skalár transzportja stagnációs pont körüli áramlásban. Geometria és határfeltételek.

-
-

4 Előadás. Parciális differenciálegyenletek diszkretizálása 3. Súlyozott maradékok módszere

4.1 Súlyozott maradékok módszere - Method of weighted residuals (MWR)

Végeselem-módszerek, véges térfogat-módszerek, spektrálmódszer, örvénydinamika

- Egyenlet:
$$-\frac{d}{dx}\kappa(x)\frac{du}{dx} + \mu(x)u = f(x)$$
- Határfeltételek:
$$u(0) = 0$$
$$\frac{du}{dx}(1) = 0$$
- Próbafüggvények ($\phi^k(x)$):
$$u(x) = \sum_k a_k \phi^k(x)$$
Meghatározandók az a_k együtthatók (nem-stacionárius problémáknál ezek az idő függvényei).
- Súlyfüggvények (v. tesztfüggvények, $\xi_j(x)$):
$$\int_0^1 dx\; \xi_j(x)\left(-\frac{d}{dx}\kappa(x)\frac{du}{dx} + \mu(x)u - f(x)\right)$$
$$\sum_k \left[\int_0^1 dx\; \xi_j(x)\left(-\frac{d}{dx}\kappa(x)\frac{d\phi^k}{dx} + \mu(x)\phi^k\right)\right] a_k = \int_0^1 dx\; \xi_j(x) f(x)$$

- Osztályozás a súlyfüggvények szerint:
  - $\xi_j(x) = \phi^j(x)$ és a próbafüggvények teljesítik a határfeltételeket: Galjorkin-módszer
  - $\xi_j(x) = \phi^j(x)$ és a próbafüggvények nem teljesítik a határfeltételeket: tau-módszer
  - $\xi_j(x) = \delta(x - x_j)$: Kollokációs módszer
  - $\xi_j(x) = -\frac{d}{dx}\kappa(x)\frac{d\phi^j}{dx} + \mu(x)\phi^j$: Legkisebb négyzetek módszerek
  - $\xi_j(x)$ a j-edik cellában 1, máshol nulla: véges térfogat-módszerek
- Osztályozás a próbafüggvények szerint:
  - $\phi^j(x)$ néhány szomszédos cellán kívül eltűnik: végeselem-módszerek
  - $\phi^j(x)$-k valamilyen ortogonális függvényrendszer elemei ($\mathrm{e}^{2in\pi x}$, $\sin n\pi x$, $\cos n\pi x$, Csebisev-polinomok $\cos(n \arccos(x))$, Legendre-polinomok $L_n(x)$ stb.): spektrál- és pszeudospektrál-módszerek

    Az FFT jelentősége (gyors Fourier-transzformáció): $N \ln N$ műveletigény

4.2 Végeselem-módszerek

- Parciális integrálás után:

$$\left(\kappa \frac{du}{dx}, \frac{d\xi}{dx}\right) + (\mu u, \xi) = (f, \xi) + \kappa \frac{du}{dx}\xi\bigg|_1 - \kappa \frac{du}{dx}\xi\bigg|_0$$

  ahol $(u, \xi) = \int_0^1 dx\, u(x)\, \xi(x)$

  Az eredeti probléma ekvivalens azzal, hogy keressük azt az

$$u(0) = 0$$

  Dirichlet-határfeltételnek eleget tevő függvényt, melyre minden,

$$\xi(0) = 0$$

  Dirichlet-határfeltételnek eleget tevő ξ tesztfüggvény esetén

$$\left(\kappa \frac{du}{dx}\frac{d\xi}{dx}\right) + (\mu u, \xi) = (f, \xi)$$

  teljesül.

- Neumann-határfeltétel
- Rács:

$$0 = x_0 < x_1 < x_2 < ... < x_N = 1$$

- Próbafüggvények és tesztfüggvények (Galjorkin):

$$\phi^i = \xi_i = \begin{cases} 0\,, & \text{ha } x \le x_{i-1} \\ \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}\,, & \text{ha } x_{i-1} \le x \le x_i \\ \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i}\,, & \text{ha } x_i \le x \le x_{i+1} \\ 0\,, & \text{ha } x_{i+1} \le x \end{cases}$$

  ha $i = 1, 2, ...N - 1$, és

$$\phi^N = \xi_N = \begin{cases} 0\,, & \text{ha } x \le x_{N-1} \\ \frac{x - x_{N-1}}{x_N - x_{N-1}}\,, & \text{ha } x_{N-1} \le x \le x_N \end{cases}$$

- Általánosítás magasabb dimenziókra

4.3 Spektrálmódszerek

- FFT (J.W.Cooley, J.W.Tukey, 1964, ill. Gauss, 1805)
  - Diszkrét Fourier-transzformáció:

$$F_k = \sum_{j=0}^{N-1} \mathrm{e}^{2\pi ijk/N} f_j = \sum_{j=0}^{N-1} W^{jk} f_j$$

  ahol $W = \mathrm{e}^{2\pi i/N}$.
  Inverze:

$$f_k = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \mathrm{e}^{-2\pi ijk/N} F_j$$

  - Láncos-Danielson-lemma (1942)

$$F_k = \sum_{j=0}^{N/2-1} \mathrm{e}^{2\pi i(2j)k/N} f_{2j} + \sum_{j=0}^{N/2-1} \mathrm{e}^{2\pi i(2j+1)k/N} f_{2j+1}$$

$$= \sum_{j=0}^{N/2-1} \mathrm{e}^{2\pi ijk/(N/2)} f_{2j} + W^k \sum_{j=0}^{N/2-1} \mathrm{e}^{2\pi ijk/(N/2)} f_{2j+1} = F_k^{\mathrm{e}} + W^k F_k^{\mathrm{o}}$$

  -

$$F_k^{eoooeeooeo} = f_n$$

  Ha $e \to 0$, $o \to 1$ és megfordítjuk a bitek sorrendjét, akkor a *eoooeeooeo* indexsorozatból éppen n kettes számrendszerbeli alakját kapjuk.
  - FFT ($N = 2^p$):
    * Az f_j vektor elemeinek átrendezése a fordított bitsorrend szerint.
    * A Láncos-Danielson-lemma ismételt alkalmazása a szomszédos elempárokra, elemnégyesekre, elemnyolcasokra, ... ($\log_2 N$ szint, szintenként $\sim N$ szorzás)

- Deriválás:
$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{d}{dx}\int dk\, \mathrm{e}^{ikx}\, f(k) = \int dk\, \mathrm{e}^{ikx}\, ikf(k)$$
FFT $\rightarrow$ *pontonkénti szorzás* a hullámszámmal (k) $\rightarrow$ FFT

Pl. a diffúziós egyenlet esetén
$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = D\triangle\phi$$
$$\phi^{(n+1)} = \phi^{(n)} + \Delta t D\triangle\phi^{(n)}$$

4.4 Örvénydinamika

- $\phi^j(x)$-k (két- vagy három dimenzióban) az Euler-egyenlet pontörvény-megoldásai: örvénydinamika
$$\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v} = 0 \rightarrow u_x = \frac{\partial\psi}{\partial y} \quad u_y = -\frac{\partial\psi}{\partial x}$$
$$\omega = \frac{\partial u_y}{\partial x} - \frac{\partial u_x}{\partial y} = -\triangle\psi$$
$$\frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial t} + (\boldsymbol{v}\boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{v} = -\frac{\boldsymbol{\nabla}p}{\rho} \;\rightarrow\; \frac{\partial\omega}{\partial t} + (\boldsymbol{v}\boldsymbol{\nabla})\omega = 0$$
$$\psi = \sum_j \phi^j = \sum_j \Gamma_j \ln|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_j|$$
Nemlineáris paraméterek!

Viszkózus eset:
$$\frac{\partial\omega}{\partial t} + (\boldsymbol{v}\boldsymbol{\nabla})\omega = \nu\triangle\omega$$

4.5 Egyenletrendszerek megoldása: Direkt módszerek

5 Egyenletrendszerek iteratív megoldása

5.1 Iteratív módszer általában

- $$\boldsymbol{A\phi} = \boldsymbol{Q}$$
  $$\boldsymbol{A\phi}^{(n)} = \boldsymbol{Q} - \boldsymbol{\rho}^{(n)}$$
  $$\boldsymbol{\epsilon}^{(n)} = \boldsymbol{\phi} - \boldsymbol{\phi}^{(n)}$$
  $$\boldsymbol{A\epsilon}^{(n)} = \boldsymbol{\rho}^{(n)}$$

- Iterációs eljárás:
  $$\boldsymbol{M\phi}^{(n+1)} = \boldsymbol{N\phi}^{(n)} + \boldsymbol{B}$$
  $$n \to \infty \quad \boldsymbol{\phi}^{(n)} \to \boldsymbol{\phi}$$
  $$\boldsymbol{M} - \boldsymbol{N} = \boldsymbol{A}\,, \quad \boldsymbol{B} = \boldsymbol{Q}$$
  vagy
  $$\boldsymbol{M} - \boldsymbol{N} = \boldsymbol{P}A\,, \quad \boldsymbol{B} = \boldsymbol{P}Q$$
  $\boldsymbol{P}$: prekondicionáló mátrix
  Másképp:
  $$\boldsymbol{M}\left(\boldsymbol{\phi}^{(n+1)} - \boldsymbol{\phi}^{(n)}\right) = \boldsymbol{B} - (\boldsymbol{M} - \boldsymbol{N})\,\boldsymbol{\phi}^{(n)}$$
  $$\boldsymbol{M\delta}^{(n)} = \boldsymbol{\rho}^{(n)}$$
  $\boldsymbol{\delta}^{(n)} = \boldsymbol{\phi}^{(n+1)} - \boldsymbol{\phi}^{(n)}$: korrekció

- Konvergencia

5.2 Iteratív módszerek

- Jacobi-módszer: $\boldsymbol{M}$ az $\boldsymbol{A}$ mátrix diagonális része

$$\phi_P^{(n+1)} = \frac{Q_P - A_S\phi_S^{(n)} - A_W\phi_W^{(n)} - A_N\phi_N^{(n)} - A_E\phi_E^{(n)}}{A_P}$$

- Gauss-Seidel-módszer: $\boldsymbol{M}$ az $\boldsymbol{A}$ mátrix alsó háromszögmátrixa
- SOR (successive overrelaxation): javított Gauss-Seidel-módszer

$$\phi_P^{(n+1)} = \omega \frac{Q_P - A_S \phi_S^{(n+1)} - A_W \phi_W^{(n+1)} - A_N \phi_N^{(n)} - A_E \phi_E^{(n)}}{A_P} + (1-\omega)\phi_P^{(n)}$$

  $\omega > 1$: túlrelaxalási tényező ($\omega = 1$: Gauss-Seidel-módszer)
- ILU (incomplete Cholesky factorization) és SIP (strongly implicit procedure, Stone-módszer):

6 Előadás. Időfüggő problémák

A térbeli diszkretizálás után az időfüggő parciális differenciálegyenlet közönséges differenciálegyenlet-rendszerré válik.

6.1 Közönséges differenciálegyenletek megoldási módszerei

- Példák. Explicit és implicit módszerek. Stabilitás, pontosság.

$$\frac{d\phi}{dt} = f(t, \phi)$$

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{d\phi}{dt} dt \equiv \phi^{n+1} - \phi^n = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, \phi) dt$$

A jobboldali integrál közelítésének módjától függően:

  – Explicit Euler-módszer:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, \phi) dt \approx f(t_n, \phi^n) \Delta t$$

Itt $\Delta t = t_{n+1} - t_n$

$$\phi^{n+1} = \phi^n + f(t, \phi^n) \Delta t$$

  – Implicit Euler-módszer:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, \phi) dt \approx f(t_{n+1}, \phi^{n+1}) \Delta t$$

$$\phi^{n+1} = \phi^n + f(t_{n+1}, \phi^{n+1}) \Delta t$$

  – Középpont-módszer:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, \phi) dt \approx f(t_{n+\frac{1}{2}}, \phi^{n+\frac{1}{2}}) \Delta t$$

$$\phi^{n+1} = \phi^n + f(t_{n+\frac{1}{2}}, \phi^{n+\frac{1}{2}}) \Delta t$$

– Trapéz-módszer:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t,\phi)dt \approx \frac{1}{2}\left(f(t_n,\phi^n)+f(t_{n+1},\phi^{n+1})\right)\Delta t$$

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \frac{1}{2}\left(f(t_n,\phi^n)+f(t_{n+1},\phi^{n+1})\right)\Delta t$$

- Explicit és implicit módszerek. Stabilitás

  Explicit módszer: ϕ^{n+1} nem szerepel a jobboldalon

  (Pl. explicit Euler-módszer)

  Implicit módszer: ϕ^{n+1} szerepel a jobboldalon

  (Pl. implicit Euler-módszer, trapéz-módszer)

- Pontosság A differenciálegyenlet pontos $\phi(t)$ megoldását sorbafejtjük t_n körül és feltesszük, hogy $\phi(t_n) = \phi^n$:

$$\phi(t_{n+1}) = \phi^n + \left.\frac{d\phi}{dt}\right|_{t_n} \Delta t + \frac{1}{2}\left.\frac{d^2\phi}{dt^2}\right|_{t_n} \Delta t^2 + \frac{1}{6}\left.\frac{d^3\phi}{dt^3}\right|_{t_n} \Delta t^3 + ...$$

A differenciálegyenletből és t szerinti deriváltjaiból kapjuk, hogy

$$\left.\frac{d\phi}{dt}\right|_{t_n} = f(t_n,\phi_n)$$

$$\left.\frac{d^2\phi}{dt^2}\right|_{t_n} = \left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{t_n} + f\left.\frac{\partial f}{\partial \phi}\right|_{t_n}$$

$$\left.\frac{d^3\phi}{dt^3}\right|_{t_n} = \left.\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}\right|_{t_n} + 2\,f\left.\frac{\partial^2 f}{\partial\phi\partial t}\right|_{t_n} + \left.\frac{\partial f}{\partial t}\frac{\partial f}{\partial \phi}\right|_{t_n} + f\left.\left(\frac{\partial f}{\partial \phi}\right)^2\right|_{t_n}$$

Ezzel

$$\phi(t_{n+1}) = \phi^n + f(t_n,\phi_n)\Delta t + \frac{1}{2}\left[\left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{t_n} + f\left.\frac{\partial f}{\partial \phi}\right|_{t_n}\right]\Delta t^2$$

$$+\frac{1}{6}\left[\left.\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}\right|_{t_n} + 2\,f\left.\frac{\partial^2 f}{\partial\phi\partial t}\right|_{t_n} + \left.\frac{\partial f}{\partial t}\frac{\partial f}{\partial \phi}\right|_{t_n} + f\left.\left(\frac{\partial f}{\partial \phi}\right)^2\right|_{t_n}\right]\Delta t^3 + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$

– Explicit Euler-módszer:

$$\phi^{n+1} = \phi^n + f(t, \phi^n)\Delta t$$

– Implicit Euler-módszer:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, \phi)dt \approx f(t_{n+1}, \phi^{n+1})\Delta t$$

$$\phi^{n+1} = \phi^n + f(t_{n+1}, \phi^{n+1})\Delta t$$

– Középpont-módszer:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, \phi)dt \approx f(t_{n+\frac{1}{2}}, \phi^{n+\frac{1}{2}})\Delta t$$

$$\phi^{n+1} = \phi^n + f(t_{n+\frac{1}{2}}, \phi^{n+\frac{1}{2}})\Delta t$$

– Trapéz-módszer:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, \phi)dt \approx \frac{1}{2}\left(f(t_n, \phi^n) + f(t_{n+1}, \phi^{n+1})\right)\Delta t$$

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \frac{1}{2}\left(f(t_n, \phi^n) + f(t_{n+1}, \phi^{n+1})\right)\Delta t$$

- Prediktor-korrektor módszerek

  Alapgondolat: egyesítsük az explicit és az implicit módszerek előnyeit (az explicit módszerek nem igényelnek külön iterációt az új változó kiszámításához, az implicit módszerek pedig általában stabilak)

  Pl.:

  prediktor ("megjósolja" ϕ^{n+1}-et, a becslés $\phi^{n+1\,*}$)

$$\phi^{n+1\,*} = \phi^n + f(t_n, \phi^n)\Delta t$$

  korrektor (implicit módszer volna, de ϕ^{n+1} helyett a prediktorral számolt $\phi^{n+1\,*}$-ot használjuk)

$$\phi^{n+1} = \phi^n + f(t_{n+1}, \phi^{n+1\,*})\Delta t$$

- Multipont-módszerek
  - (m-edrendű) Adams-Bashforth-módszer: a $f(t_n, \phi^n)$, $f(t_{n-1}, \phi^{n-1})$, ..., $f(t_{n-m}, \phi^{n-m+1})$ pontokra (t-ben) polinomot illesztünk és ezt a polinomot integráljuk t_n-től t_{n+1}-ig.

    elsőrendű módszer: explicit Euler-módszer

    másodrendű módszer:

    $$\phi^{n+1} = \phi^n + \frac{\Delta t}{2}\left[3f(t_n, \phi^n) - f(t_{n-1}, \phi^{n-1})\right]$$

    harmadrendű módszer:

    $$\phi^{n+1} = \phi^n + \frac{\Delta t}{12}\left[23f(t_n, \phi^n) - 16f(t_{n-1}, \phi^{n-1} + 5f(t_{n-2}, \phi^{n-2})\right]$$

  - (m-edrendű) Adams-Moulton-módszer: a $f(t_{n+1}, \phi^{n+1})$, $f(t_n, \phi^n)$, ..., $f(t_{n-m+1}, \phi^{n-m+1})$ pontokra (t-ben) polinomot illesztünk és ezt a polinomot integráljuk t_n-től t_{n+1}-ig.

    elsőrendű módszer: implicit Euler-módszer

    másodrendű módszer: trapéz-módszer

    harmadrendű módszer:

    $$\phi^{n+1} = \phi^n + \frac{\Delta t}{12}\left[5f(t_{n+1}, \phi^{n+1}) + 8f(t_n, \phi^n) - f(t_{n-1}, \phi^{n-1})\right]$$

  Gyakori prediktor-korrektor-módszer:

  prediktor: (m-1)-edrendű Adams-Bashforth-módszer

  korrektor: m-edrendű Adams-Moulton-módszer

- Runge-Kutta-módszerek

  Prediktor-korrektor-módszer t_n és t_{n+1} közötti változóértékek felhasználásával.

  másodrendű módszer:

$$\phi^{n+\frac{1}{2}\,*} = \phi^n + \frac{\Delta t}{2} f(t_n, \phi^n)$$
$$\phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t f(t_{n+\frac{1}{2}}, \phi^{n+\frac{1}{2}\,*})$$

  negyedrendű módszer:

$$\phi^{n+\frac{1}{2}\,*} = \phi^n + \frac{\Delta t}{2} f(t_n, \phi^n)$$
$$\phi^{n+\frac{1}{2}\,**} = \phi^n + \frac{\Delta t}{2} f(t_{n+\frac{1}{2}}, \phi^{n+\frac{1}{2}\,*})$$
$$\phi^{n+1\,*} = \phi^n + \Delta t f(t_{n+\frac{1}{2}}, \phi^{n+\frac{1}{2}\,**})$$
$$\phi^{n+1} = \phi^n + \frac{\Delta t}{6}\left[f(t_n, \phi^n) + 2f(t_{n+\frac{1}{2}}, \phi^{n+\frac{1}{2}\,*}) + 2f(t_{n+\frac{1}{2}}, \phi^{n+\frac{1}{2}\,**}) + f(t_{n+1}, \phi^{n+1\,*})\right]$$

- Egyéb módszerek

  Az időderivált végesdifferencia-közelítése. Pl.:

$$\left.\frac{d\phi}{dt}\right|_{t_{n+1}} \approx \frac{3\phi^{n+1} - 4\phi^n + \phi^{n-1}}{2\Delta t}$$

  Ezzel:

$$\phi^{n+1} = \frac{4}{3}\phi^n - \frac{1}{3}\phi^{n-1} + \frac{2}{3} f(t_{n+1}, \phi^{n+1})\Delta t$$

6.2 Közönséges differenciálegyenletek-rendszerek megoldási módszerei (alkalmazás diszkretizált transzportegyenletre)

- Explicit Euler-módszer

Példa:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -u\frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\Gamma}{\rho}\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$$

diszkretizálva:

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n + \left[-u\frac{\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n}{2\Delta x} + \frac{\Gamma}{\rho}\frac{\phi_{i+1}^n + \phi_{i-1}^n - 2\phi_i^n}{(\Delta x)^2}\right]\Delta t$$

azaz

$$\phi_i^{n+1} = (1-2d)\phi_i^n + \left(d - \frac{c}{2}\right)\phi_{i+1}^n + \left(d + \frac{c}{2}\right)\phi_{i-1}^n$$

ahol

$$d = \frac{\Gamma \Delta t}{\rho(\Delta x)^2}$$

és

$$c = \frac{u\Delta t}{\Delta x}$$

- Neumann-féle stabilitási analízis:

$$\boldsymbol{\phi}^{n+1} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{\phi}^n$$

Elhanyagoljuk a határfeltételeket és az $\boldsymbol{A}$ mátrix sajátértékeit vizsgáljuk. Stabilitáshoz a sajátértékeknek abszolút értékben 1-nél kisebbnek kell lenniük.

- "Leapfrog"-módszer

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^{n-1} + f(t_n, \phi^n)2\Delta t$$

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^{n-1} + \left[-u\frac{\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n}{2\Delta x} + \frac{\Gamma}{\rho}\frac{\phi_{i+1}^n + \phi_{i-1}^n - 2\phi_i^n}{(\Delta x)^2}\right]2\Delta t$$

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^{n-1} - 4d\phi_i^n + (2d-c)\phi_{i+1}^n + (2d+c)\phi_{i-1}^n$$

DuFort-Frankel-módszer:

$$\phi_i^n \approx \frac{1}{2}\left(\phi_i^{n-1} + \phi_i^{n+1}\right)$$

$$(132d)\phi_i^{n+1} = (1-2d)\phi_i^{n-1} + (2d-c)\phi_{i+1}^n + (2d+c)\phi_{i-1}^n$$

- Implicit Euler-módszer
- Crank-Nicolson-módszer
- Egyéb módszerek

  Turbulencia szimulációjakor negyedrendű Runge-Kutta ill. Adams-módszerek használatosak.

7 A Navier-Stokes-egyenletek numerikus megoldása

7.1 A Navier-Stokes-egyenletek speciális tulajdonságai

- A nyomás
- Vektorváltozók
- Energiamegmaradás