

Západočeská univerzita v Plzni

Fakulta aplikovaných věd

Katedra matematiky

**Numerické metody pro problémy s parciálními
diferenciálními inkluzemi**

Diplomová práce

Alexej Moskovka

Vedoucí práce: doc. Ing. Marek Brandner, Ph.D.

Plzeň 2020

Bibliografické údaje

Moskovka, A., 2020: Numerické metody pro problémy s parciálními diferenciálními inkluzemi. [Numerical methods for partial differential inclusions. Mgr. Dissertation, in Czech.] – 54 p., Faculty of Applied Sciences, University of West Bohemia, Plzeň, Czech Republic.

Anotace

Tato diplomová práce se zabývá parciálními diferenciálními rovnicemi s diferenciálními inkluzemi, které těsně souvisí s pojmem ‘mnohoznačné zobrazení’. Text této práce je zaměřen hlavně na numerické postupy určené pro řešení reálných fyzikálních problémů, které jsou obvykle modelovány prostřednictvím parciálních diferenciálních rovnic s diferenciální inkluzí. Některé vybrané numerické přístupy jsou zde aplikovány na řešení jednoho reálného modelu formulovaného technikou společnosti Bobcat, který popisuje proces odmrazování čelního skla motorového vozidla. Obecně tyto numerické postupy můžeme rozdělit na dvě kategorie. První část používá teoretický aparát, pomocí kterého jsme se schopni zbavit diferenciální inkluze, čímž převedeme příslušnou soustavu parc. dif. rovnic s dif. inkluzí na soustavu bez dif. inkluze. Druhá část je založena na aproximaci mnohoznačného zobrazení (které je dáno diferenciálními inkluzemi) obyčejnou funkcí jedné proměnné (v literatuře je tato funkce často označovaná jako Yosidova aproximace).

Annotation

This dissertation deals with partial differential equations with differential inclusions which are closely connected with the term ‘multi-valued mapping’. Mainly, this text is focused on numerical methods for solving real physical problems which are usually simulated by the systems of partial differential equations with differential inclusion. In this text some particular numerical approaches are applied on solving one real model which was developed by technicians from Bobcat and describes phase transitions during the process of defrosting the windshield of a vehicle. In general, such numerical methods can be divided in two categories. The first one uses mathematical apparatus for eliminating differential inclusion from the particular system of partial differential equations. The second category is based on the approximation of multi-valued mapping by a function of one variable (in the literature such function is often denoted as Yosida approximation).

Klíčová slova

Parciální diferenciální rovnice, diferenciální inkluze, mnohoznačné zobrazení, metoda konečných diferencí, řád konvergence numerické metody, MATLAB, WOLFRAM MATHEMATICA.

Key words

Partial differential equation, differential inclusion, multi-valued mapping, finite difference method, rate of convergence of numerical method, MATLAB, WOLFRAM MATHEMATICA.

Čestné prohlášení

Prohlašuji, že svoji diplomovou práci jsem vypracoval samostatně pouze s použitím pramenů a literatury uvedených v seznamu citované literatury.

V Plzni dne

podpis studenta

Poděkování

Chtěl bych poděkovat především svému školiteli doc. Ing. Markovi Brandnerovi, Ph.D. za vedení mé diplomové práce, a také za všechny odborné rady a veškerou pomoc. Dále mé poděkování patří panu RNDr. Tomášovi Roubalovi, který výrazně přispěl k sestavení teoretického aparátu použitého k aplikaci numerických přístupů, a také za jeho rady a pomoc při napsání této diplomové práce. Také bych chtěl poděkovat RNDr. Pavlu Krejčímu, CSc., který je autorem modelu řešeného v této práci, a pracovníkům společnosti Bobcat Jaroslavu Staňkovi a Jaroslavu Benešovi, kteří byli ochotni přispět svými radami, a také za poskytnutí některých experimentálně zjištěných parametrů modelu. Nakonec mé poděkování patří Ing. Zdeňkovi Veselému, Ph.D. za jeho odborné rady.

Obsah

Úvod	1
1 1D verze modelu	4
1.1 Odstranění diferenciální inkluze	5
1.2 Aproximace mnohoznačného zobrazení klasickou funkcí	20
1.3 Vyšetřování konvergence	24
1.3.1 Vylepšení konvergence použitím poměrných diferencí vyššího řádu	29
2 2D verze modelu	33
3 3D verze modelu	42
4 Shrnutí teoretických poznatků	45
4.1 Teorie mnohoznačných funkcí	45
4.2 Formulace úlohy a existence řešení	48
4.3 Aproximace mnohoznačného zobrazení klasickou funkcí	49
4.4 Newtonova metoda pro řešení soustav rovnic	49
4.4.1 Klasická Newtonova metoda	49
4.4.2 Zobecnění pro nehladké funkce	50
Závěr	52

Úvod

V tomto textu budeme studovat matematický model popisující proces odmrazování čelního skla motorového vozidla (konkrétně se bude jednat o bagr), který je tvořen soustavou parciálních diferenciálních rovnic s diferenciální inkluzí. Mějme oblasti Ω_g, Ω_i , které budou odpovídat čelnímu sklu bagru a vrstvě ledu vytvořené na povrchu čelního skla (zde předpokládáme, že sklo i led můžeme dostatečně přesně popsat oblastí obdélníkového tvaru). Sklo je zevnitř vyhříváné tepelným zdrojem, jehož teplotu označíme jako $\theta_h(t)$ (t je časová proměnná). Teplo vycházející ze zdroje prochází sklem a následně zahřívá tenkou vrstvu ledu, která se nachází na vnější straně čelního skla. Označme funkcí $\theta_{out}(t)$ venkovní teplotu. Dále předpokládejme, že celý proces odmrazování budeme sledovat do času T a označme příslušný časový interval $(0, T)$. Stav celé soustavy v libovolném bodě a libovolném čase (jinými slovy, v libovolném bodě $\Omega \times (0, T)$, kde $\Omega = \Omega_i \cup \Omega_g$) necht' je popsán funkcemi $\theta^s(x, t)$, $\theta^i(x, t)$, $s(x, t)$, kde $\theta^s(x, t)$ resp. $\theta^i(x, t)$ jsou teploty skla resp. ledu ve stupních Kelvina a $x \in \Omega_g$ resp. $x \in \Omega_i$ ($\Omega_g, \Omega_i \subset \mathbb{R}^n$, kde n je dimenze, ve které daný model uvažujeme). Funkce $s(x, t)$ popisuje skupenství ledu a její hodnoty leží v intervalu $[-1, 1]$. Hodnota $s = -1$ znamená, že látka je v pevném skupenství, zatímco $s = 1$ odpovídá kapalnému skupenství. V ostatních případech, kdy $-1 < s < 1$, se voda nachází v přechodném stavu mezi pevným a kapalným skupenstvím (jde tedy o led, jehož teplota je rovna 0°C , a navíc tomuto ledu byla dodána tepelná energie ostře menší než skupenské teplo tání, které odpovídá energii potřebné k jeho úplnému roztání).

Poznámka 1. Indexy i, g odpovídají anglickému překladu ('ice' = led, 'glass' = sklo).

Poznámka 2. V tomto textu záměrně používáme slovní spojení "skupenství ledu" místo "skupenství vody" z toho důvodu, že v našem modelu a v následujících výpočtech voda vystupuje převážně v pevném skupenství nebo v přechodném stavu.

Celý proces odmrazování čelního skla je popsán následující soustavou parciálních diferenciálních rovnic, které plynou z druhého zákona termodynamiky, a diferenciální inkluze obsažená v této soustavě vychází z Clausiovy-Duhemovy nerovnosti (viz [1]).

$$c_g \theta_t^g - \kappa_g \Delta \theta^g = 0 \quad na \quad \Omega_g \times (0, T), \quad (1)$$

$$c_i \theta_t^i + (L(s))_t - \kappa_i \Delta \theta^i = 0 \quad na \quad \Omega_i \times (0, T), \quad (2)$$

$$\rho s_t + \partial l(s) \ni \frac{1}{\theta_c} (\theta^i - \theta_c) \quad na \quad \overline{\Omega_i} \times (0, T), \quad (3)$$

$$\theta^g(x, 0) = \theta_0^g(x) \quad na \quad \Omega_g,$$

$$\theta^i(x, 0) = \theta_0^i(x) \quad na \quad \Omega_i, \quad (4)$$

$$s(x, 0) = s_0(x) \quad na \quad \Omega_i,$$

$$-\kappa_i \nabla \theta^i \cdot n = \alpha (\theta^i - \theta^g) \quad na \quad \Gamma \times (0, T), \quad (5)$$

$$-\kappa_g \nabla \theta^g \cdot n = \alpha (\theta^g - \theta^i) \quad na \quad \Gamma \times (0, T),$$

$$-\kappa_i \nabla \theta^i \cdot n = 0 \quad na \quad \Gamma_i^0 \times (0, T), \quad (6)$$

$$-\kappa_g \nabla \theta^g \cdot n = 0 \quad na \quad \Gamma_g^0 \times (0, T),$$

$$-\kappa_i \nabla \theta^i \cdot n = \alpha_i (\theta^i - \theta_{out}) \quad na \quad \Gamma_i \times (0, T), \quad (7)$$

$$-\kappa_g \nabla \theta^g \cdot n = \alpha_g (\theta^g - \theta_h) \quad na \quad \Gamma_g \times (0, T).$$

θ_c je teplota tání ledu (trojný bod vody).

c_i, c_g jsou měrné tepelné kapacity ledu a skla.

κ_i, κ_g jsou tepelné vodivosti (thermal conductivity) ledu a skla.

$\alpha_i, \alpha_g, \alpha$ jsou součinitele tepelné vodivosti (heat transfer coefficient) na rozhraních led-okolí, sklo-kabina a led-sklo.

ρ je tzv. phase relaxation time.

$L(s)$ je funkce určující skupenské teplo ledu.

Γ je společná hranice ledu a skla.

Γ_i^0, Γ_g^0 jsou boční stěny ledu a skla, kde nedochází k žádné výměně tepla s okolím.

Γ_i, Γ_g jsou vnější hranice ledu a skla, kde dochází k výměně tepla s okolím.

Poznámka 3. V rovnici (2) je symbolem $(L(s))_t$ označena časová derivace složené funkce $L \circ s$. Použitím pravidla pro derivaci složené funkce (v modelu uvažujeme hladkou funkci $L(s)$) dostáváme

$$(L(s))_t = \frac{dL}{dt}(s) = L'(s) \frac{\partial s}{\partial t}(x, t), \quad x \in \overline{\Omega_i}.$$

Rovnice (1) resp. (2) vycházejí z druhého zákona termodynamiky a popisují rozložení teploty skla resp. ledu uvnitř svých oblastí Ω_g resp. Ω_i . Rovnice (3), která vychází z Clausiovy-Duhemovy nerovnosti, obsahuje diferenciální inkluzi s mnohoznačným zobrazením $\partial l(s)$. Tato

rovnice popisuje rychlost změny skupenství ledu. Vztahy (4) udávají počáteční rozložení teploty skla a ledu a počáteční skupenství ledu. Okrajové podmínky průchodu tepla na rozhraní led-sklo jsou dány vztahy (5) (tyto vztahy odpovídají tzv. přechodu tepla konvekcí). V našem modelu zanedbáváme výměnu tepla s okolím skrz boční stěny, což je dáno okrajovými podmínkami (6). Výměna tepla na hranicích led-okolí a sklo-kabina je vyjádřena vztahy (7).

V dalším textu uvádíme numerické postupy, kterými se budeme snažit danou úlohu vyřešit. Pro lepší přehlednost začínáme s jednodimenzionální verzí daného modelu, kde dochází k určitým zjednodušením. V dalších kapitolách řešíme tento model ve dvou, a následně i ve třech dimenzích, kde na jednu stranu dochází k určitým komplikacím (např. kvůli nehomogennímu rozložení tepelného zdroje), ale na druhou stranu dostáváme výsledky více odpovídající reálné situaci.

Následující kapitola obsahuje přehled numerických metod, které aplikujeme na náš model převedený do jedné dimenze.

Kapitola 1

1D verze modelu

Pro začátek převedeme celý model (1) - (7) do jedné dimenze. Původní oblast Ω se nám zjednoduší na interval $[x_a, x_b]$. Dále rozdělme tento interval na dva podintervaly $[x_a, x_m]$ a $[x_m, x_b]$, které postupně odpovídají oblastem ledu a skla. Bod x_m je bod dotyku ledu a skla a je průnikem těchto dvou intervalů. Vzhledem k tomu, že Laplaceův operátor v jedné dimenzi odpovídá druhé derivaci a derivace podle normály je obyčejná derivace (případně její -1 násobek), zjednoduší se nám vztahy (1) - (7) na tvar

$$c_g \theta_t^g - \kappa_g \theta_{xx}^g = 0 \quad na \quad (x_m, x_b) \times (0, T), \quad (1.1)$$

$$c_i \theta_t^i + L'(s) s_t - \kappa_i \theta_{xx}^i = 0 \quad na \quad (x_a, x_m) \times (0, T), \quad (1.2)$$

$$\rho s_t + \partial l(s) \ni \frac{1}{\theta_c} (\theta^i - \theta_c) \quad na \quad [x_a, x_m] \times (0, T), \quad (1.3)$$

$$\theta^g(x, 0) = \theta_0^g(x) \quad na \quad [x_m, x_b],$$

$$\theta^i(x, 0) = \theta_0^i(x) \quad na \quad [x_a, x_m], \quad (1.4)$$

$$s(x, 0) = s_0(x) \quad na \quad [x_a, x_m],$$

$$-\kappa_i \theta_x^i = \alpha (\theta^i - \theta^g) \quad na \quad x_m \times (0, T), \quad (1.5)$$

$$\kappa_g \theta_x^g = \alpha (\theta^g - \theta^i) \quad na \quad x_m \times (0, T),$$

$$\kappa_i \theta_x^i = \alpha_i (\theta^i - \theta_{out}) \quad na \quad x_a \times (0, T), \quad (1.6)$$

$$-\kappa_g \theta_x^g = \alpha_g (\theta^g - \theta_h) \quad na \quad x_b \times (0, T).$$

Je třeba zdůraznit, že u dvou vztahů v (1.5) a (1.6) se nám oproti (5) a (7) změnilo znaménko kvůli opačné orientace vnější normály. Jelikož v jedné dimenzi nemáme žádné boční stěny, nemáme zde žádnou analogii okrajovým podmínkám (6). Tento 1D model nyní budeme řešit, a to numericky metodou konečných diferencí.

Pro časovou proměnnou zvolme implicitní Eulerovu metodu. Na základě této metody zavedeme diskretizaci časové proměnné, čímž dostaneme množinu časových diskretizačních bodů $\{0 = t_0, t_1, \dots, t_K = T\}$, a označme Δt příslušný krok diskretizace (uvažujeme ekvidistantní dělení). Stejný postup aplikujeme také na prostorovou proměnnou, nicméně přesnou diskretizaci zavedeme až v dalším textu. Je to z toho důvodu, že oproti časové diskretizaci je zde třeba správně zohlednit bod x_m , který je bodem dotyku ledu a skla.

1.1 Odstranění diferenciální inkluze

První verze numerického modelu bude založena na tom, že v systému, který je dán vztahy (1.1) - (1.6), odstraníme diferenciální inkluzi, čímž se nám tato soustava parciálních diferenciálních rovnic s diferenciální inkluzí převedeme na soustavu dvou parciálních diferenciálních rovnic (s příslušnými počátečními a okrajovými podmínkami). Tento postup zde nyní popíšeme (následující kroky jsou založené na teorii obsažené v kapitole 4, podrobněji viz [2]). Vezměme náš vztah z (1.3)

$$\rho s_t + \partial l(s) \ni \frac{1}{\theta_c} (\theta^i - \theta_c)$$

a vynásobíme celou rovnicí zlomkem $\frac{1}{\rho}$ (tato úprava je ekvivalentní, protože $\rho > 0$). Dostaneme

$$s_t + \frac{1}{\rho} \partial l(s) \ni \frac{1}{\rho \theta_c} (\theta^i - \theta_c).$$

Vzhledem k tomu, jak vypadá mnohoznačné zobrazení $\partial l(s)$ (viz obr. 1.2), vynásobením kladným číslem se nezmění. Můžeme proto poslední vztah ekvivalentně psát ve tvaru

$$s_t + \partial l(s) \ni \frac{1}{\rho \theta_c} (\theta^i - \theta_c).$$

Nyní použijeme implicitní Eulerovu metodu a časovou derivaci s_t (v čase t_{n+1}) aproximujeme zpětnou poměrnou diferencí. Dostaneme

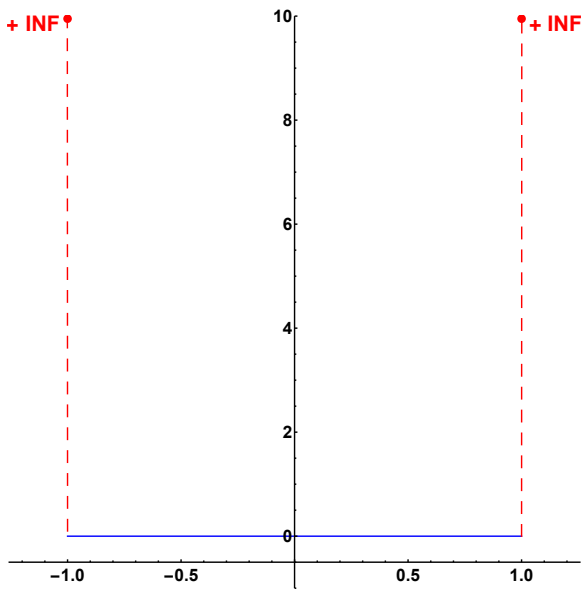
$$\frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} + \partial l(s^{n+1}) = \frac{1}{\rho \theta_c} (\theta^{i,n+1} - \theta_c),$$

kde Δt je krok dělení časové proměnné (uvažujeme rovnoměrné dělení). Vynásobením celé rovnice Δt a převedením s_n na pravou stranu dostáváme

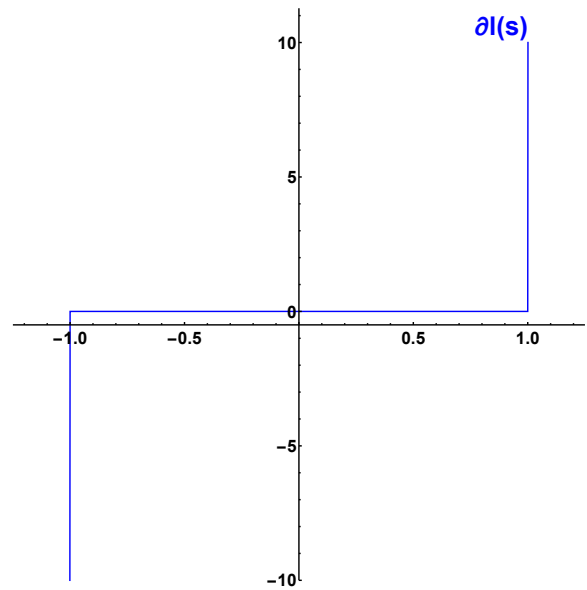
$$s^{n+1} + \Delta t \partial l(s^{n+1}) = \frac{\Delta t}{\rho \theta_c} (\theta^{i,n+1} - \theta_c) + s^n.$$

Opět vzhledem ke tvaru $\partial l(s)$ můžeme vynechat Δt , kterým je násoben. Poslední vztah lze tedy ekvivalentně psát ve tvaru

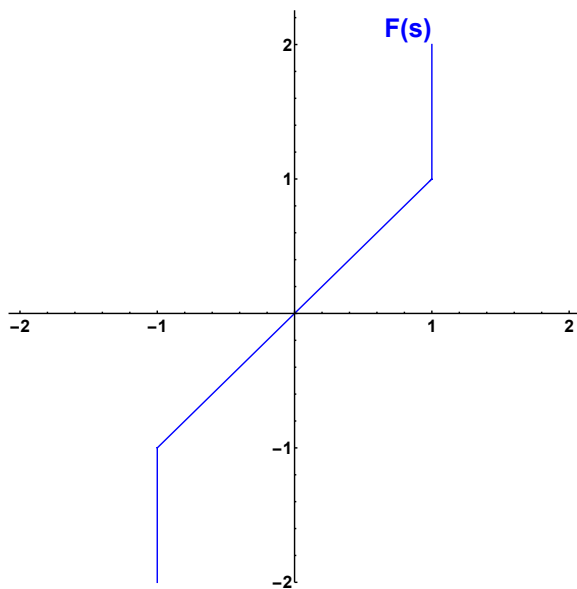
$$s^{n+1} + \partial l(s^{n+1}) = \frac{\Delta t}{\rho \theta_c} (\theta^{i,n+1} - \theta_c) + s^n.$$



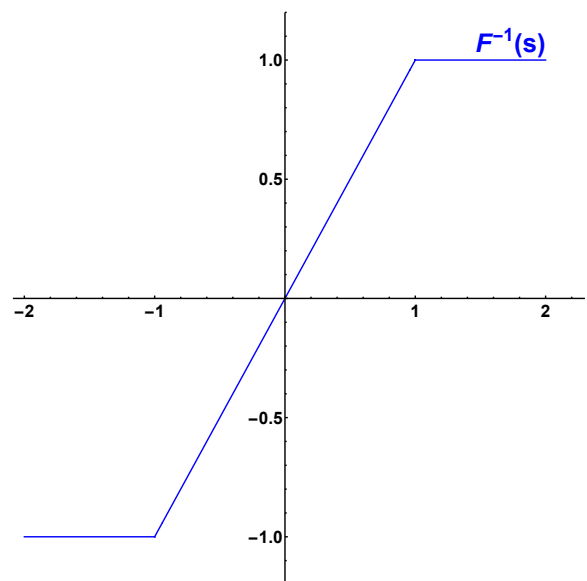
Obrázek 1.1: Funkce $l(s)$ (v literatuře je někdy označovaná jako 'indicator function of the interval').



Obrázek 1.2: Subdiferenciál funkce $l(s)$ jakožto mnohoznačné zobrazení $\partial l(s)$.



Obrázek 1.3: $F(s)$ jakožto mnohoznačné zobrazení.



Obrázek 1.4: Jednoznačná inverze $F^{-1}(s)$.

Zavedeme-li (mnohoznačné) zobrazení

$$F(s^{n+1}) = s^{n+1} + \partial l(s^{n+1}),$$

dostaneme vztah pro s^{n+1}

$$s^{n+1} = F^{-1}\left(\frac{\Delta t}{\rho \theta_c}(\theta^{i,n+1} - \theta_c) + s^n\right). \quad (1.7)$$

Je třeba zdůraznit, že oproti $F(s)$ je zobrazení $F^{-1}(s)$ jednoznačné, tedy je to klasická funkce (viz obr. 1.4).

Poznámka 4. Funkci $l(s)$ na obr. 1.1 získáme při odvozování modelu (1) - (7). Přesněji, objeví se jako integrační konstanta při integrování vztahu pro tzv. volnou energii a volí se tak, aby hodnoty funkce $s(x,t)$ byly v intervalu $[-1, 1]$. Z toho důvodu se tato funkce v literatuře někdy označuje jako "indikátorová funkce intervalu". Přesné odvození modelu (1) - (7) vyžaduje hlubší poznatky z oblasti fyziky a je nad rámec tohoto textu. Podrobnosti lze najít v [1].

Poznámka 5. V \mathbb{R} si lze subdiferenciál funkce f (v našem případě se jedná o subdiferenciál $\partial l(s)$ funkce $l(s)$) v bodě x představit jako množinu směrnic všech přímek procházejících bodem $(x, f(x))$ takových, že jejich průnik s grafem f je pouze bod $(x, f(x))$ (tedy každá taková přímka musí ležet pod grafem f a v bodě x má hodnotu $f(x)$). Existuje-li derivace f v bodě x , potom hodnota subdiferenciálu v tomto bodě je přímo hodnota derivace. Přesnou definici subdiferenciálu pro obecný případ \mathbb{R}^n lze najít v kapitole 4.

Nyní pomocí dopředných/zpětných a centrálních poměrných diferencí aproximujeme všechny derivace vystupující v rovnicích (1.1) - (1.6) popisujících náš 1D model. Pro první časové derivace použijeme zpětnou poměrnou diferenci, pro první prostorové derivace vystupující v okrajových podmínkách použijeme zpětnou nebo dopřednou poměrnou diferenci. Pro druhou prostorovou derivaci použijeme druhou centrální diferenci. Dostaneme vztahy, které odpovídají rovnicím (1.1) a (1.2),

$$c_g \frac{\theta_j^{g,n+1} - \theta_j^{g,n}}{\Delta t} - \kappa_g \frac{\theta_{j-1}^{g,n+1} - 2\theta_j^{g,n+1} + \theta_{j+1}^{g,n+1}}{(\Delta x)^2} = 0, \quad (1.8)$$

$$c_i \frac{\theta_j^{i,n+1} - \theta_j^{i,n}}{\Delta t} + L'(s_j^{n+1}) \frac{F^{-1}\left(\frac{\Delta t}{\rho} \frac{\theta_j^{i,n+1} - \theta_c}{\theta_c}\right) - s_j^n}{\Delta t} - \kappa_i \frac{\theta_{j-1}^{i,n+1} - 2\theta_j^{i,n+1} + \theta_{j+1}^{i,n+1}}{(\Delta x)^2} = 0, \quad (1.9)$$

kde j je prostorový index a n je časový index. V posledním vztahu není třeba vyjadřovat s_n pomocí $F^{-1}(s)$, jelikož v n -tém časovém kroku je to známá hodnota. Je třeba zdůraznit, že tato soustava neobsahuje člen s_j^{n+1} , který jsme vyjádřili z rovnice (1.3) pomocí funkce $F^{-1}(s)$.

Tato soustava dvou algebraických rovnic nyní obsahuje pouze dvě neznáme (teploty ledu a skla). Příslušné okrajové podmínky v 1D (vztahy (1.5) a (1.6)) přejdou na tvar

$$\kappa_i \frac{\theta_1^{i,n+1} - \theta_0^{i,n+1}}{\Delta x} = \alpha_i (\theta_0^{i,n+1} - \theta_{out}^{n+1}) \quad na \ x_a \times (0, T), \quad (1.10)$$

$$-\kappa_i \frac{\theta_N^{i,n+1} - \theta_{N-1}^{i,n+1}}{\Delta x} = \alpha (\theta_N^{i,n+1} - \theta_0^{g,n+1}) \quad na \ x_m \times (0, T), \quad (1.11)$$

$$\kappa_g \frac{\theta_1^{g,n+1} - \theta_0^{g,n+1}}{\Delta x} = \alpha (\theta_0^{g,n+1} - \theta_N^{i,n+1}) \quad na \ x_m \times (0, T),$$

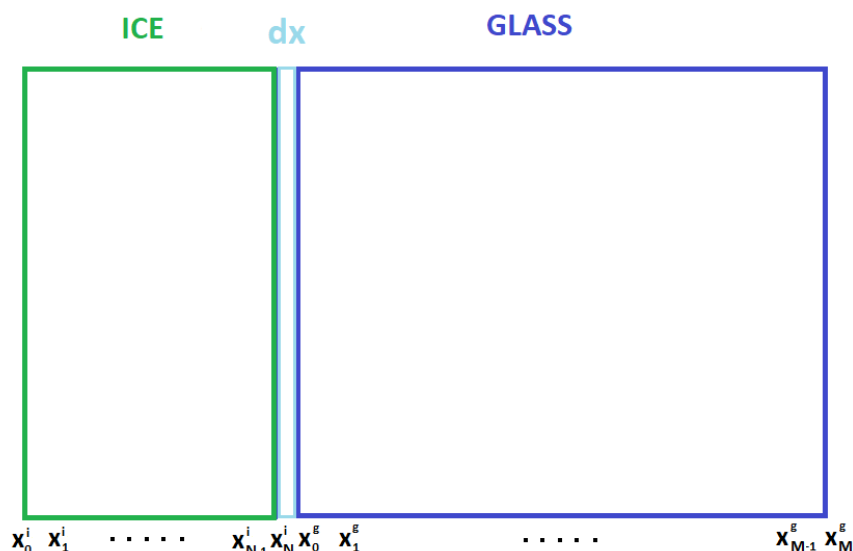
$$-\kappa_g \frac{\theta_M^{g,n+1} - \theta_{M-1}^{g,n+1}}{\Delta x} = \alpha_g (\theta_M^{g,n+1} - \theta_h^{n+1}) \quad na \ x_b \times (0, T). \quad (1.12)$$

Máme $N + 1$ dělicích bodů prostorové proměnné pro led a $M + 1$ dělicích bodů pro sklo, tedy dohromady $N + M + 2$ neznámých. Rovnice (1.8) a (1.9) platí uvnitř oblastí ledu a skla, tedy pro $x_1^i, x_2^i, \dots, x_{N-1}^i, x_1^g, x_2^g, \dots, x_{M-1}^g$. Pro zbývající body $x_0^i, x_N^i, x_0^g, x_M^g$ máme okrajové podmínky (1.10), (1.11), (1.12). Počet neznámých je tedy roven počtu rovnic.

Je třeba zdůraznit několik věcí ohledně našeho numerického modelu (viz obr. 1.5). Body x_N^i a x_0^g nejsou totožné, je mezi nimi mezera (na obrázku označená jako ' dx '). Toto má dokonce fyzikální opodstatnění. Jak se ukáže v dalším textu (až provedeme konkrétní výpočty), teplota celého systému nemusí být v bodě dotyku ledu a skla spojitá, tedy mezi hodnotami $\theta_N^{i,n}$ a $\theta_0^{g,n}$ může být nějaký skok v teplotě. To není ve sporu s naším původním fyzikálním modelem, jelikož okrajové podmínky (5) v něm vystupující popisují přestup tepla konvekci. Vzhledem k tomu, že v reálné situaci je teplota spojitou funkcí, lze rozdíl teploty v bodě dotyku ledu a skla vysvětlit existencí '*infinitesimalně*' tenké vrstvy mezi ledem a sklem, kde dochází ke 'zhlazování' teploty. Toto zhlazování v našem numerickém modelu ale nezachytíme.

Poznámka 6. dx na obr. 1.5 nemá nic společného s hodnotou Δx , která odpovídá normě prostorové diskretizace. Navíc tloušťka této '*infinitesimalně*' tenké vrstvy dx nevystupuje ve vztazích (1.8) - (1.12), které popisují původní 1D model daný vztahy (1.1) - (1.6), a tedy nemá vliv na výpočty, které budeme provádět v dalším textu.

Dále je třeba také zdůraznit, že soustava daná vztahy (1.1) a (1.2) není lineární kvůli zobrazení $F^{-1}(s)$ a funkci $L(s)$, která odpovídá skupenskému teplu. Zatímco skupenské teplo nemusí být obecně lineární, v našem modelu budeme uvažovat lineární funkci $L(s)$. Z toho plyne, že jediným nelineárním členem bude zobrazení $F^{-1}(s)$. Od této chvíle máme dvě možnosti jak postupovat. Můžeme zkusit náš numerický model upravit tak, že výsledná soustava bude lineární, anebo vyřešíme nelineární soustavu pomocí zobecněné Newtonovy metody pro nehladké funkce (tato metoda je zobecněním klasické Newtonovy metody, která se používá pro řešení



Obrázek 1.5: Ilustrace jednodimenzionálního modelu.

soustav, ve kterých vystupují pouze hladké funkce (alespoň třídy C^1). Oba postupy zde provedeme. Podíváme-li se na vztah (1.2), můžeme si všimnout, že v argumentu zobrazení $F^{-1}(s)$ vystupuje neznámá $\theta_j^{i,n+1}$. Nahradíme-li tuto neznámou hodnotou $\theta_j^{i,n}$ (kterou v n -tém časovém kroku již máme vypočtenou), bude výsledná hodnota $F^{-1}(\frac{\Delta t}{\rho} \frac{\theta_j^{i,n} - \theta_c}{\theta_c})$ přímo stanovena a díky tomu přejde původní nelineární soustava na soustavu lineární.

Poznámka 7. *Vzhledem k tomu, že tato kapitola je více zaměřená na numerické výpočty, je zde podrobnější popis zobecněné Newtonovy metody vynechán. Některé důležité teoretické detaily jsou obsažené v kapitole 4., která je zaměřená na teoretický aparát použitý v této práci.*

Nyní si pro přehlednost a následnou implementaci řešení numerického modelu upravíme vztahy (1.8) - (1.12) tak, že všechny známé hodnoty převedeme na pravou stranu a na levé straně necháme hodnoty neznámých proměnných, které navíc seřadíme podle obr. 1.5. Položíme-li pro jednoduchost $\Delta_x^t = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$, dostaneme vztahy

$$-\Delta_x^t \kappa_g \theta_{j-1}^{g,n+1} + (2\Delta_x^t \kappa_g + c_g) \theta_j^{g,n+1} - \Delta_x^t \kappa_g \theta_{j+1}^{g,n+1} = c_g \theta_j^{g,n}, \quad (1.13)$$

$$-\Delta_x^t \kappa_i \theta_{j-1}^{i,n+1} + (2\Delta_x^t \kappa_i + c_i) \theta_j^{i,n+1} - \Delta_x^t \kappa_i \theta_{j+1}^{i,n+1} = c_i \theta_j^{i,n} - L'(s_j^n) \left(F^{-1} \left(\frac{\Delta t \theta_j^{i,n} - \theta_c}{\rho \theta_c} \right) - s_j^n \right), \quad (1.14)$$

$$\left(\frac{\kappa_i}{\Delta x} + \alpha_i \right) \theta_0^{i,n+1} - \frac{\kappa_i}{\Delta x} \theta_1^{i,n+1} = \alpha_i \theta_{out}^{n+1}, \quad (1.15)$$

$$\frac{\kappa_i}{\Delta x} \theta_{N-1}^{i,n+1} - \left(\frac{\kappa_i}{\Delta x} + \alpha \right) \theta_N^{i,n+1} + \alpha \theta_0^{g,n+1} = 0, \quad (1.16)$$

$$\alpha \theta_N^{i,n+1} - \left(\frac{\kappa_g}{\Delta x} + \alpha \right) \theta_0^{g,n+1} + \frac{\kappa_g}{\Delta x} \theta_1^{g,n+1} = 0, \quad (1.17)$$

$$-\frac{\kappa_g}{\Delta x} \theta_{M-1}^{g,n+1} + \left(\frac{\kappa_g}{\Delta x} + \alpha_g \right) \theta_M^{g,n+1} = \alpha_g \theta_h^{n+1}. \quad (1.18)$$

Zatímco poslední čtyři vztahy platí pro pevné indexy x-ových bodů, první dva ale platí uvnitř oblastí ledu a skla, tedy pro všechny body $x_1^i, x_2^i, \dots, x_{N-1}^i, x_1^g, x_2^g, \dots, x_{M-1}^g$. Jak je vidět, rovnice popisující okrajové podmínky na rozhraní led-vzduch a sklo-kabina obsahují 2 neznámé, zatímco všechny ostatní rovnice obsahují 3 neznámé. Seřadíme-li tyto rovnice v následujícím pořadí

1. Okrajová podmínka led-vzduch (1.15),
2. Rozložení teploty uvnitř ledu (1.14),
3. První okrajová podmínka led-sklo (1.16),
4. Druhá okrajová podmínka led-sklo (1.17),
5. Rozložení teploty uvnitř skla (1.13),
6. Okrajová podmínka sklo-kabina (1.18),

bude výsledná matice soustavy tři-diagonální. Zavedeme-li substituce

$$\begin{aligned} B_0^i &= \frac{\kappa_i}{\Delta x} + \alpha_i, & B_1^i &= -\frac{\kappa_i}{\Delta x}, & B_{N-1}^{ig} &= \frac{\kappa_i}{\Delta x}, & B_N^{ig} &= -\left(\frac{\kappa_i}{\Delta x} + \alpha \right), & B_0^{ig} &= \alpha, \\ B_N^{gi} &= \alpha, & B_0^{gi} &= -\left(\frac{\kappa_g}{\Delta x} + \alpha \right), & B_1^{gi} &= \frac{\kappa_g}{\Delta x}, & B_{M-1}^g &= -\frac{\kappa_g}{\Delta x}, & B_M^g &= \frac{\kappa_g}{\Delta x} + \alpha_g, \\ I_1 &= -\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \kappa_i, & I_2 &= 2\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \kappa_i + c_i, & G_1 &= -\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \kappa_g, & G_2 &= 2\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \kappa_g + c_g, \end{aligned} \quad (1.19)$$

bude mít matice soustavy následující tvar (1.20).

Díky tomu, že používáme implicitní Eulerovu metodu, není třeba splnit podmínku pro délku časového kroku, která je podmínkou stability v případě explicitní Eulerovy metody. Je třeba také zdůraznit, že průběh vnitřní teploty (viz obr. 1.7) skutečně odpovídá reálné situaci vzhledem k tomu, že na začátku, kdy motor vozidla není zahřátý, zdroj tepla vyfukuje studený vzduch. Jak je vidět z grafu na obr. 1.12, hned na začátku dochází k náhlému skoku teploty na celém intervalu $[x_a, x_b]$. Důvodem je to, že jsme si zvolili spojité rozložení počáteční teploty (obr. 1.6), což neodpovídá našemu modelu. Jednou z možností jak tento problém odstranit je spočítat stacionární rozložení teploty na začátku. Budeme-li uvažovat, že se vozidlo nachází venku delší dobu (a venkovní teplota je pod nulou ve stupních Celsia), můžeme předpokládat, že teplota ledu i skla je v rovnovážném (stacionárním) stavu a s časem se nemění. Můžeme tedy na základě hodnot $\theta_{out}(0)$ a $\theta_h(0)$ a použitím vztahů (1.1) a (1.2) stanovit stacionární řešení úlohy na celém intervalu $[x_a, x_b]$ tak, že všechny časové derivace položíme rovné nule. Dostaneme soustavu dvou jednoduchých obyčejných diferenciálních rovnic

$$\theta_{xx}^g = 0,$$

$$\theta_{xx}^i = 0.$$

Dvojnásobným integrováním každé rovnice nám vyplyne, že průběhy počátečních teplot ledu a skla jsou dány lineárními funkcemi, tedy platí

$$\theta^i(x, 0) = p_1 \cdot x + q_1,$$

$$\theta^g(x, 0) = p_2 \cdot x + q_2.$$

Neznámé koeficienty p_1, q_1, p_2, q_2 snadno odvodíme z okrajových podmínek (1.5) a (1.6).

Derivováním a dosazením dostaneme soustavu čtyř algebraických rovnic, která v maticovém tvaru bude vypadat následovně

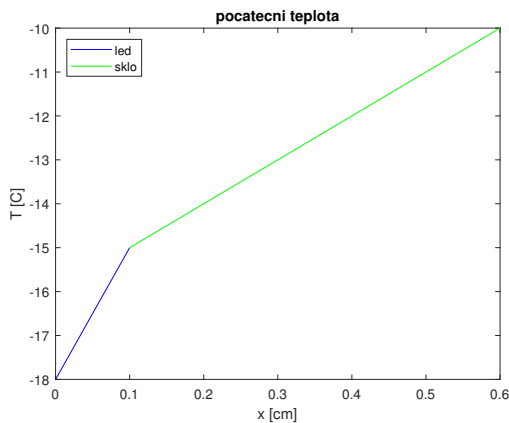
$$\begin{pmatrix} \alpha_i \cdot x_a - \kappa_i & \alpha_i & 0 & 0 \\ \alpha \cdot x_m + \kappa_i & \alpha & -\alpha \cdot x_m & -\alpha \\ \alpha \cdot x_m & \alpha & -\alpha \cdot x_m + \kappa_g & -\alpha \\ 0 & 0 & \alpha_g \cdot x_b + \kappa_g & \alpha_g \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} p_1 \\ q_1 \\ p_2 \\ q_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_i \cdot \theta_{out}(0) \\ 0 \\ 0 \\ \alpha_g \cdot \theta_h(0) \end{pmatrix}. \quad (1.22)$$

Dosadíme-li za $\theta_{out}(0)$ a $\theta_h(0)$ naše původně zvolené hodnoty -18 a -10 , dostaneme nové hodnoty (zaokrouhlené na dvě desetinná místa)

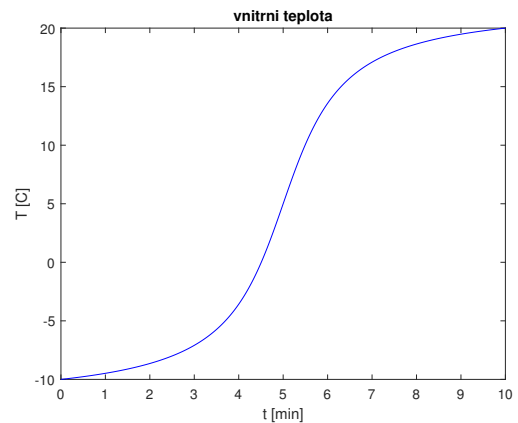
$$\begin{aligned} \theta^i(x_a, 0) &= -13.15, & \theta^i(x_m, 0) &= -13.12, \\ \theta^g(x_m, 0) &= -12.63, & \theta^g(x_b, 0) &= -12.43. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Poznámka 9. Všechny hodnoty teplot bychom správně měli uvažovat ve stupních Kelvina. Nicméně vzhledem k tomu, že soustava (1.22) je lineární, můžeme pro přehlednost hodnoty odpovídající stacionárnímu stavu počítat ve stupních Celsia, které před následným dosažením do rovnic (1.8) - (1.12) převedeme na stupně Kelvina.

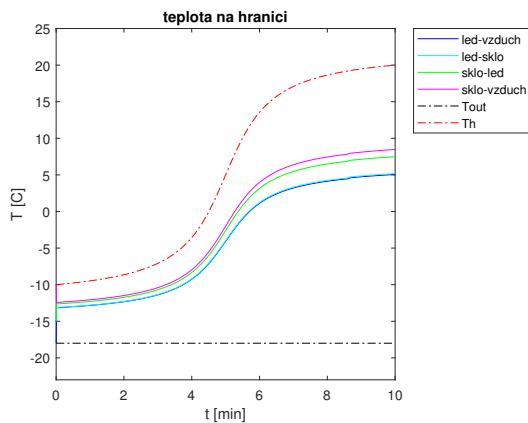
Vyřešíme-li naši úlohu pro dříve zvolené parametry a zvolíme-li počáteční teplotu tak, aby odpovídala stacionárnímu stavu (na základě nově vypočtených hodnot (1.23)), můžeme v grafu na obr. 1.14 vidět, že již nedochází k prudké změně teploty na počátku časového intervalu.



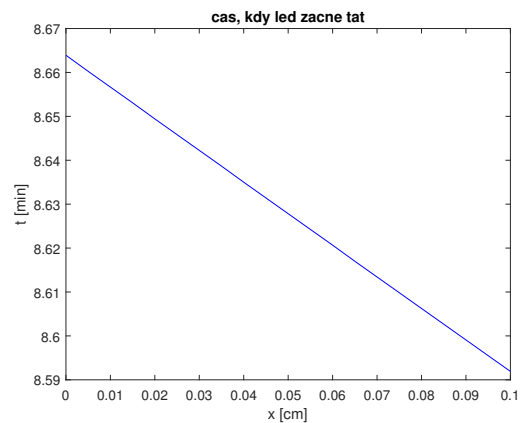
Obrázek 1.6: Počáteční teplota na celém intervalu $[x_a, x_b]$.



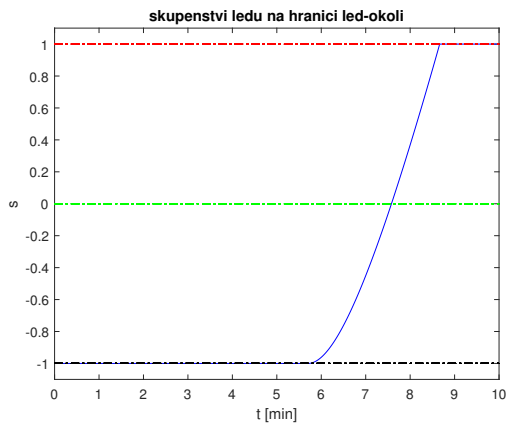
Obrázek 1.7: Průběh změny vnitřní teploty způsobené tepelným zdrojem.



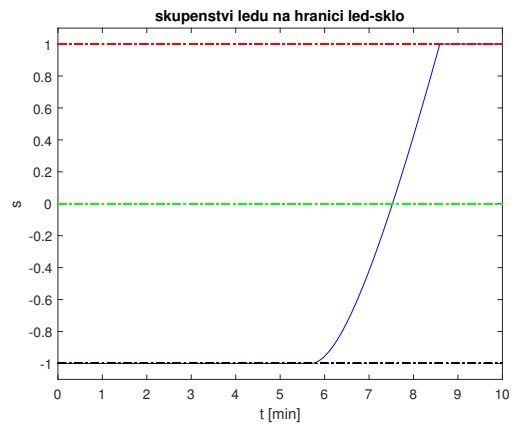
Obrázek 1.8: Časový průběh teplot pro všechny čtyři hranice.



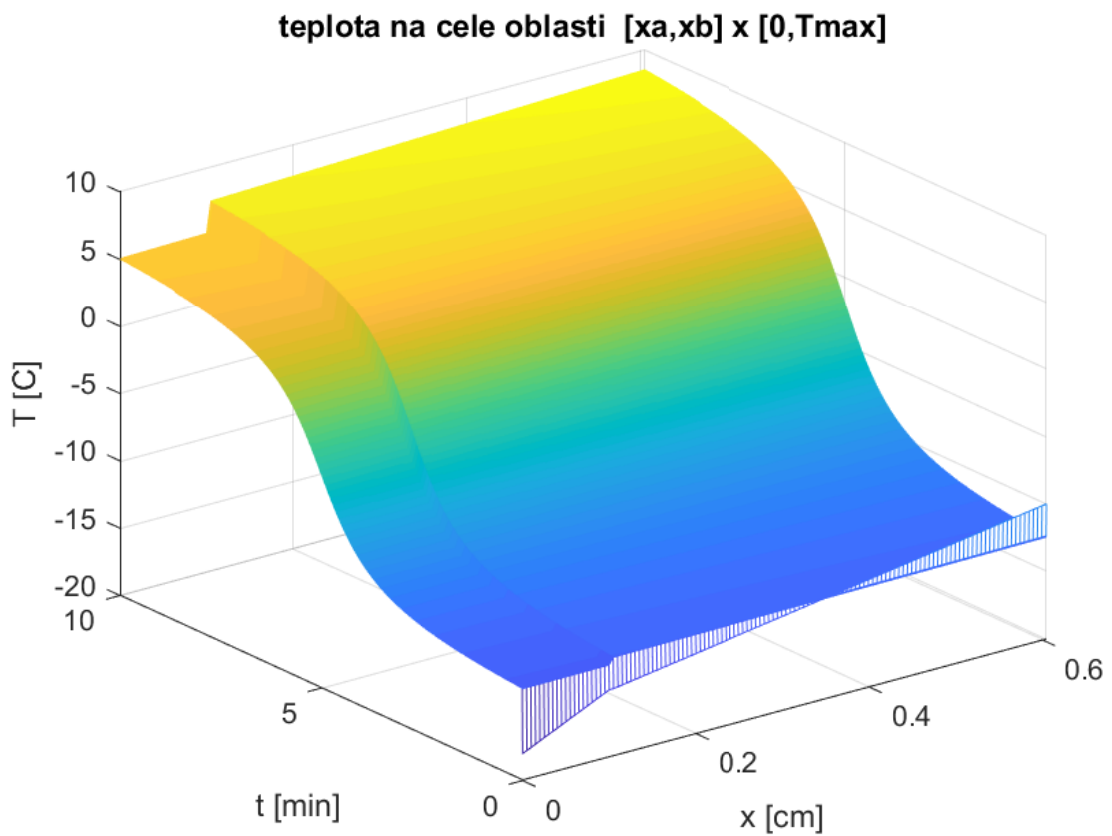
Obrázek 1.9: Čas, kdy led začne tát v určitých místech.



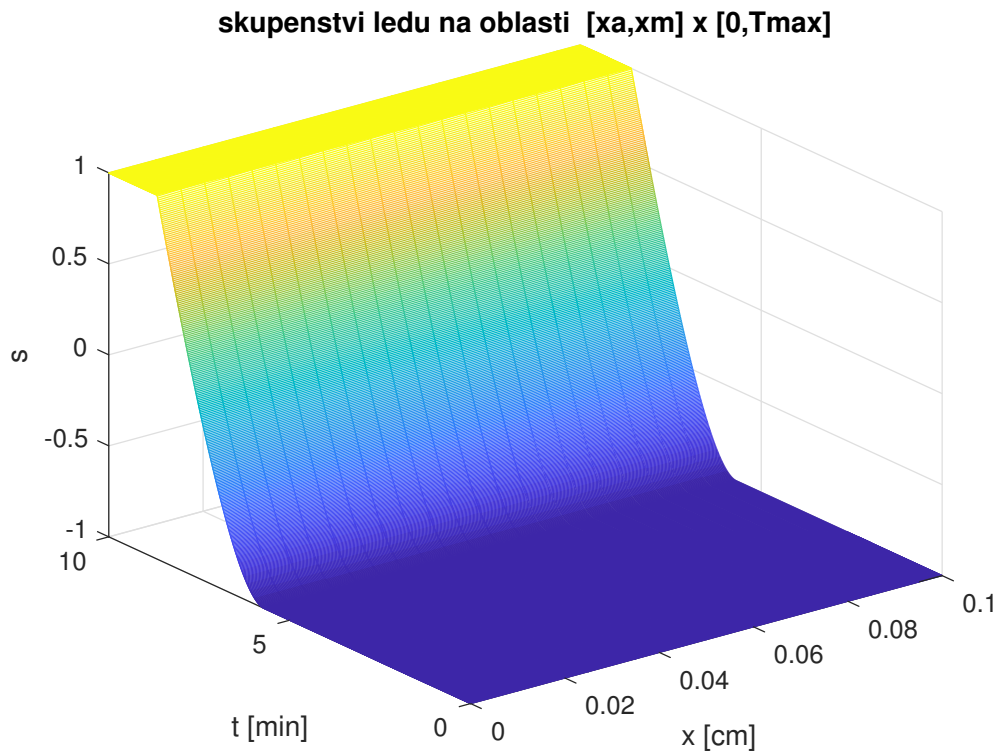
Obrázek 1.10: Časový průběh skupenství ledu na hranici led-okolí.



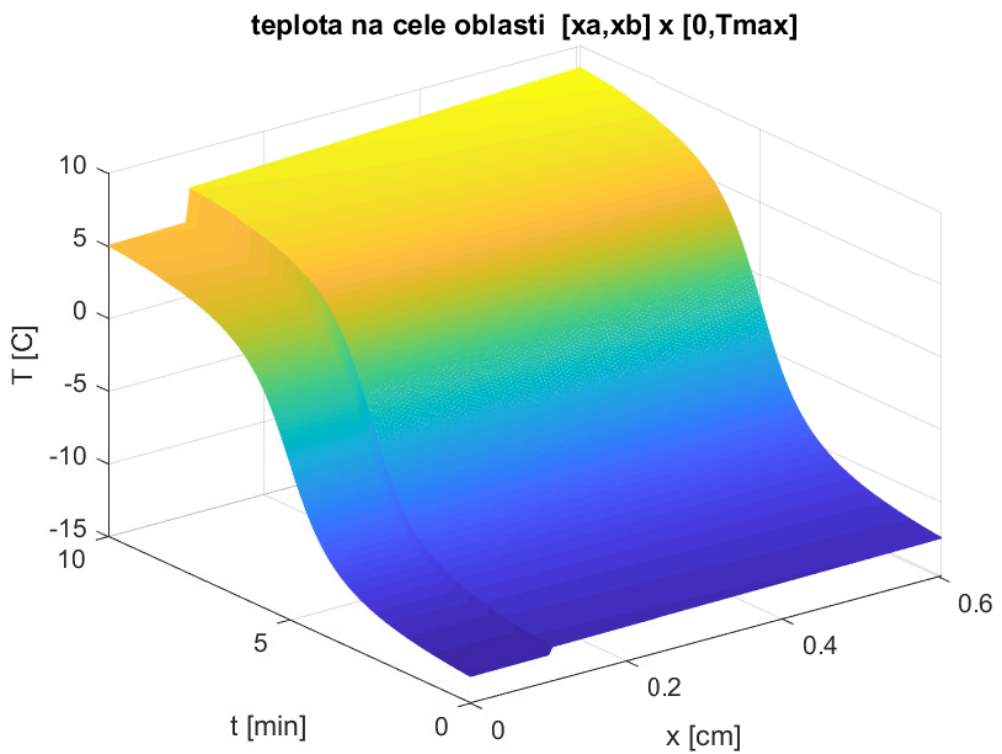
Obrázek 1.11: Časový průběh skupenství ledu na hranici led-sklo.



Obrázek 1.12: Celkové rozložení teploty.



Obrázek 1.13: Celkové rozložení skupenství ledu.



Obrázek 1.14: Celkové rozložení teploty pro stacionární volbu počáteční teploty.

Poznámka 10. Klíčovým parametrem, který výrazně ovlivňuje rychlost změny skupenství ledu, je parametr ρ vystupující v diferenciální inkluzi (3). Je to fyzikální veličina, která se měří experimentálně a její hodnota se pohybuje v řádech 10^{-1} . Vzhledem k tomu, že přesnou hodnotu ρ odpovídající našemu modelu neznáme, uvažujeme v (1.21) $\rho = 1$. Je třeba zdůraznit, že dokonce malá změna hodnoty tohoto parametru se může výrazně projevit na rychlosti tání ledu (čím je větší, tím led taje pomaleji). Pro přesnější stanovení závislosti řešení na hodnotě parametru ρ bychom museli podrobněji provést citlivostní analýzu, která je nad rámec tohoto textu.

Ve výše uvedeném postupu jsme záměnou neznámé hodnoty $\theta_j^{i,n+1}$ v původní soustavě (1.8) - (1.12) na hodnotu ve stávajícím časovém kroku $\theta_j^{i,n}$ dosáhli toho, že výsledná soustava byla lineární. Nicméně tato úprava může do našeho modelu vnést další chybu. Proto by mohlo být vhodné navrhnout postup pro řešení původní nelineární soustavy. Základní numerickou metodou v takových situacích je Newtonova iterační metoda (případně zobecněná Newtonova metoda, pokud v dané soustavě vystupuje jedna nebo více nehladkých funkcí). Vzhledem k tomu, že máme soustavu (1.8) - (1.12), v níž vystupuje funkce $F^{-1}(s)$, která nemá derivaci v bodech -1 a 1 (viz obr. 1.4), použijeme zobecněnou Newtonovu metodu. Algoritmus této metody můžeme stručně popsat v několika krocích. Nejprve se stanoví zobecněná Jacobiho matice soustavy, která je dána parciálními derivacemi každé funkce podle každé proměnné (tedy obecně hodnoty této matice závisí na konkrétní volbě proměnných). Dále se zvolí počáteční vektor u_0 , na základě kterého se stanoví hodnoty zobecněné Jacobiho matice a vektoru pravé strany b . Ten získáme tak, že dosadíme námi zvolený počáteční vektor u_0 do původní soustavy a určíme rezidua pro každou rovnici. Hodnoty těchto reziduí potom přímo odpovídají hodnotám vektoru pravé strany. Následně vyřešíme soustavu

$$-Jac \cdot w = b, \quad (1.24)$$

a získáme tak novou aproximaci řešení

$$u_1 = u_0 + w.$$

Celý proces můžeme nyní zopakovat s tím, že místo původního vektoru u_0 použijeme nově stanovený vektor u_1 , a následně můžeme tento proces opakovat tak dlouho, než získáme vhodnou aproximaci řešení (např. pokud norma vektoru w bude dostatečně malá). Myšlenka Newtonovy metody pro soustavy je tedy obdobná jako v případě řešení jedné rovnice s jednou neznámou.

Poznámka 11. Pojem "Jacobiho matice" se používá výhradně v souvislosti s klasickou Newtonovou metodou (pro hladké funkce). Matice vystupující v zobecněné Newtonově metodě se

v literatuře obvykle označuje jako "zobecněná Jacobiho matice" nebo "Clarkův subdiferenciál". V této práci pro zjednodušení zápisu používáme pro zobecněnou Jacobiho matici v (1.24) stejné značení jako pro Jacobiho matici vystupující v klasické Newtonově metodě. Při použití zobecněné Newtonovy metody je třeba také zohlednit body, ve kterých neexistuje derivace. Bližší informace k volbě hodnot zobecněné Jacobiho matice v těchto bodech jsou obsaženy v kapitole 4.

Vrátíme-li se k našemu modelu, můžeme si všimnout, že nelinearita soustavy dané vztahy (1.8) a (1.9) je způsobená pouze funkcí $F^{-1}(s)$. Z toho plyne, že zobecněná Jacobiho matice vystupující v Newtonově metodě bude mít téměř všechny prvky stejné jako matice lineární soustavy (1.20) použité v předchozím postupu. Všechny koeficienty dané vztahy (1.13) až (1.18) kromě (1.14) zůstanou stejné. Změní se pouze některé prvky na hlavní diagonále v těch řádcích, které odpovídají rozložení teploty uvnitř ledu. Použijeme-li substituce (1.19), bude mít zobecněná Jacobiho matice stejný tvar s jedinou změnou, že pro nové hodnoty I_2 (tentokrát obecně závislé na indexu j) bude platit

$$I_{2,j} = 2 \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \kappa_i + c_i + L'(s_{j-1}^n) \frac{\Delta t}{\rho \theta_c} F^{-1}(\tilde{s}_{j-1}^n),$$

kde j je řádek matice, s_{j-1}^n je hodnota skupenství ledu v bodě x_{j-1} a n -tém časovém kroku a \tilde{s}_{j-1}^n je dáno vztahem

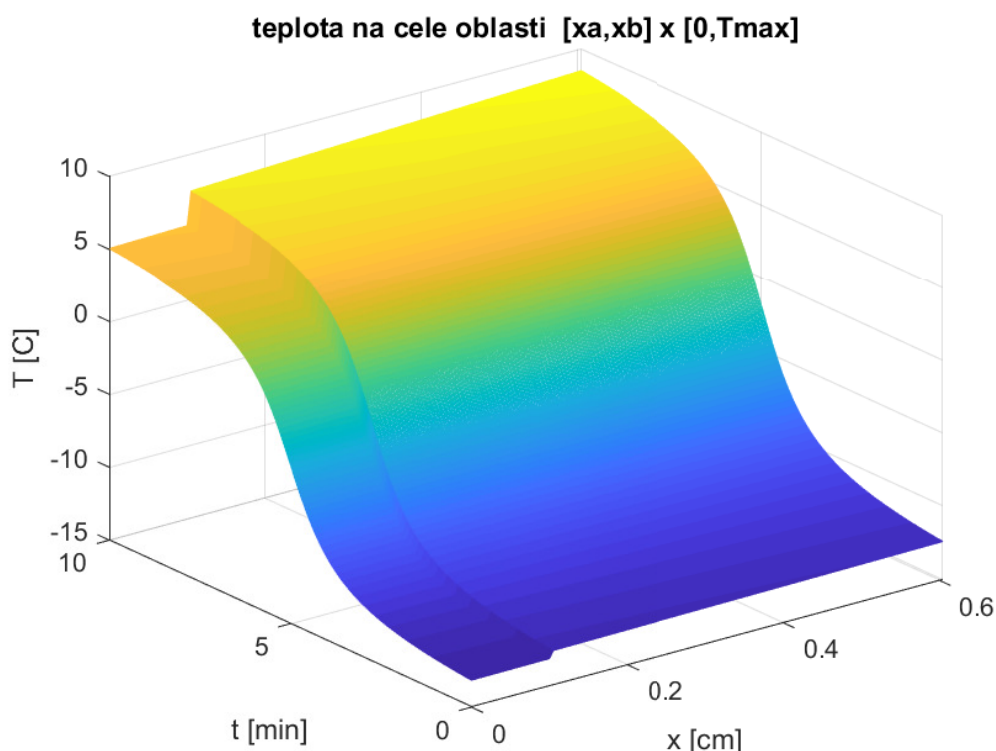
$$\tilde{s}_{j-1}^n = \frac{\Delta t}{\rho \theta_c} (\theta_{j-1}^n - \theta_c) + s_{j-1}^n,$$

tedy zobecněná Jacobiho matice se v každém časovém kroku mění (přesněji se mění pouze tyto prvky na hlavní diagonále). V bodech, kde funkce $F^{-1}(s)$ není diferencovatelná (v našem případě v bodech -1 a 1), můžeme za příslušný prvek zobecněné Jacobiho matice zvolit libovolnou hodnotu z intervalu $[0, 1]$ (hodnoty 0 a 1 odpovídají jednostranným derivacím funkce $F^{-1}(s)$ v bodech -1 a 1). Dále je třeba si také všimnout, že v $(n+1)$ -ním časovém kroku známe všechny hodnoty z předchozího časového kroku, a za předpokladu, že řešení je v dostatečně míře hladké, bude vhodné v každém časovém kroku za počáteční vektor u volit vektor známých hodnot z předchozí časové vrstvy. Tím se nám výpočet zásadně zefektivní a jak ukáže následující výpočet, stačí v každém časovém kroku provést jednu iteraci Newtonovy metody. Graf na obr. 1.15 odpovídá řešení nelineární soustavy se stejnými parametry (1.21) vyřešené použitím zobecněné Newtonovy metody. Jak je vidět, grafy na obr. 1.14 a 1.15 jsou vizuálně nerozeznatelné, což také ilustrují graf odchylek teploty a graf odchylek časových hladin tání ledu (obr. 1.16 a 1.17). Je třeba si všimnout z grafu na obr. 1.16, že v určitém čase odchylky

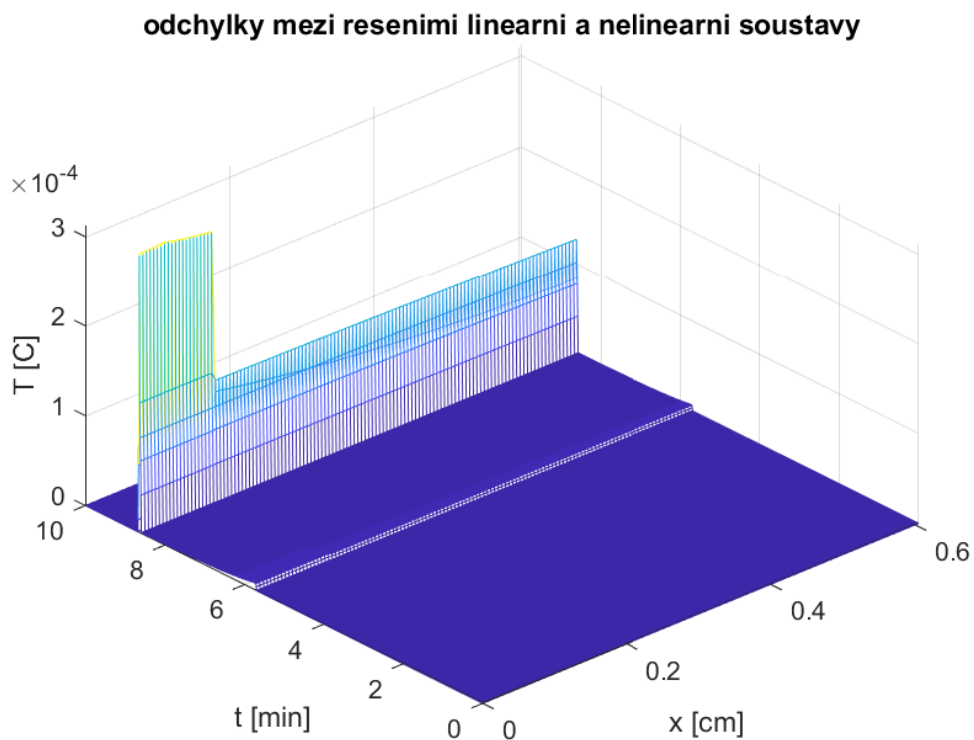
řádově stoupnou ($\approx 10^{-6}$), následně začnou klesat a poté v určitém časovém kroku opět výrazně stoupnou ($\approx 10^{-4}$). První skok odpovídá časové hladině, kdy teplota ledu se zvedne nad nulu a led začne pomalu měnit své skupenství (tedy začnou narůstat hodnoty skupenství s_j^n). Druhý (větší) skok odpovídá časové hladině, kdy led přejde do kapalného skupenství (tedy veličiny s_j^n dosáhnou hodnoty 1). Mimo tyto kritické časové podintervaly nabývají odchylky hodnot řádově 10^{-9} .

Poznámka 12. Graf na obr. 1.15 odpovídá prostorové diskretizaci dané 120ti dělicími body. Jak ukazují výpočty, "tvar" rozložení odchylek zůstává stejný nezávisle na volbě diskretizace a hodnoty odchylek jsou přibližně přímo úměrné krokům diskretizace (tedy zjemníme-li časovou a prostorovou diskretizaci dvakrát, zmenší se odchylky také přibližně dvakrát).

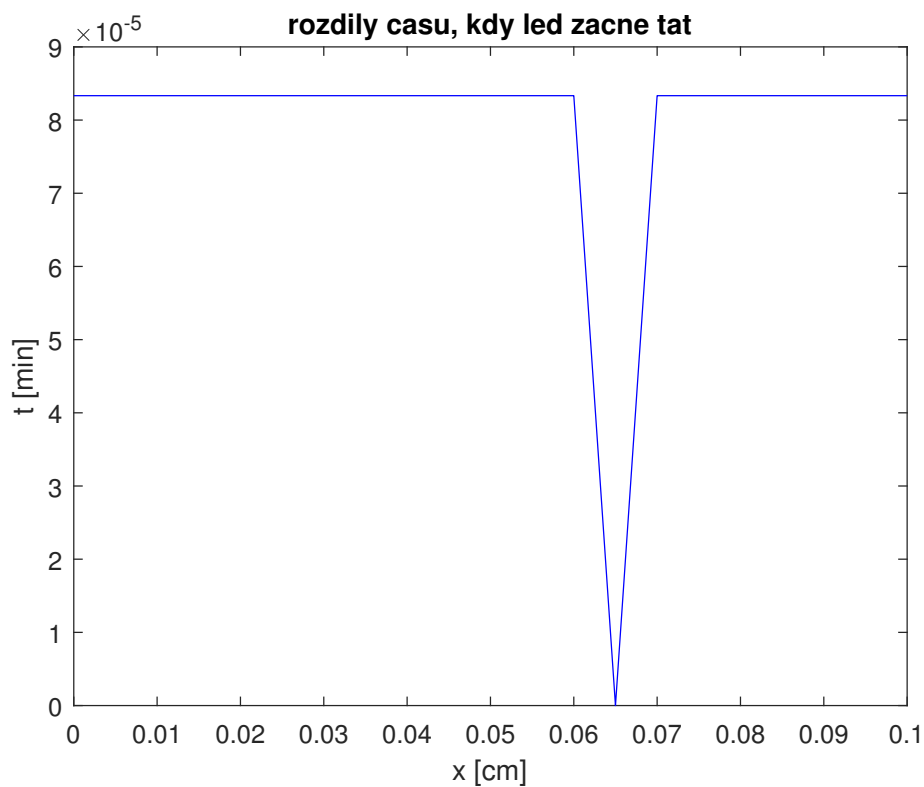
V následující kapitole si ukážeme další možný postup řešení původní soustavy (1.1) - (1.6), který je založený na aproximaci mnohoznačného subdiferenciálu $\partial l(s)$ (viz. obr. 1.2) klasickou funkcí.



Obrázek 1.15: Řešení nelineární soustavy pomocí zobecněné Newtonovy metody.



Obrázek 1.16: Graf odchylek mezi řešením lineární soustavy a řešením soustavy nelineární.



Obrázek 1.17: Rozdíly časových hodnot, pro které led roztaje.

1.2 Aproximace mnohoznačného zobrazení klasickou funkcí

Tato podkapitola popisuje další možný postup řešení původní soustavy (1.1) - (1.6), a to pomocí aproximace mnohoznačného zobrazení $\partial l(s)$ z (1.3) nějakou vhodně zvolenou funkcí jedné proměnné. Vzhledem k tomu, že v bodech -1 resp. 1 nabývá subdiferenciál $\partial l(s)$ všech hodnot z intervalu $[-\infty, 0]$ resp. $[0, +\infty]$, bude vhodné zvolit takovou funkci (označme $h(s)$), která bude spojitá a mimo interval $[-1, 1]$ bude velice rychle narůstat. Nejjednodušší volbou je po částech lineární funkce (v literatuře se někdy označuje jako Yosidova aproximace), kterou definujeme následovně

$$h(s) = \begin{cases} \varepsilon(s+1), & s < -1 \\ 0, & s \in [-1, 1] \\ \varepsilon(s-1), & s > 1 \end{cases}, \quad (1.25)$$

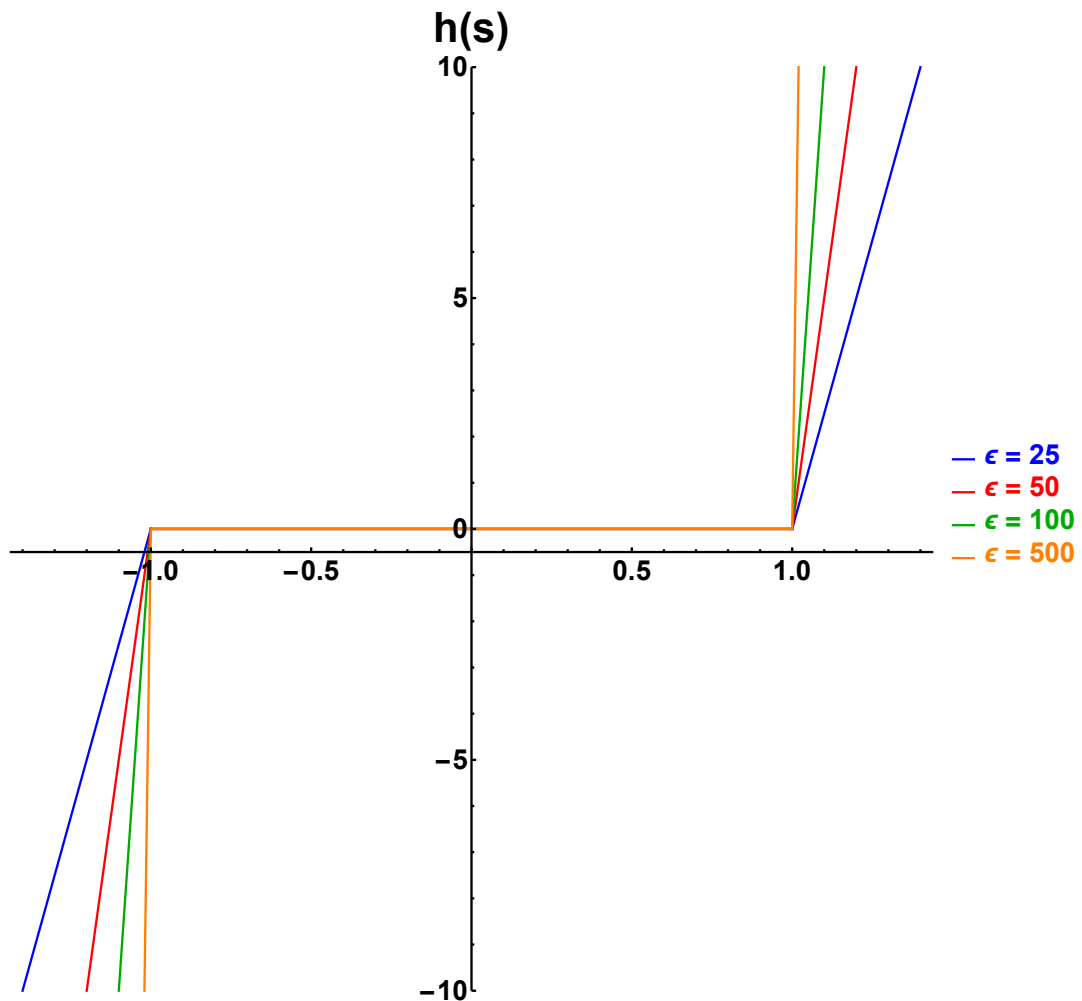
kde ε je zvolená konstanta, která v našem případě charakterizuje rychlost růstu funkce $h(s)$ (mimo interval $[-1, 1]$ je to přímo její derivace). Změnou tohoto koeficientu můžeme původní zobrazení $\partial l(s)$ aproximovat s libovolnou přesností (grafy $h(s)$ pro konkrétní volby ε jsou na obr. 1.18). S takto zadanou funkcí přejde diferenciální inkluze (1.3) vystupující v původním 1D modelu (který je dán vztahy (1.1) - (1.6)) na diferenciální rovnici a můžeme tento vztah zapsat ve tvaru

$$\rho s_t + h(s) = \frac{1}{\theta_c}(\theta^i - \theta_c), \quad (1.26)$$

což nám spolu s rovnicemi (1.1) a (1.2) dává soustavu tentokrát tří parciálních diferenciálních rovnic o třech neznámých $\theta^i(x, t)$, $\theta^g(x, t)$ a $s(x, t)$ s příslušnými počátečními a okrajovými podmínkami (1.4) - (1.6). Opět použitím implicitní Eulerovy metody můžeme vztah (1.26) zapsat v numerickém tvaru

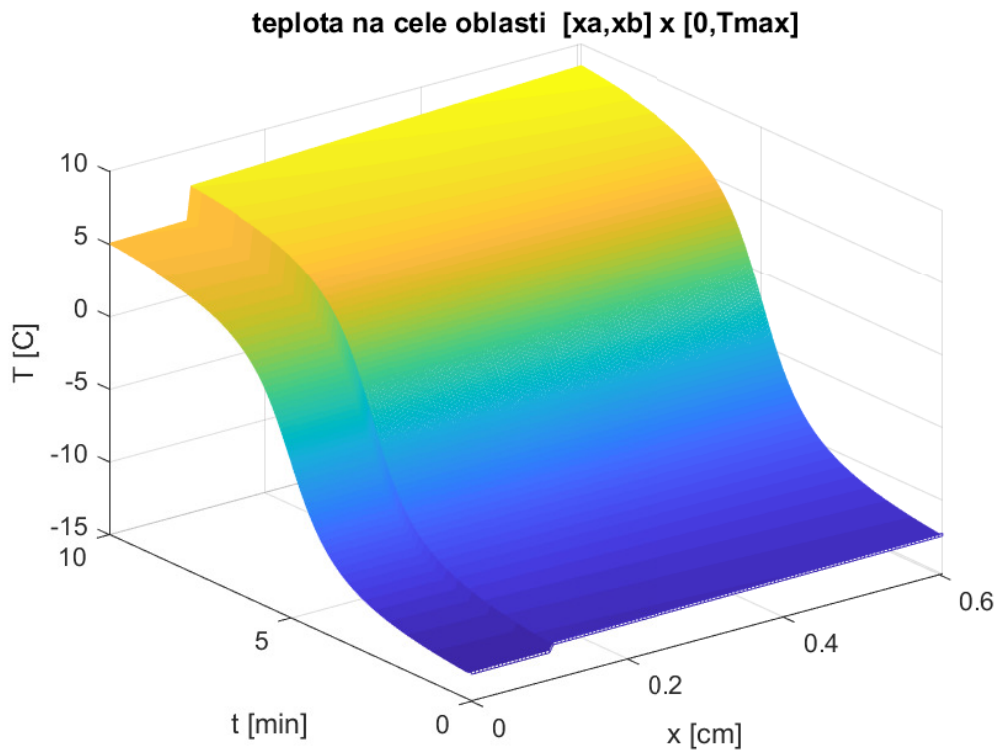
$$\rho \frac{s_j^{n+1} - s_j^n}{\Delta t} + h(s_j^{n+1}) = \frac{1}{\theta_c}(\theta_j^{i,n+1} - \theta_c). \quad (1.27)$$

Vzhledem k tomu, že funkce $h(s)$ není spojitě diferencovatelná v bodech -1 a 1 , zvolíme pro řešení této nelineární soustavy opět zobecněnou Newtonovu metodu s tím, že v bodech -1 a 1 můžeme za $h'(s)$ zvolit libovolnou hodnotu z intervalu $[0, \varepsilon]$ (podobně jako v předchozí podkapitole). Analogicky zde máme také možnost v každém časovém kroku si zvolit za počáteční vektor hodnoty z předchozí časové vrstvy. Graf na obr. 1.19 obsahuje řešení soustavy se stejnými parametry jako v předchozí podkapitole (viz (1.21)), tentokrát s aproximací mnohoznačného subdiferenciálu $\partial l(s)$ klasickou funkcí $h(s)$ definovanou v (1.25) s parametrem $\varepsilon = 100$.

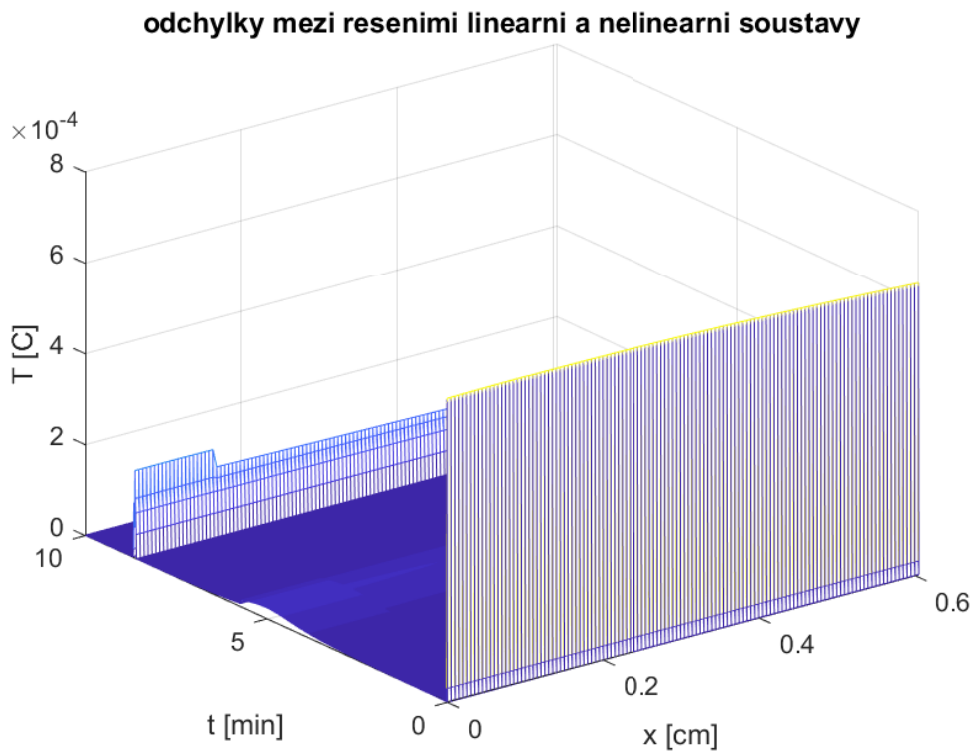


Obrázek 1.18: Derivace jednoznačné funkce $l(s)$.

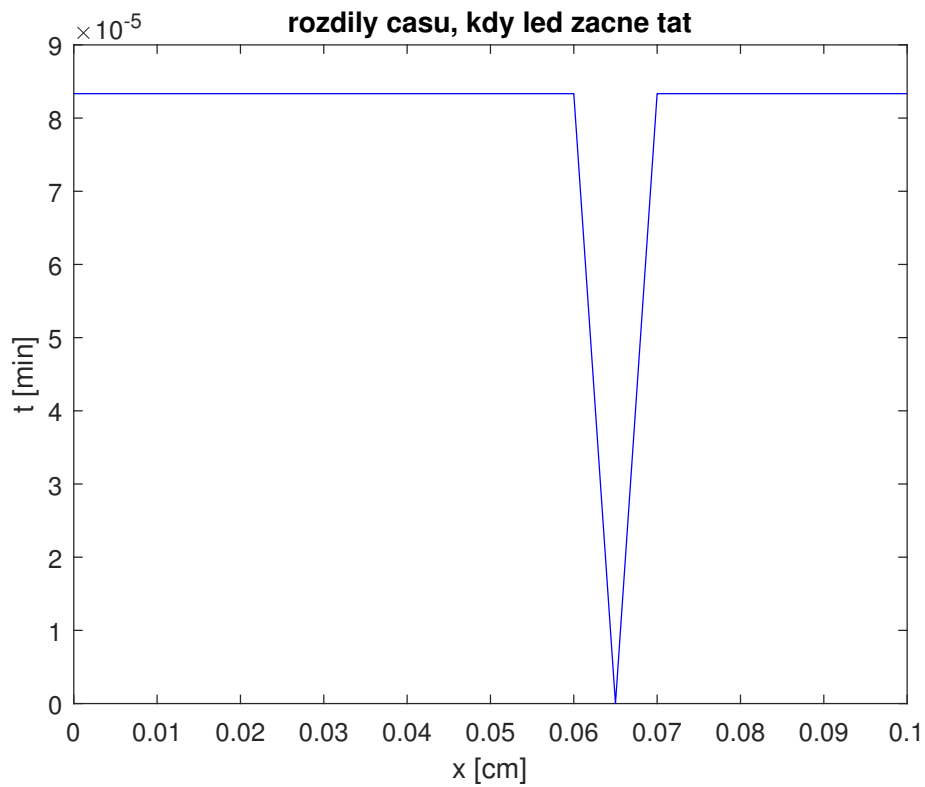
Jak je vidět, obě metody opět dávají téměř stejný výsledek (zde srovnáváme řešení nelineární soustavy tří rovnic s řešením lineární soustavy). Zatímco graf na obr. 1.21 je podobný grafu 1.17, je patrně vidět, že graf 1.20 vypadá poněkud jinak než graf 1.16. Zde k výrazné odchylce dochází již na začátku celého procesu (k menšímu skoku následně dochází v okamžiku, kdy led začne měnit své skupenství). Důvodem proč na počátku dochází k výraznému rozdílu obou řešení je to, že funkce $s(x, t)$ může nabývat hodnot i mimo interval $[-1, 1]$. Je to způsobené tím, že používáme aproximaci mnohoznačného zobrazení $\partial l(s)$. V předchozích postupech, kde jsme přímo pracovali s diferenciální inkluzí (1.3), k tomuto jevu nemohlo dojít. Je třeba si také všimnout dalšího zajímavého jevu. Zatímco hodnoty skupenství mohou ležet mimo interval $[-1, 1]$, časové vrstvy odpovídající tání ledu zůstávají téměř stejné, a to i pro horší aproximace $\partial l(s)$ funkcí $h(s)$ (tedy pro menší hodnoty parametru ϵ), což názorně ilustrují grafy na obr. 1.22 a 1.23, které odpovídají řešení pro $\epsilon = 0.5$.



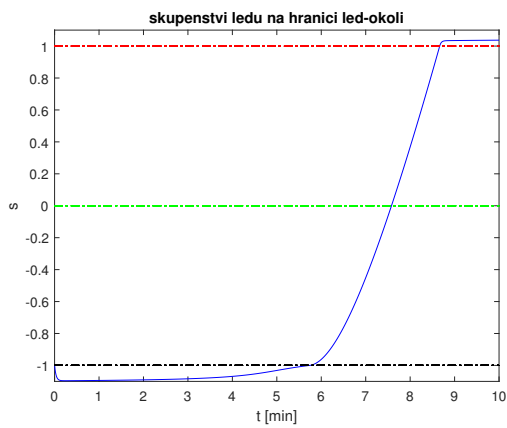
Obrázek 1.19: Řešení nelineární soustavy s aproximací $\partial l(s)$ funkcí $h(s)$ s parametrem $\varepsilon = 100$.



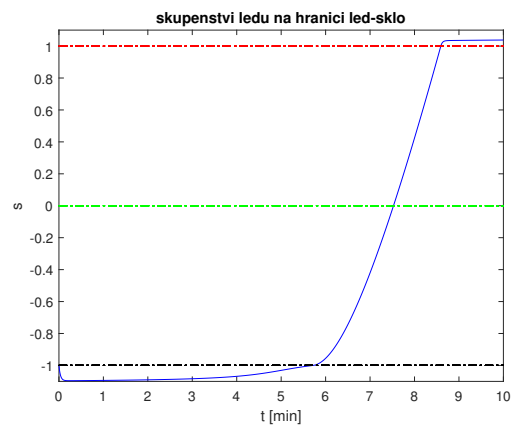
Obrázek 1.20: Graf odchylek mezi řešením lineární soustavy a řešením soustavy nelineární s aproximací $\partial l(s)$ pro $\varepsilon = 100$.



Obrázek 1.21: Rozdíly časových hodnot, pro které led začíná tát (pro $\epsilon = 100$).



Obrázek 1.22: Časový průběh skupenství ledu na hranici led-okolí pro $\epsilon = 0.5$.



Obrázek 1.23: Časový průběh skupenství ledu na hranici led-sklo pro $\epsilon = 0.5$.

1.3 Vyšetřování konvergence

V této podkapitole se zaměříme na konvergenci numerických metod použitých v podkapitolách 1.1 a 1.2. Pro každou metodu tedy budeme vyšetřovat konvergenci řešení příslušné soustavy algebraických (obecně nelineárních) rovnic vycházejících z původní soustavy (1.1) - (1.6) partiálních diferenciálních rovnic s diferenciální inkluzí, a to postupným zjemňováním časové a prostorové diskretizace. Vzhledem k tomu, že přesné (analytické) řešení soustavy (1.1) - (1.6) neznáme ani v případě jedné prostorové proměnné, budeme muset ke stanovení řádu konvergence použít přibližná řešení vypočtená pro různé diskretizace.

Budiž N počet dělicích bodů prostorové proměnné a Δx příslušný krok dělení. Zavedeme-li časovou diskretizaci tak, aby krok dělení Δt byl roven Δx , a budeme-li vyšetřovat konvergenci pro hodnoty odpovídající reálnému modelu (např. (1.21)), bude počet časových diskretizačních bodů mnohonásobně větší než počet prostorových bodů, a to i v případě, kdy celý proces budeme sledovat jen několik sekund (je to způsobené tím, že celková tloušťka ledu a skla je v řádech milimetrů). Zvolme nyní největší možné nx_{max} , pro které jsme schopni provést numerický výpočet a necht' je navíc toto nx_{max} ve tvaru

$$nx_{max} = 2 \cdot 2^{K_{max}} + 1,$$

kde K_{max} je největší možné přirozené číslo (+1 je zde z toho důvodu, aby příslušný počet časových diskretizačních bodů byl celočíselný). Následně spočteme řešení pro všechny diskretizace odpovídající $nx = 5, 9, 17, \dots, 2 \cdot 2^{K_{max}} + 1$. Na základě těchto řešení jsme schopni dopočítat odchylky každých dvou řešení, které odpovídají dvěma sousedním diskretizacím. Přesněji řečeno, zajímají nás podíly

$$\frac{\bar{\theta}_h - \bar{\theta}_{h/2}}{\bar{\theta}_{h/2} - \bar{\theta}_{h/4}}, \quad (1.28)$$

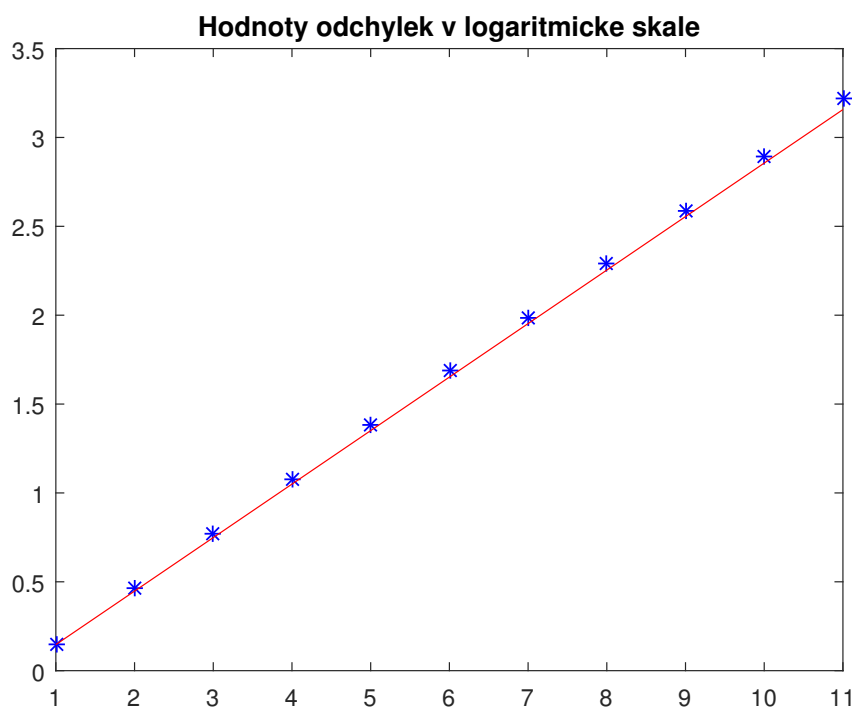
kde symbolem $\bar{\theta}_h$ je označené řešení, které odpovídá prostorové diskretizaci s krokem h . Analogicky symboly $\bar{\theta}_{h/2}$ resp. $\bar{\theta}_{h/4}$ označují řešení odpovídající dvakrát resp. čtyřikrát jemnější diskretizaci. Počet všech takových podílů je tedy o dva menší než počet všech diskretizací. Budeme-li tedy předpokládat, že řád konvergence naší metody je p , můžeme psát

$$|\bar{\theta}_h - \theta| = Ch^p, \quad (1.29)$$

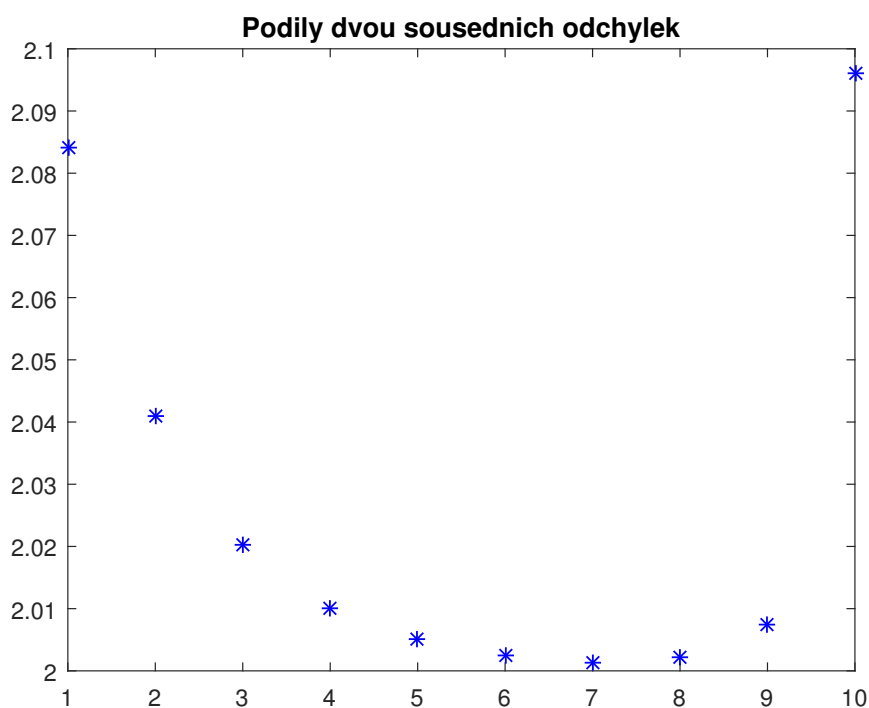
kde θ je přesné řešení a $\bar{\theta}_h$ je přibližné řešení odpovídající prostorové diskretizaci s příslušným krokem h . Vzhledem k tomu, že platí

$$\frac{\bar{\theta}_h - \bar{\theta}_{h/2}}{\bar{\theta}_{h/2} - \bar{\theta}_{h/4}} = \frac{Ch^p - C(h/2)^p + O(h^{p+1})}{C(h/2)^p - C(h/4)^p + O(h^{p+1})} = \frac{1 - 2^{-p} + O(h)}{2^{-p} - 2^{-2p} + O(h)} = 2^p + O(h),$$

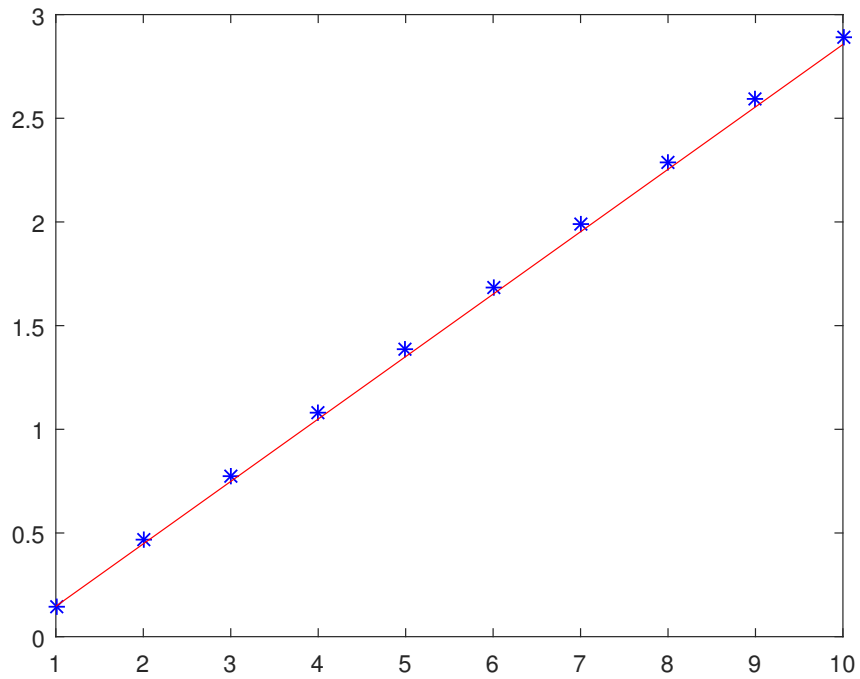
jsme schopni určit řád konvergence přímo z podílů (1.28). Následující grafy ilustrují konvergenci všech tří numerických metod pro $nx_{max} = 2^{13} + 1 = 8193$ v případě řešení linearizované soustavy a $nx_{max} = 2^{12} + 1 = 4097$ ve zbývajících dvou případech, kdy používáme Newtonovu metodu. Ve všech případech uvažujeme $T_{max} = 120s$ (2min). Pro jednoduchost je zde uvažovaný model se stejnými tloušťkami ledu a skla (abychom měli zajištěno, že počet diskretizačních bodů bude celočíselný jak pro časovou, tak i prostorovou diskretizaci). Zbývající parametry jsou stejné jako v (1.21). První dva obrázky 1.24 a 1.25 odpovídají numerické metodě, která řeší lineární soustavu s maticí (1.20). Na prvním grafu jsou zobrazeny odchylky každých dvou řešení příslušných diskretizací s krokem h a $h/2$ (tedy hodnoty $|\bar{\theta}_h - \bar{\theta}_{h/2}|$) v logaritmické škále. Druhý graf obsahuje podíly (1.28). Následující dva obrázky 1.26 a 1.27 odpovídají řešení původní nelineární soustavy, která je dána vztahy (1.8) - (1.12). Nakonec grafy v 1.28 a 1.29 odpovídají řešení modifikované soustavy, ve které vystupuje vztah (1.27) obsahující aproximaci $h(s)$ původního subdiferenciálu $\partial l(s)$. Je vidět, že všechny tři metody jsou prvního řádu (červené čáry v grafech 1.24, 1.26 a 1.28 jsou přímky se směrnicí $\log_{10}(2)$). V následující sekci se pokusíme soustavu (1.8) - (1.12) upravit tak, abychom dosáhli vyššího řádu konvergence.



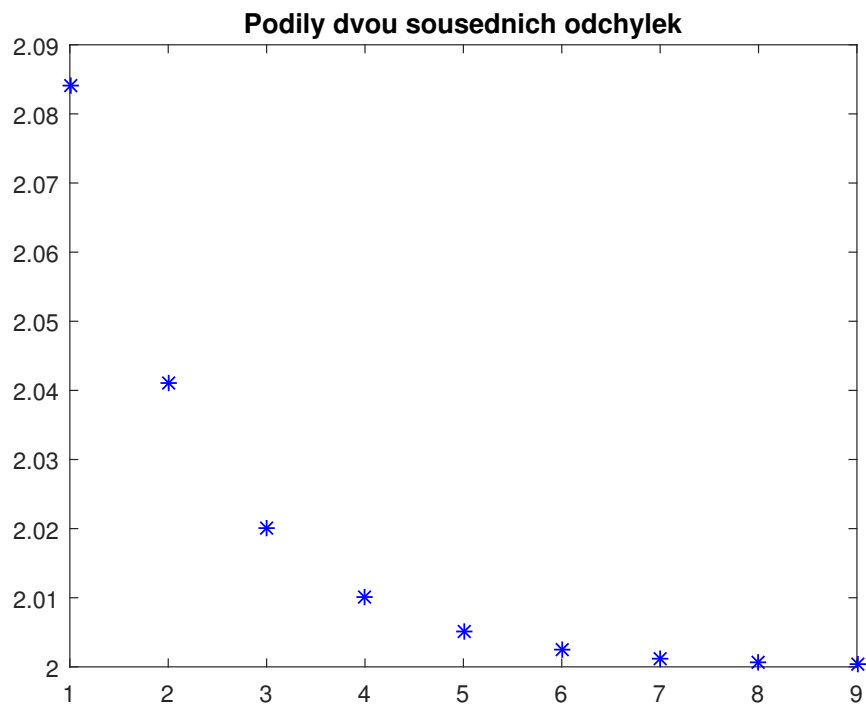
Obrázek 1.24: Graf s hodnotami $-\log_{10}(|\bar{\theta}_h - \bar{\theta}_{h/2}|)$ odpovídající řešení lineární soustavy.



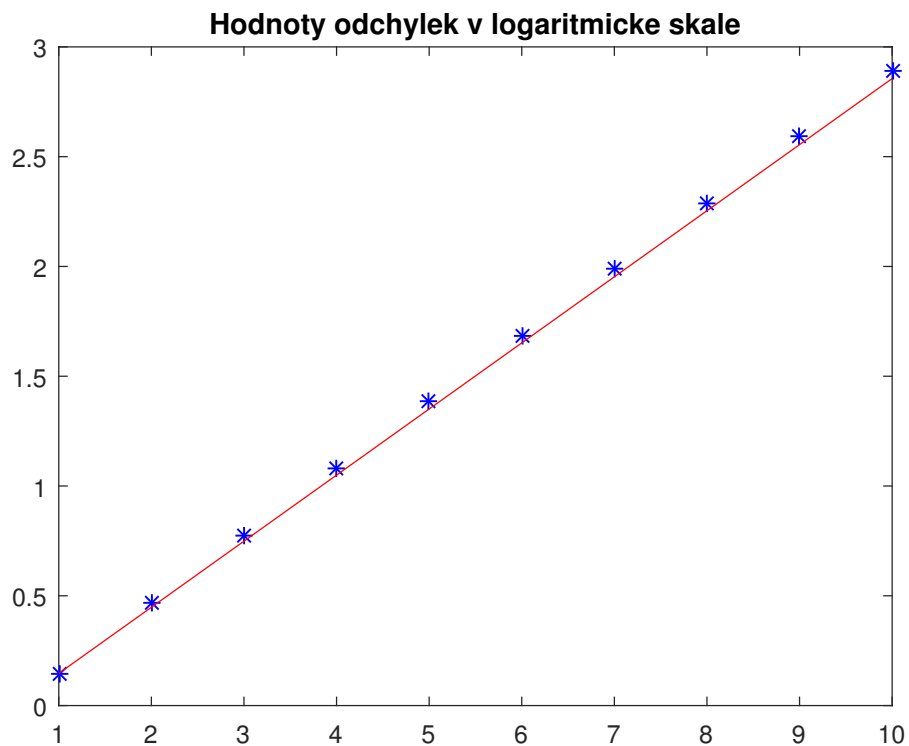
Obrázek 1.25: Podíly každých dvou sousedních odchylek z předchozího grafu.



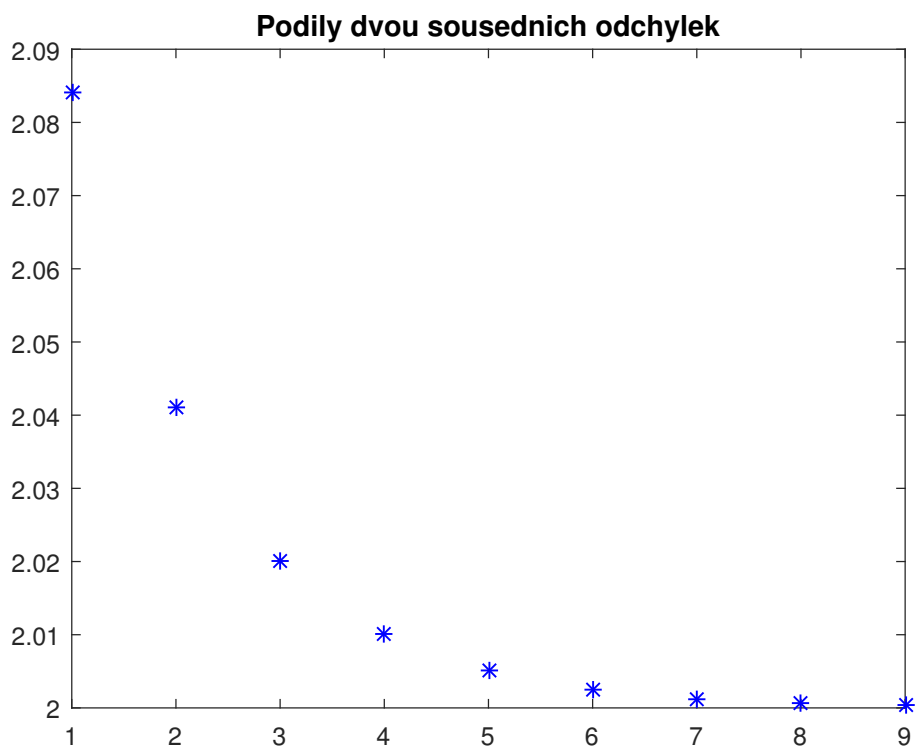
Obrázek 1.26: Graf s hodnotami $-\log_{10}(|\bar{\theta}_h - \bar{\theta}_{h/2}|)$ odpovídající řešení nelineární soustavy.



Obrázek 1.27: Podíly každých dvou sousedních odchylek z předchozího grafu.



Obrázek 1.28: Graf s hodnotami $-\log_{10}(|\bar{\theta}_h - \bar{\theta}_{h/2}|)$ odpovídající řešení nelineární soustavy s použitím Yosidovy aproximace mnohoznačného zobrazení.



Obrázek 1.29: Podíly každých dvou sousedních odchylek z předchozího grafu.

1.3.1 Vylepšení konvergence použitím poměrných diferencí vyššího řádu

Vrátíme-li se ke vztahům (1.10), (1.11) a (1.12) odpovídajícím okrajovým podmínkám, je třeba zdůraznit jednu důležitou věc. Zatímco druhé centrální diference použité v (1.8) a (1.9) jsou aproximacemi druhého řádu, dopředné a zpětné poměrné diference vystupující ve vztazích (1.10), (1.11) a (1.12) jsou pouze prvního řádu. Konvergenci numerických metod se tedy můžeme pokusit vylepšit použitím dopředných a zpětných poměrných diferencí vyššího řádu. Dá se ukázat, že následující diference

$$\begin{aligned} f'_f(x) &= \frac{-3f(x) + 4f(x + \Delta x) - f(x + 2\Delta x)}{2\Delta x}, \\ f'_b(x) &= \frac{3f(x) - 4f(x - \Delta x) + f(x - 2\Delta x)}{2\Delta x} \end{aligned} \quad (1.30)$$

(z angl. **'forward'** = dopředný, **'backward'** = zpětný), které oproti poměrným diferencím prvního řádu používají tři hodnoty, jsou aproximacemi druhého řádu. Použitím těchto nových diferencí přejdou vztahy (1.10), (1.11) a (1.12) do tvaru

$$\kappa_i \frac{-\theta_2^{i,n+1} + 4\theta_1^{i,n+1} - 3\theta_0^{i,n+1}}{2\Delta x} = \alpha_i(\theta_0^{i,n+1} - \theta_{out}^{n+1}) \quad na \ x_a \times (0, T), \quad (1.31)$$

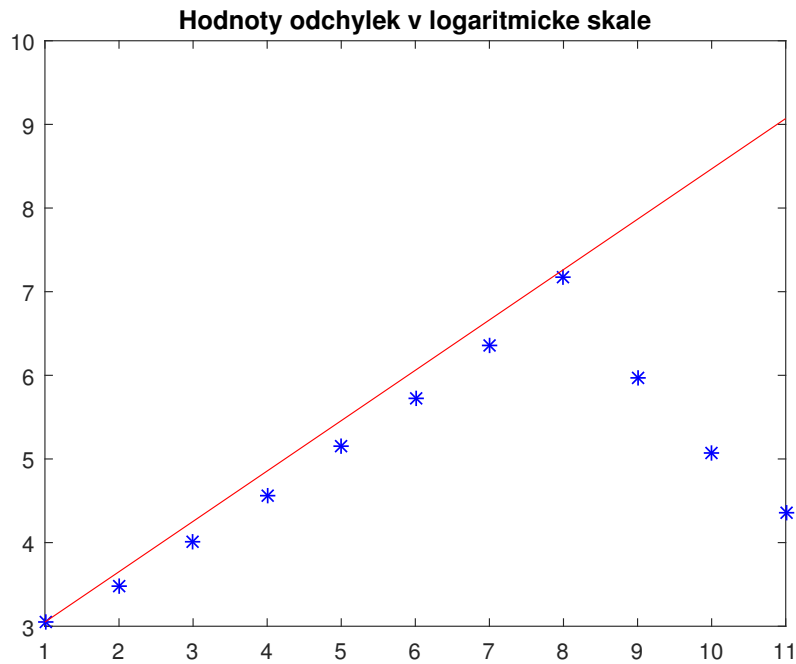
$$-\kappa_i \frac{3\theta_N^{i,n+1} - 4\theta_{N-1}^{i,n+1} + \theta_{N-2}^{i,n+1}}{2\Delta x} = \alpha(\theta_N^{i,n+1} - \theta_0^{g,n+1}) \quad na \ x_m \times (0, T), \quad (1.32)$$

$$\kappa_g \frac{-\theta_2^{g,n+1} + 4\theta_1^{g,n+1} - 3\theta_0^{g,n+1}}{2\Delta x} = \alpha(\theta_0^{g,n+1} - \theta_N^{i,n+1}) \quad na \ x_m \times (0, T),$$

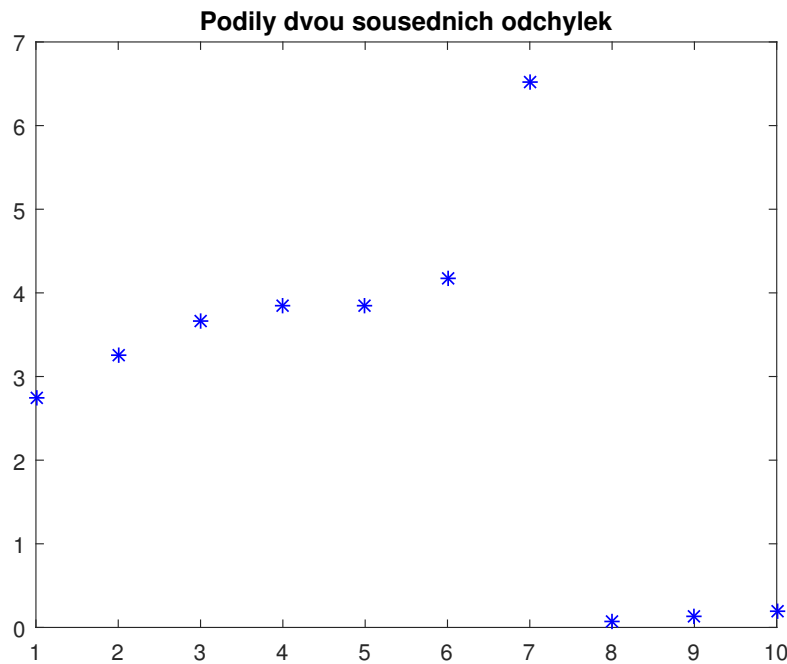
$$-\kappa_g \frac{3\theta_M^{g,n+1} - 4\theta_{M-1}^{g,n+1} + \theta_{M-2}^{g,n+1}}{2\Delta x} = \alpha_g(\theta_M^{g,n+1} - \theta_h^{n+1}) \quad na \ x_b \times (0, T), \quad (1.33)$$

čímž se nám také změní matice (1.20) (přesněji se změní čtyři řádky, které odpovídají okrajovým podmínkám). Stejně tak se změní zobecněná Jacobiho matice odpovídající příslušné nelineární soustavě (1.8) - (1.12). Grafy na obr. 1.30 - 1.35 jsou analogií grafům 1.24 - 1.29 s jediným rozdílem, že příslušné numerické metody pracují se soustavou (1.8) - (1.9) s novými okrajovými podmínkami (1.31) - (1.33) (přesněji řečeno, s novými aproximacemi prostorových derivací vystupujících v okrajových podmínkách (1.5) - (1.6)), ve kterých vystupují poměrné diference druhého řádu (1.30). Jak je vidět, opravdu jsme dosáhli druhého řádu konvergence (tentokrát červené čáry odpovídají přímce se směrnicí $\log_{10}(4)$). Nicméně je vidět, že od určité míry diskretizace dochází k "divné" oscilaci odchylek a příslušných podílů. Podíváme-li se pořádně na grafy odchylek v logaritmické škále, můžeme si všimnout, že v grafech 1.24, 1.26 a 1.28 chyba nejlepší diskretizace je řádově 10^{-3} , zatímco chyby v grafech 1.30, 1.32 a 1.34 klesají výrazně rychleji a dosahují řádu 10^{-6} až 10^{-8} . Poslední hodnoty odpovídají přesnosti řešení soustavy lineárních algebraických rovnic v každém časovém kroku.

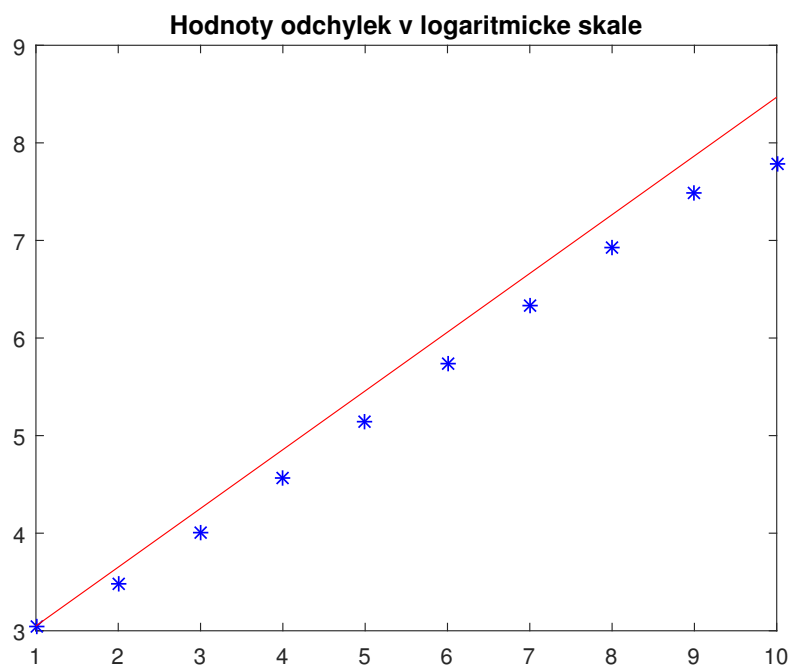
Z tohoto důvodu se od určité míry diskretizace začnou výrazně projevovat chyby samotného řešiče soustav (výpočty implementujeme v prostředí MATLAB).



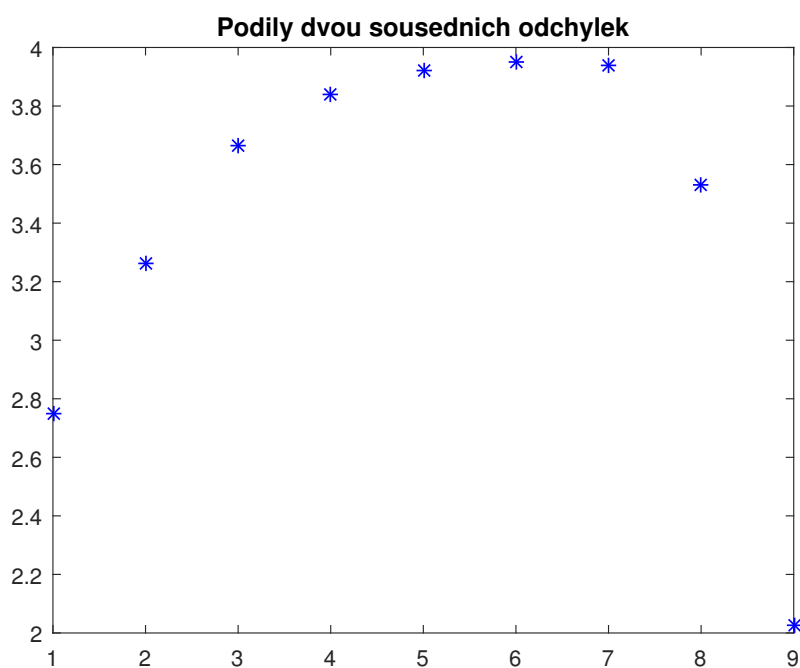
Obrázek 1.30: Graf s hodnotami $-\log_{10}(|\bar{\theta}_h - \bar{\theta}_{h/2}|)$ odpovídající řešení lineární soustavy s použitím poměrných diferencí druhého řádu.



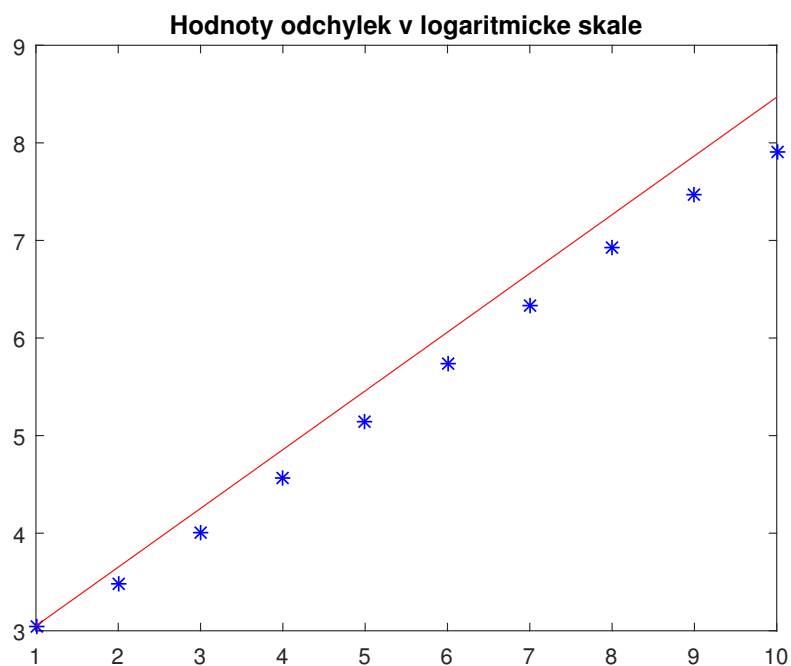
Obrázek 1.31: Podíly každých dvou sousedních odchylek z předchozího grafu.



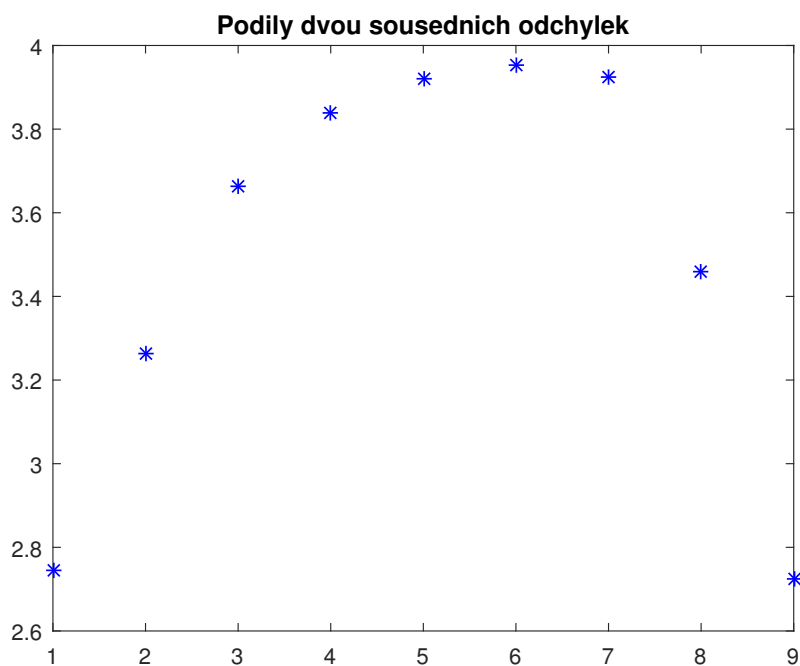
Obrázek 1.32: Graf s hodnotami $-\log_{10}(|\bar{\theta}_h - \bar{\theta}_{h/2}|)$ odpovídající řešení nelineární soustavy s použitím poměrných diferencí druhého řádu.



Obrázek 1.33: Podíly každých dvou sousedních odchylek z předchozího grafu.



Obrázek 1.34: Graf s hodnotami $-\log_{10}(|\bar{\theta}_h - \bar{\theta}_{h/2}|)$ odpovídající řešení nelineární soustavy s použitím Yosidovy aproximace a poměrných diferencí druhého řádu.



Obrázek 1.35: Podíly každých dvou sousedních odchylek z předchozího grafu.

Kapitola 2

2D verze modelu

V této kapitole budeme uvažovat dvoudimenzionální verzi původního modelu (1) - (7). Oproti předchozí kapitole, bude nyní časoprostorová oblast naší úlohy $[x_a, x_b] \times [y_c, y_d] \times [0, T]$ podmnožinou \mathbb{R}^3 . Z toho důvodu se zde projeví okrajové podmínky (6), které v 1D modelu vůbec nevystupovaly a které odpovídají nulovému přestupu tepla bočními stěnami (které v této kapitole budou jednodimenzionální). Následující vztahy odpovídají 2D variantě modelu (1) - (7).

$$c_g \theta_t^g - \kappa_g \theta_{xx}^g - \kappa_g \theta_{yy}^g = 0 \quad na \quad (x_m, x_b) \times (y_c, y_d) \times (0, T), \quad (2.1)$$

$$c_i \theta_t^i + (L(s))_t - \kappa_i \theta_{xx}^i - \kappa_i \theta_{yy}^i = 0 \quad na \quad (x_a, x_m) \times (y_c, y_d) \times (0, T), \quad (2.2)$$

$$\rho s_t + \partial l(s) \ni \frac{1}{\theta_c} (\theta^i - \theta_c) \quad na \quad [x_a, x_m] \times [y_c, y_d] \times (0, T), \quad (2.3)$$

$$\theta^g(x, 0) = \theta_0^g(x) \quad na \quad [x_m, x_b] \times [y_c, y_d],$$

$$\theta^i(x, 0) = \theta_0^i(x) \quad na \quad [x_a, x_m] \times [y_c, y_d], \quad (2.4)$$

$$s(x, 0) = s_0(x) \quad na \quad [x_a, x_m] \times [y_c, y_d],$$

$$-\kappa_i \theta_x^i = \alpha (\theta^i - \theta^g) \quad na \quad x_m \times [y_c, y_d] \times (0, T), \quad (2.5)$$

$$\kappa_g \theta_x^g = \alpha (\theta^g - \theta^i) \quad na \quad x_m \times [y_c, y_d] \times (0, T),$$

$$\kappa_i \theta_x^i = \alpha_i (\theta^i - \theta_{out}) \quad na \quad x_a \times [y_c, y_d] \times (0, T), \quad (2.6)$$

$$-\kappa_g \theta_x^g = \alpha_g (\theta^g - \theta_h) \quad na \quad x_b \times [y_c, y_d] \times (0, T),$$

$$\theta_y^i = 0 \quad na \quad (x_a, x_m) \times \{y_c, y_d\} \times (0, T), \quad (2.7)$$

$$\theta_y^g = 0 \quad na \quad (x_m, x_b) \times \{y_c, y_d\} \times (0, T).$$

Vzhledem k obdélníkové struktuře oblasti, vystupují v rovnicích (2.5), (2.6), (2.7) místo derivací podle normály pouze první parciální derivace podle některé prostorové proměnné. Můžeme zde použít stejný postup pro odstranění diferenciální inkluze jako v případě 1D. Následně

použitím dopředných a zpětných poměrných diferencí a druhých centrálních diferencí dostaneme numerické varianty vztahů (2.1) - (2.7), které budou velmi podobné vztahům (1.8) - (1.12) odpovídajícím 1D modelu,

$$c_g \frac{\theta_{i,j}^{g,n+1} - \theta_{i,j}^{g,n}}{\Delta t} - \kappa_g \frac{\theta_{i-1,j}^{g,n+1} - 2\theta_{i,j}^{g,n+1} + \theta_{i+1,j}^{g,n+1}}{(\Delta x)^2} - \kappa_g \frac{\theta_{i,j-1}^{g,n+1} - 2\theta_{i,j}^{g,n+1} + \theta_{i,j+1}^{g,n+1}}{(\Delta y)^2} = 0, \quad (2.8)$$

$$c_i \frac{\theta_{i,j}^{i,n+1} - \theta_{i,j}^{i,n}}{\Delta t} + L'(s_{i,j}^{n+1}) \frac{F^{-1}\left(\frac{\Delta t}{\rho} \frac{\theta_{i,j}^{i,n+1} - \theta_c}{\theta_c}\right) - s_{i,j}^n}{\Delta t} - \kappa_i \frac{\theta_{i-1,j}^{i,n+1} - 2\theta_{i,j}^{i,n+1} + \theta_{i+1,j}^{i,n+1}}{(\Delta x)^2} - \kappa_i \frac{\theta_{i,j-1}^{i,n+1} - 2\theta_{i,j}^{i,n+1} + \theta_{i,j+1}^{i,n+1}}{(\Delta y)^2} = 0, \quad (2.9)$$

$$\kappa_i \frac{\theta_{1,j}^{i,n+1} - \theta_{0,j}^{i,n+1}}{\Delta x} = \alpha_i (\theta_{0,j}^{i,n+1} - \theta_{out}^{n+1}) \quad na \quad x_a \times [y_c, y_d] \times (0, T), \quad (2.10)$$

$$-\kappa_i \frac{\theta_{N,j}^{i,n+1} - \theta_{N-1,j}^{i,n+1}}{\Delta x} = \alpha (\theta_{N,j}^{i,n+1} - \theta_{0,j}^{g,n+1}) \quad na \quad x_m \times [y_c, y_d] \times (0, T), \quad (2.11)$$

$$\kappa_g \frac{\theta_{1,j}^{g,n+1} - \theta_{0,j}^{g,n+1}}{\Delta x} = \alpha (\theta_{0,j}^{g,n+1} - \theta_{N,j}^{i,n+1}) \quad na \quad x_m \times [y_c, y_d] \times (0, T),$$

$$-\kappa_g \frac{\theta_{M,j}^{g,n+1} - \theta_{M-1,j}^{g,n+1}}{\Delta x} = \alpha_{g,j} (\theta_{M,j}^{g,n+1} - \theta_{h,j}^{n+1}) \quad na \quad x_b \times [y_c, y_d] \times (0, T), \quad (2.12)$$

$$\frac{\theta_{i,0}^{i,n+1} - \theta_{i,1}^{i,n+1}}{\Delta y} = 0 \quad na \quad [x_a, x_m] \times y_c \times (0, T),$$

$$\frac{\theta_{i,K}^{i,n+1} - \theta_{i,K-1}^{i,n+1}}{\Delta y} = 0 \quad na \quad [x_a, x_m] \times y_d \times (0, T),$$

$$\frac{\theta_{i,0}^{g,n+1} - \theta_{i,1}^{g,n+1}}{\Delta y} = 0 \quad na \quad [x_m, x_b] \times y_c \times (0, T),$$

$$\frac{\theta_{i,K}^{g,n+1} - \theta_{i,K-1}^{g,n+1}}{\Delta y} = 0 \quad na \quad [x_m, x_b] \times y_d \times (0, T). \quad (2.13)$$

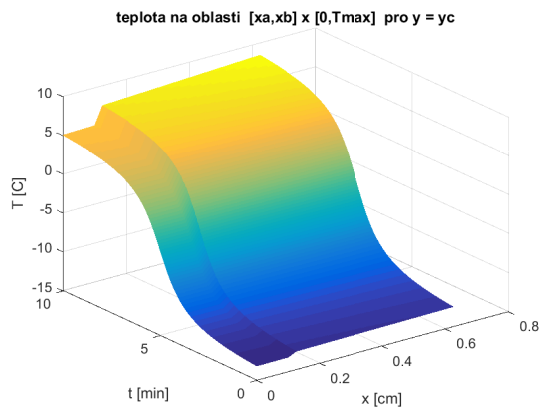
Zásadním rozdílem oproti 1D modelu je závislost součinitele tepelné vodivosti na rozhraní sklo-kabina a vnitřní teploty na druhé prostorové proměnné, proto ve vztahu (2.12) α_g a θ_h^{n+1} vystupují s příslušným indexem j , který odpovídá druhé prostorové proměnné (hodnoty α_g a θ_h^{n+1} obecně závisí na vzdálenosti od místa, na které tepelný zdroj fouká nejvíce).

Nyní provedeme výpočet 2D úlohy (2.1) - (2.7) pro následující parametry (většina z nich odpovídá parametrům (1.21), které byly použité pro výpočty 1D úlohy v první kapitole)

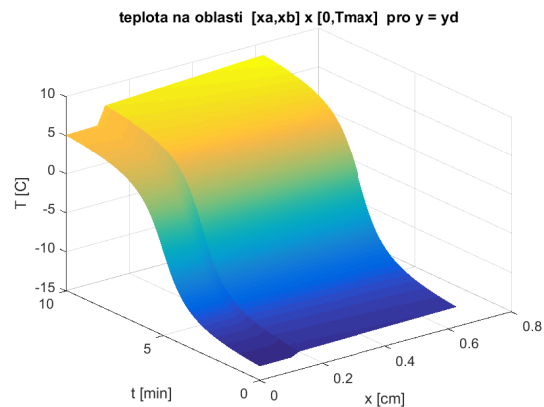
$$\begin{aligned}
x_a = 0, \quad x_m = 10^{-3}, \quad x_b = 6 \cdot 10^{-3}, \quad y_c = 0, \quad y_d = 0.5 \quad [m], \quad T = 600 \quad [s], \\
c_i = 2040, \quad c_g = 754 \quad [J/kg \cdot K], \\
\kappa_i = 1.88, \quad \kappa_g = 1.17 \quad [W/m \cdot K], \\
\alpha_i = 10, \quad \alpha_g(y) = 20, \quad \alpha = 100 \quad [W/m^2 \cdot K], \\
\theta_c = 273.15 \quad [K], \quad \rho = 1 \quad [s], \quad L(s) = 334960 \cdot (s + 1)/2 \quad [J/kg], \\
\theta_{out}(0) = -18, \quad \theta_{out}(T) = -18, \quad \theta_h(y, 0) = -10, \quad \theta_h(y, T) = 20, \\
\theta^i(0, y, 0) = -13.15, \quad \theta^i(x_m, y, 0) = -13.12, \\
\theta^g(x_m, y, 0) = -12.63, \quad \theta^g(x_b, y, 0) = -12.43 \quad [C], \\
s(0, y, 0) = -1, \quad s(x_m, y, 0) = -1, \\
N = 10, \quad M = 50, \quad K = 50, \quad \Delta t = 100 \cdot \Delta x.
\end{aligned} \tag{2.14}$$

Zde nově zavádíme hodnoty y_c a y_d , které odpovídají krajním bodům druhé prostorové proměnné. Hodnota K potom odpovídá počtu diskretizačních bodů této proměnné. Z praktického hlediska můžeme rozložení všech uvažovaných veličin považovat za homogenní vzhledem k proměnné y . Výjimkou budou součinitel tepelné vodivosti na rozhraní sklo-kabina α_g a vnitřní teplota θ_h , které obecně závisí na y . Z toho důvodu provedeme dva výpočty postupně pro homogenní, a následně nehomogenní rozložení hodnot α_g a θ_h . Rozložení počáteční teploty necht' odpovídá stacionárnímu stavu úlohy. Průběh vnitřní teploty uvažujme analogický jako v předchozí kapitole (viz graf na obr. 1.7).

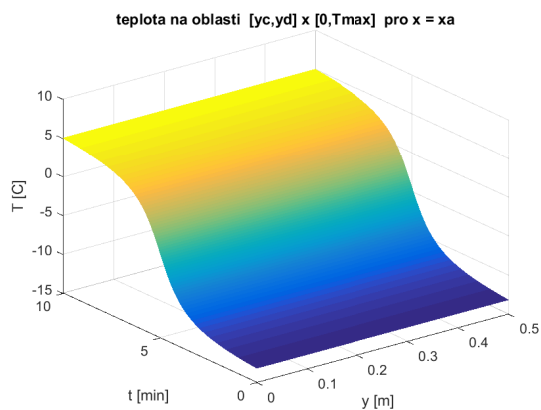
Následující obrázky 2.1 - 2.8 ilustrují řešení 2D úlohy spočtené pro výše uvedené parametry. Jak je vidět, situace se téměř neliší od řešení příslušné úlohy v 1D se stejnými parametry. Grafy 2.1 a 2.2, které odpovídají rozložení teploty obou materiálů pro pevné řezy v proměnné y , jsou analogické grafu 1.14. Stejně tak libovolný řez grafů na obr. 2.5 a 2.6 bude odpovídat příslušným grafům v 1D 1.10 a 1.11. V grafech 2.3 a 2.4, které odpovídají teplotě celé soustavy v řezech podle x , je lépe vidět homogenní rozložení teploty vzhledem k druhé prostorové proměnné. Nakonec časové okamžiky tání ledu v různých místech, což jsou klíčové hodnoty dané úlohy, jsou vykreslené na obr. 2.8. Porovnáním s grafem 1.9 zjistíme, že 1D graf opravdu odpovídá řezu grafu 2.8 v libovolném bodě y .



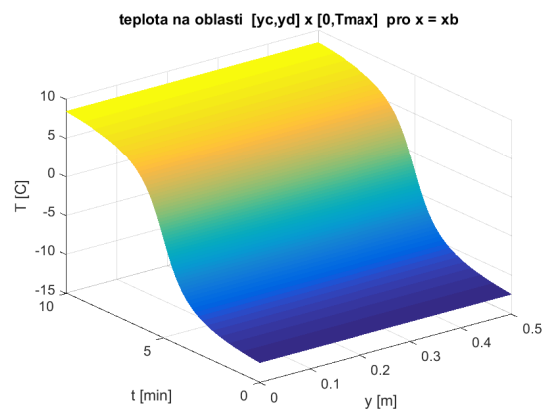
Obrázek 2.1: Časový průběh teploty pro řez $y = 0$.



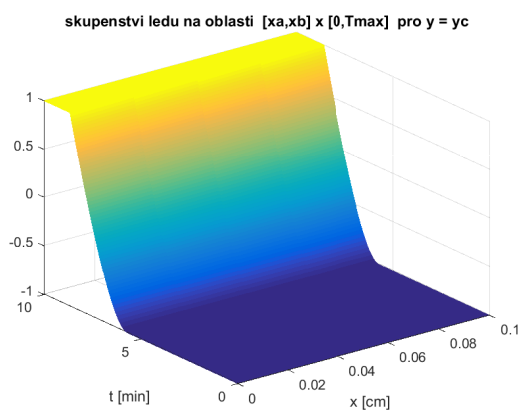
Obrázek 2.2: Časový průběh teploty pro řez $y = 0.5m$.



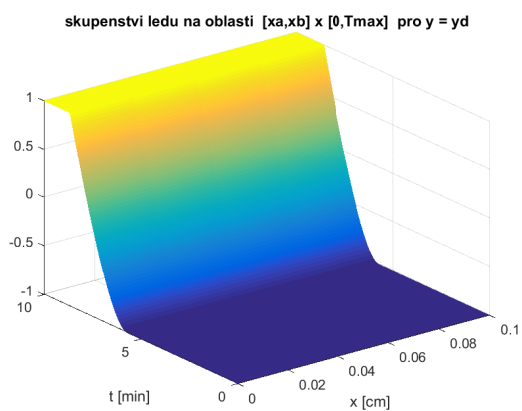
Obrázek 2.3: Časový průběh teploty pro řez $x = 0$.



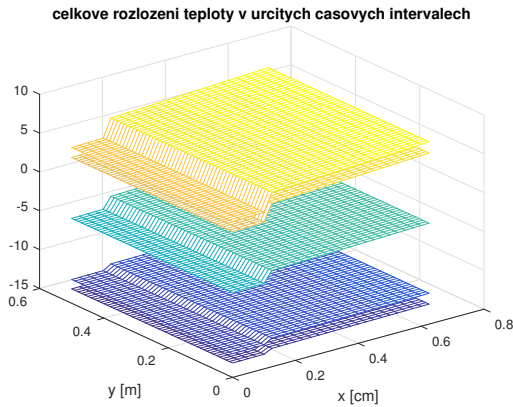
Obrázek 2.4: Časový průběh teploty pro řez $x = 6mm$.



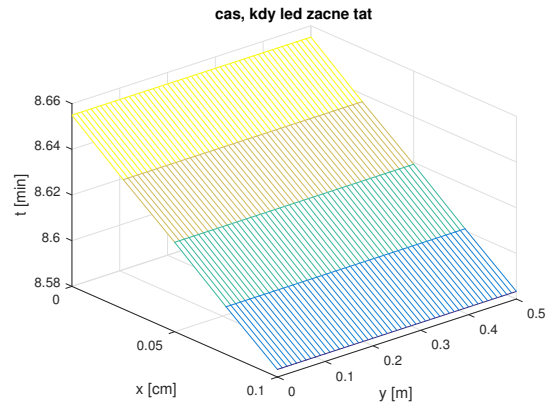
Obrázek 2.5: Rozložení skupenství ledu pro řez $y = 0$.



Obrázek 2.6: Rozložení skupenství ledu pro řez $y = 0.5m$.



Obrázek 2.7: Rozložení teploty celé soustavy v časech $t = 0$, $t = T/4$, $t = T/2$, $t = 3T/4$, $t = T$.



Obrázek 2.8: Časy, kdy led roztaje.

Poznámka 13. V první kapitole jsme ukázali tři možné postupy řešení úlohy (1.1) - (1.6). Kromě řešení linearizované soustavy jsme také počítali řešení původní nelineární soustavy dané vztahy (1.8) - (1.12) pomocí zobecněné Newtonovy metody (viz druhá část podkapitoly 1.1) a následně jsme tuto metodu použili také pro řešení modifikované úlohy, kde jsme původní inkluzi (1.3) nahradili Yosidovou aproximací (1.26) (viz podkapitola 1.2). Dá se ukázat, že všechny metody aplikované na příslušnou 2D úlohu dávají téměř stejné výsledky s odchylkami, jejichž chování je obdobné jako v 1D úloze, kde větší odchylky budou vznikat opět v místech, kde led začíná měnit své skupenství, a také na počátku procesu, kdy hodnoty skupenství ledu leží mimo interval $[-1, 1]$. Vzhledem k tomu, že matice linearizované soustavy 2D úlohy (2.1) - (2.7), příslušná zobecněná Jacobiho matice (která má téměř všechny prvky stejné jako matice linearizované soustavy), a také zobecněná Jacobiho matice v případě použití Yosidovy aproximace vypadají oproti 1D výrazně komplikovaněji, neuvádíme zde podrobně použití těchto dvou zbývajících metod pro řešení 2D úlohy.

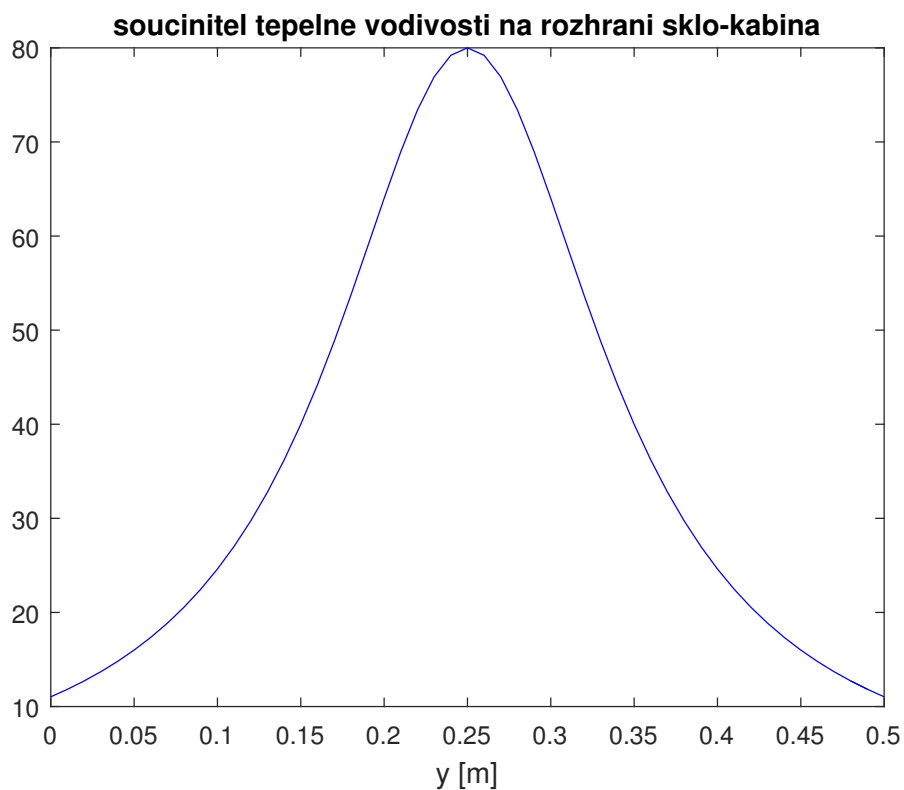
Nyní provedeme výpočet pro stejné parametry (2.14), tentokrát s nehomogenním rozložením hodnot součinitele tepelné vodivosti na rozhraní sklo-kabina a vnitřní teploty. Abychom náš model maximálně přiblížili reálné situaci, je třeba funkce $\alpha_g(y)$ a $\theta_h(y, t)$ volit tak, aby svých maximálních hodnot nabývaly v místě, které je nejvíc ofukované tepelným zdrojem. Grafy na obr. 2.12 - 2.19 ilustrují řešení 2D úlohy, kde součinitel tepelné vodivosti na rozhraní sklo-kabina a vnitřní teplota mají následující tvar

$$\alpha_g(y) = \frac{80}{1 + 25(y - y_m)^2 / y_d^2}, \quad (2.15)$$

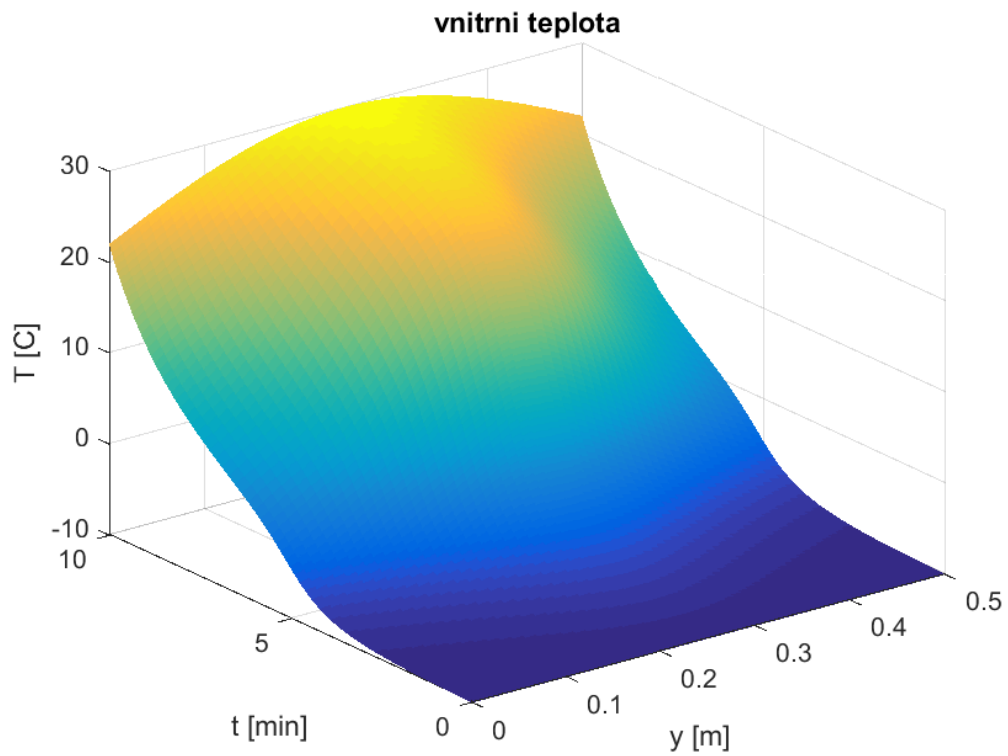
$$T_h(y, t) = \frac{20 + \frac{20 \arctan(t/60 - 5)}{\arctan(5)}}{1 + 4(20 - \frac{19}{T}t)(y - y_m)^2} - 10, \quad (2.16)$$

kde y_m je prostřední bod druhé prostorové proměnné, zde tedy $y_m = 0.25m$. Grafy těchto funkcí jsou znázorněné na obr. (2.9) a (2.10) (na obr. 2.11 jsou řezy grafu 2.10 v určitých časech), tedy uvažujeme situaci, kdy tepelný zdroj fouká přímo na střed skla. Jak je vidět, v místech, která jsou blízko tepelného zdroje, teplota roste rychleji a led taje dříve než na krajích. Vzhledem k tomu, že jsme zvolili takové umístění tepelného zdroje, aby čelní sklo nejvíce zahřívával uprostřed, vychází všechny hodnoty teploty a skupenství symetrické podle středu vzhledem k druhé prostorové proměnné.

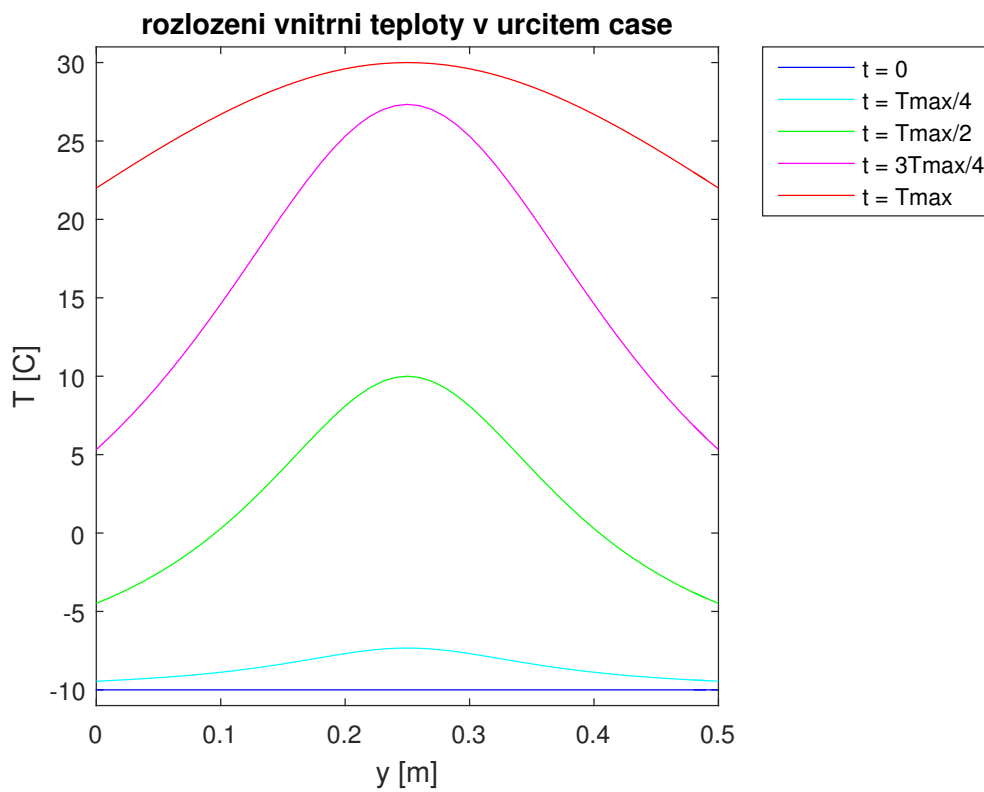
Dále je třeba si také všimnout, že v grafech (2.13), (2.14) a (2.15) jsou patrné skoky teploty na počátku procesu. Podobně jako na obr. (1.12) je to způsobené tím, že námi zvolená počáteční teplota v případě nehomogenního rozložení funkce $\alpha(y)$ neodpovídá skutečnému stacionárnímu stavu. Oproti 1D bychom museli pro stanovení stacionárního stavu 2D úlohy vyřešit Laplaceovu rovnici v \mathbb{R}^2 s nehomogenními okrajovými podmínkami. Nehledě na to, že jsme schopni spočítat analytické řešení (pomocí rozvoju počátečních podmínek do Fourierových řad), výsledný vztah bychom dostali ve tvaru nekonečné řady a z praktického hlediska tento výpočet zde vynecháváme.



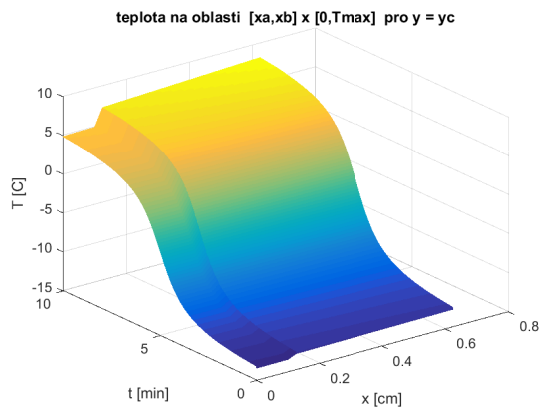
Obrázek 2.9: Závislost součinitele tepelné vodivosti na rozhraní sklo-kabina na y .



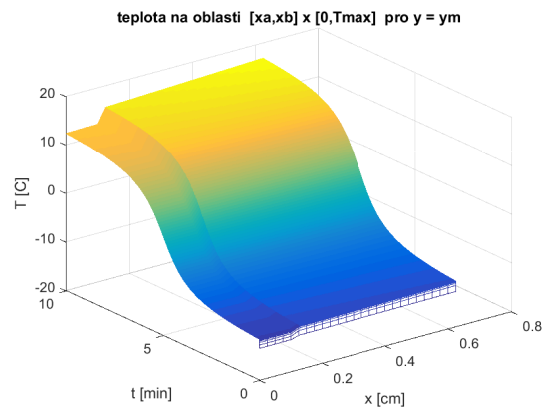
Obrázek 2.10: Závislost vnitřní teploty na y a t .



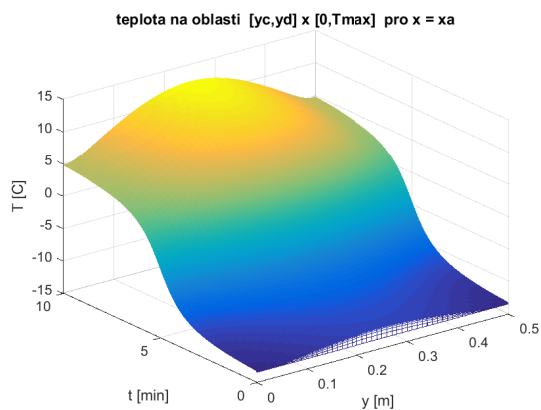
Obrázek 2.11: Rozložení vnitřní teploty v časech $t = 0, t = T/4, t = T/2, t = 3T/4, t = T$.



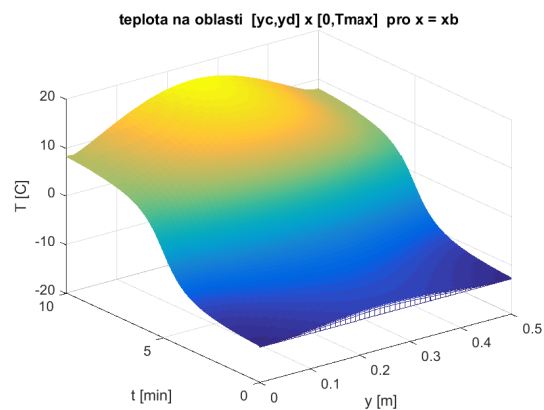
Obrázek 2.12: Časový průběh teploty pro řez $y = 0$.



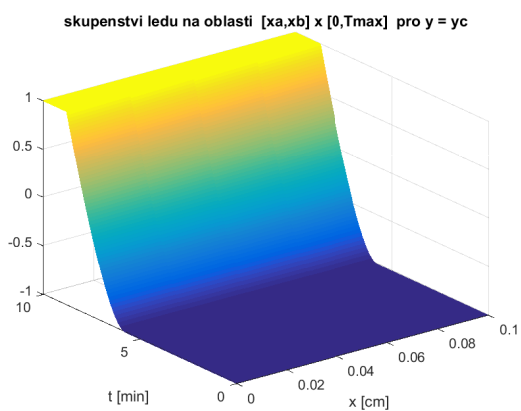
Obrázek 2.13: Časový průběh teploty pro řez $y = y_m$.



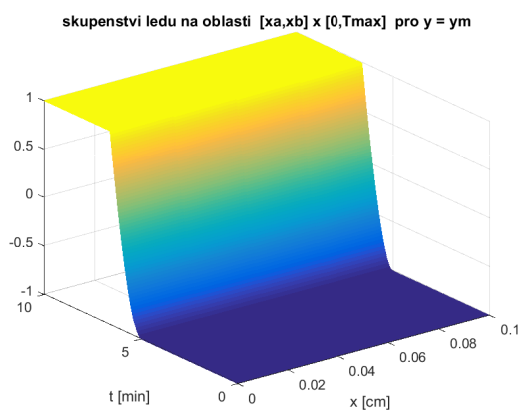
Obrázek 2.14: Časový průběh teploty pro řez $x = 0$.



Obrázek 2.15: Časový průběh teploty pro řez $x = 6mm$.

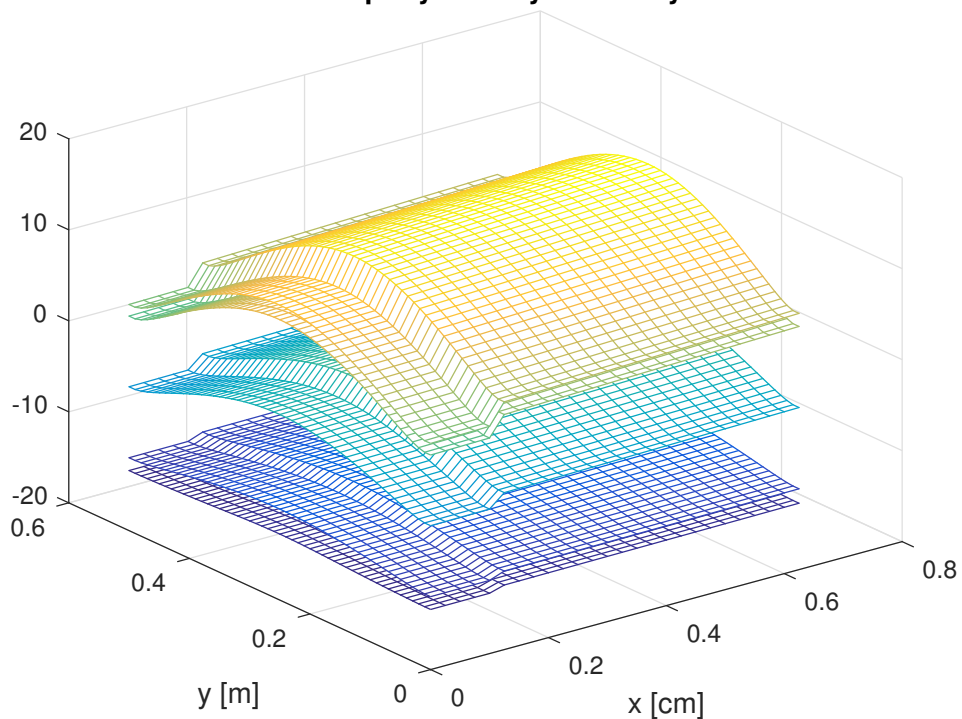


Obrázek 2.16: Rozložení skupenství ledu pro řez $y = 0$.



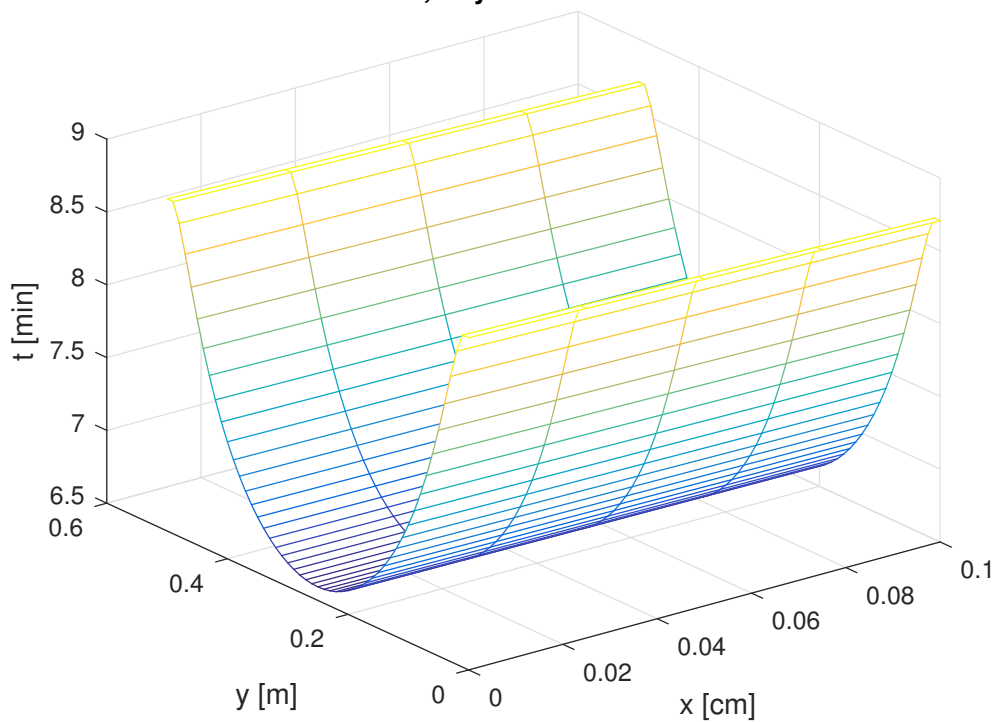
Obrázek 2.17: Rozložení skupenství ledu pro řez $y = y_m$.

celkove rozlozeni teploty v urcitech casovych intervalech



Obrázek 2.18: Rozložení teploty celé soustavy v časech $t = 0$, $t = T/4$, $t = T/2$, $t = 3T/4$, $t = T$.

cas, kdy led zacne tat



Obrázek 2.19: Časy, kdy led roztaje.

Kapitola 3

3D verze modelu

Z důvodu časové a paměťové náročnosti výpočtů ve třech dimenzích uvedeme zde výsledky jedné konkrétní simulace modelu (1) - (7), který ve třech dimenzích je dán vztahy

$$c_g \theta_t^g - \kappa_g \theta_{xx}^g - \kappa_g \theta_{yy}^g - \kappa_g \theta_{zz}^g = 0 \quad na \ (x_m, x_b) \times (y_c, y_d) \times (z_e, z_f) \times (0, T), \quad (3.1)$$

$$c_i \theta_t^i + (L(s))'_t - \kappa_i \theta_{xx}^i - \kappa_i \theta_{yy}^i - \kappa_i \theta_{zz}^i = 0 \quad na \ (x_a, x_m) \times (y_c, y_d) \times (z_e, z_f) \times (0, T), \quad (3.2)$$

$$\rho s_t + \partial l(s) \ni \frac{1}{\theta_c} (\theta^i - \theta_c) \quad na \ [x_a, x_m] \times [y_c, y_d] \times [z_e, z_f] \times (0, T), \quad (3.3)$$

$$\theta^g(x, 0) = \theta_0^g(x) \quad na \ [x_m, x_b] \times [y_c, y_d] \times [z_e, z_f],$$

$$\theta^i(x, 0) = \theta_0^i(x) \quad na \ [x_a, x_m] \times [y_c, y_d] \times [z_e, z_f], \quad (3.4)$$

$$s(x, 0) = s_0(x) \quad na \ [x_a, x_m] \times [y_c, y_d] \times [z_e, z_f],$$

$$-\kappa_i \theta_x^i = \alpha (\theta^i - \theta^g) \quad na \ x_m \times [y_c, y_d] \times [z_e, z_f] \times (0, T), \quad (3.5)$$

$$\kappa_g \theta_x^g = \alpha (\theta^g - \theta^i) \quad na \ x_m \times [y_c, y_d] \times [z_e, z_f] \times (0, T),$$

$$\kappa_i \theta_x^i = \alpha_i (\theta^i - \theta_{out}) \quad na \ x_a \times [y_c, y_d] \times [z_e, z_f] \times (0, T), \quad (3.6)$$

$$-\kappa_g \theta_x^g = \alpha_g (\theta^g - \theta_h) \quad na \ x_b \times [y_c, y_d] \times [z_e, z_f] \times (0, T),$$

$$\theta_y^i = 0 \quad na \ (x_a, x_m) \times \{y_c, y_d\} \times [z_e, z_f] \times (0, T),$$

$$\theta_y^g = 0 \quad na \ (x_m, x_b) \times \{y_c, y_d\} \times [z_e, z_f] \times (0, T),$$

$$\theta_z^i = 0 \quad na \ (x_a, x_m) \times (y_c, y_d) \times \{z_e, z_f\} \times (0, T),$$

$$\theta_z^g = 0 \quad na \ (x_m, x_b) \times (y_c, y_d) \times \{z_e, z_f\} \times (0, T). \quad (3.7)$$

Uvažujme, že tepelný zdroj je umístěn v polovině mezi středem skla a jeho dolním pravým rohem. Čelní sklo je tedy nejvíce zahříváno v místě, které v rovině yz má souřadnici $[y_m, z_m]$, kde $y_m = \frac{3}{4}y_d$ a $z_m = \frac{1}{4}z_f$. Dále uvažujme následující hodnoty parametrů

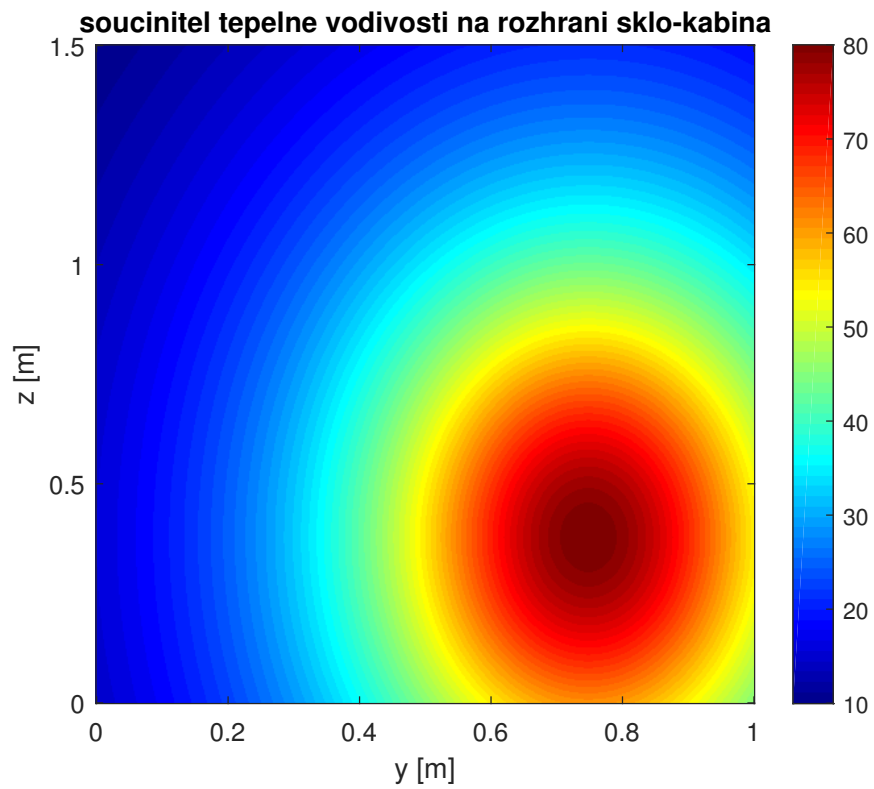
$$\begin{aligned}
x_a = 0, \quad x_m = 10^{-3}, \quad x_b = 6 \cdot 10^{-3}, \quad y_c = 0, \quad y_d = 1, \\
z_e = 0, \quad z_f = 1.5 \quad [m], \quad T = 600 \quad [s], \\
c_i = 2040, \quad c_g = 754 \quad [J/kg \cdot K], \\
\kappa_i = 1.88, \quad \kappa_g = 1.17 \quad [W/m \cdot K], \\
\alpha_i = 10, \quad \alpha = 100 \quad [W/m^2 \cdot K], \\
\theta_c = 273.15 \quad [K], \quad \rho = 1 \quad [s], \quad L(s) = 334960 \cdot (s+1)/2 \quad [J/kg], \\
\theta_{out}(0) = -18, \quad \theta_{out}(T) = -18, \quad \theta_h(y_m, z_m, 0) = -10, \quad \theta_h(y_m, z_m, T) = 30, \\
\theta^i(0, y, z, 0) = -18, \quad \theta^i(x_m, y, z, 0) = -15, \\
\theta^g(x_m, y, z, 0) = -15, \quad \theta^g(x_b, y, z, 0) = -10 \quad [C], \\
s(0, y, z, 0) = -1, \quad s(x_m, y, z, 0) = -1, \\
nx_i = 4, \quad nx_g = 16, \quad ny = 20, \quad nz = 30, \quad \Delta t = 200 \cdot \Delta x.
\end{aligned} \tag{3.8}$$

Zde nx_i resp. nx_g je počet dělicích bodů první prostorové proměnné pro led resp. sklo, analogicky ny resp. nz je počet dělicích bodů druhé resp. třetí prostorové proměnné. Součinitel tepelné vodivosti na rozhraní sklo-kabina a vnitřní teplota jsou dány funkcemi

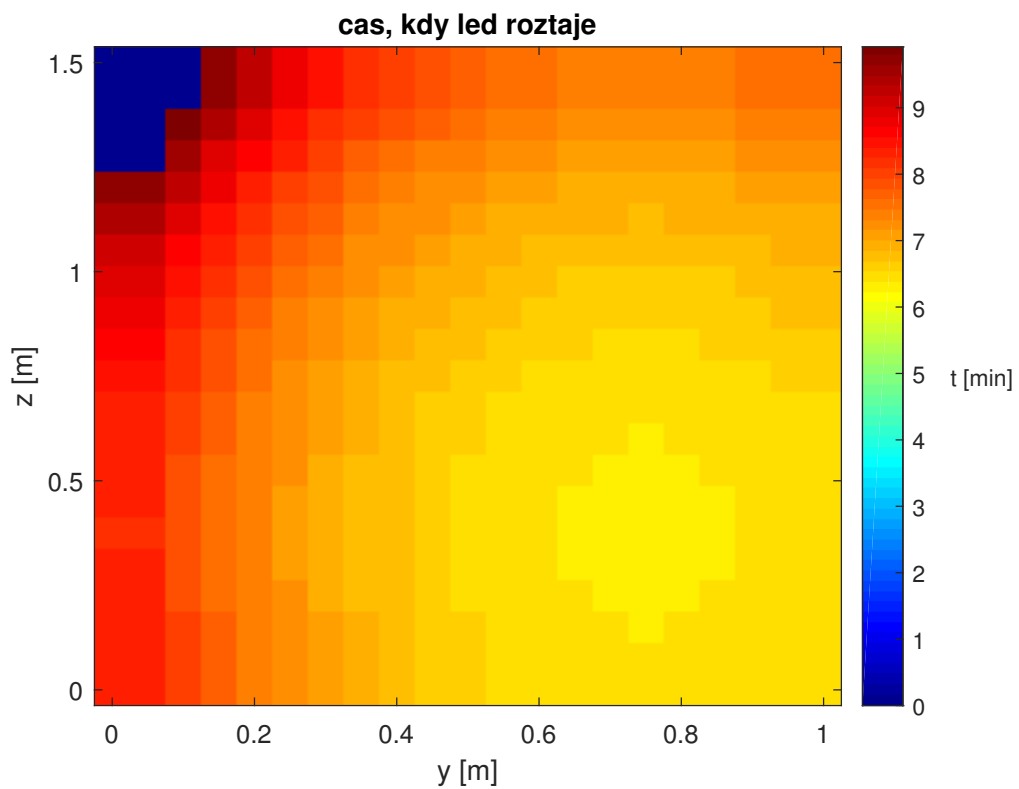
$$\alpha_g(y, z) = \frac{80}{1 + 25((y - y_m)^2/y_d^2 + (z - z_m)^2/z_d^2)}, \tag{3.9}$$

$$T_h(y, z, t) = \frac{20 + \frac{20 \arctan(t/60-5)}{\arctan(5)}}{1 + 4(20 - \frac{19}{T}t)(y - y_m)^2(z - z_m)^2} - 10, \tag{3.10}$$

které jsou jistou analogií funkcím (2.15) a (2.16), které jsme zvolili pro 2D simulaci. Graf funkce α_g z (3.9) je znázorněn na obr. 3.1. Výsledné časové okamžiky, kdy led roztaje, jsou zobrazeny na obr. 3.2. Je vidět, že při této volbě parametrů (3.8) a funkcí (3.9), (3.10) po uplynutí zvoleného časového intervalu je stále malá oblast na čelním skle, kde led nestihne úplně roztát. Tato oblast je umístěná v levém horním rohu, který se od zdroje tepla nachází nejdále.



Obrázek 3.1: Závislost součinitele tepelné vodivosti na rozhraní sklo-kabina na y a z .



Obrázek 3.2: Časy, kdy led roztaje.

Kapitola 4

Shrnutí teoretických poznatků

Teorie, pomocí které lze dokázat existenci a jednoznačnost naší úlohy (1) - (7), je poněkud rozsáhlá. Model řešený v daném textu je velmi speciálním případem obecnějších úloh, na které se tato teorie vztahuje. Je založena hlavně na slabé formulaci a její výklad je nad rámec této práce. V této kapitole jsou uvedeny některé vybrané části teorie, které využíváme v rámci práce. Obsahuje některé základní definice nejčastěji používaných pojmů, ale také i některé další poznatky z teorie mnohoznačných zobrazení a obecně parciálních diferenciálních rovnic. Podrobnější informace ohledně existence a jednoznačnosti řešení úloh tohoto typu, lze najít např. v [3] a [4]. Důkazy konvergence příslušných numerických metod lze najít např. v [5].

4.1 Teorie mnohoznačných funkcí

Definice 1. *Mnohoznačná funkce $F : \mathbb{R}^n \rightrightarrows \mathbb{R}^n$ je zobrazení, které každému bodu $x \in \mathbb{R}^n$ přiřadí množinu $F(x) \subset \mathbb{R}^n$, zvanou obraz F v bodě x . Definiční obor $dom(F)$ a obor hodnot $rge(F)$ jsou definovány následovně*

$$\begin{aligned} dom(F) &:= \{x \in \mathbb{R}^n : F(x) \neq \emptyset\}, \\ rge(F) &:= \{y \in \mathbb{R}^n : \exists x \in dom(F), F(x) = y\}. \end{aligned} \tag{4.1}$$

Graf $gph(F)$ mnohoznačné funkce F je definován:

$$gph(F) := \{(x, y) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n : y \in F(x)\}.$$

Inverzní funkce F^{-1} mnohoznačné funkce F vždy existuje a její obraz v bodě $y \in \mathbb{R}^n$ je definován $F^{-1}(y) = \{x \in \mathbb{R}^n : y \in F(x)\}$.

Definice 2. Necht' $F : \mathbb{R}^n \rightrightarrows \mathbb{R}^n$ je mnohoznačná funkce. Řekněme, že F je

(i) monotónní, pokud

$$\langle y_1 - y_2, x_1 - x_2 \rangle \geq 0, \quad \forall x_1, x_2 \in \mathbb{R}^n, y_1 \in F(x_1), y_2 \in F(x_2),$$

kde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ je euklidovský skalární součin

(ii) maximálně monotónní, pokud platí následující implikace. Necht' $G : \mathbb{R}^n \rightrightarrows \mathbb{R}^n$ je monotónní a $\text{gph}(F) \subset \text{gph}(G)$, potom $F = G$.

Poznámka 14. Platí, že pokud mnohoznačná funkce $F : \mathbb{R}^n \rightrightarrows \mathbb{R}^n$ je maximálně monotónní, pak je monotónní. Maximální monotonie je tedy silnější vlastnost.

Poznámka 15. Mnohoznačné zobrazení $\partial l(s)$ z první kapitoly (viz obr. 1.2) je maximálně monotónní.

Definice 3. Funkce $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ je zdola polospojité, pokud pro každou posloupnost $\{x_k\}_{k=1}^{\infty}$ takovou, že $x_k \rightarrow x \in \mathbb{R}^n$ platí

$$f(x) \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} f(x_k).$$

Definice 4. Necht' $M \subset \mathbb{R}^n$ je konvexní množina a $f : M \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ je konvexní a zdola polospojité funkce. Pro $x \in M$ definujeme subdiferenciál funkce f v bodě x (značíme $\partial f(x)$) jako množinu všech $x^* \in \mathbb{R}^n$, pro které platí

$$\langle x^*, y - x \rangle \leq f(y) - f(x), \quad \forall y \in M. \quad (4.2)$$

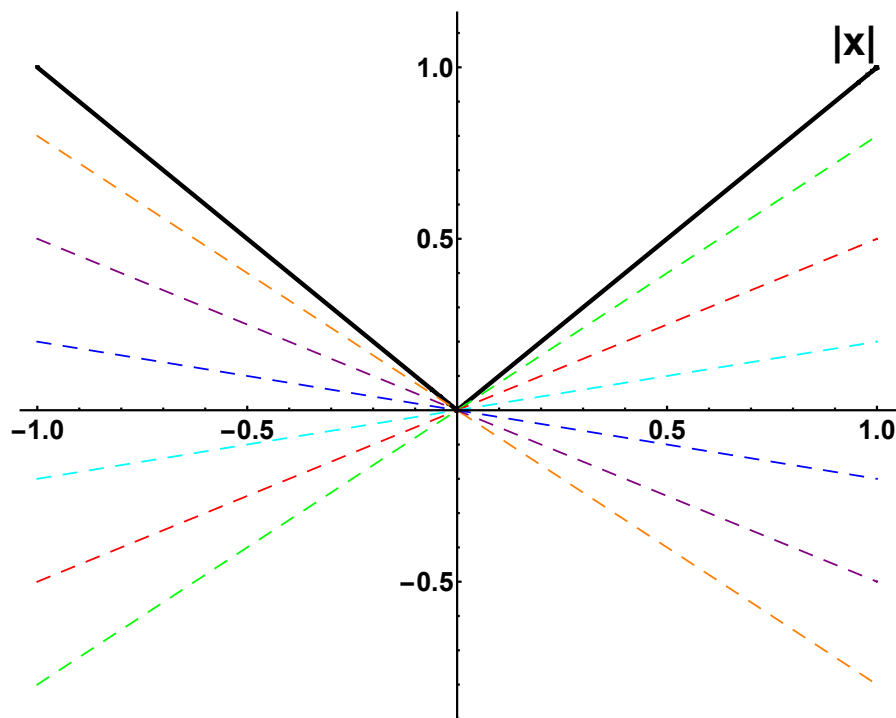
Příklad 1. Subdiferenciál si můžeme názorně představit pro $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Na obr. 4.1 je znázorněná funkce $f(x) = |x|$, která není diferencovatelná v nule. Je jasné, že příмка procházející počátkem bude ležet pod grafem funkce f právě tehdy, když její směrnice bude z intervalu $(-1, 1)$. Protože v definici (4.2) je neostrá nerovnost, subdiferenciálem funkce f v bodě $x = 0$ je tedy uzavřený interval $[-1, 1]$. Vzhledem k tomu, že pro všechny $x \neq 0$ existuje $f'(x)$, pro kterou platí

$$f'(x) = \begin{cases} -1, & x < 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases}, \quad (4.3)$$

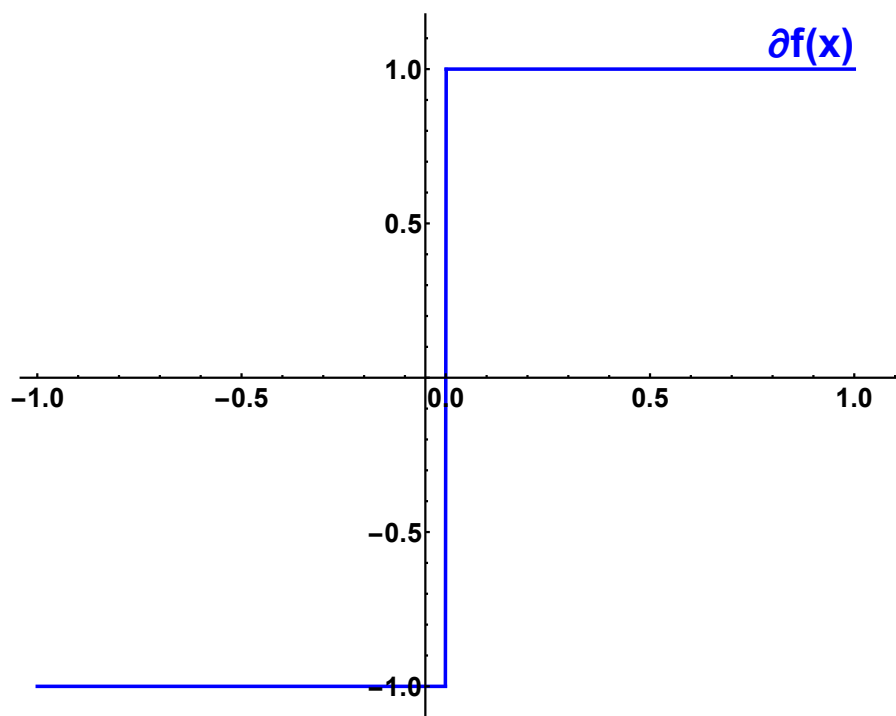
bude platit $\partial f(x) = f'(x)$ pro $x \neq 0$. Dostáváme tedy

$$\partial f(x) = \begin{cases} -1, & x < 0 \\ [-1, 1], & x = 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases}. \quad (4.4)$$

Příslušný graf $\partial f(x)$ je na obr. 4.2.



Obrázek 4.1: Graf funkce $f(x) = |x|$ s tečnami v bodě $x = 0$, které leží pod grafem této funkce.



Obrázek 4.2: Graf subdiferenciálu funkce $f(x) = |x|$.

Následující tvrzení je klíčovým pro odstranění diferenciální inkluze ze soustavy (1) - (7), na čemž je založena první numerická metoda pro řešení soustavy (1) - (7) (viz podkapitola 1.1). Toto tvrzení lze najít např. v [8].

Lemma 1. *Necht' $F : \mathbb{R}^n \rightrightarrows \mathbb{R}^n$ je maximálně monotónní mnohoznačná funkce. Potom pro každé $\lambda > 0$ zobrazení $\mathbb{R}^n \ni y \mapsto J_\lambda(y) := (I + \lambda F)^{-1}(y)$ je jednoznačné a lipschitzovsky spojitě na celém \mathbb{R}^n s konstantou 1 a zobrazení $\mathbb{R}^n \ni y \mapsto F_\lambda(y) := \frac{1}{\lambda}(I - J_\lambda)(y)$ je lipschitzovsky spojitě na celém \mathbb{R}^n s konstantou $\frac{1}{\lambda}$. Navíc, pro každé $x \in \text{dom}(F)$ platí:*

$$\begin{aligned}
 (i) \quad & F_\lambda \text{ je maximálně monotónní funkce,} \\
 (ii) \quad & F_\lambda(x) \in F(J_\lambda(x)), \\
 (iii) \quad & J_\lambda(x) \rightarrow x \text{ pro } \lambda \rightarrow 0^+, \\
 (iv) \quad & F_\lambda(x) \rightarrow m(F(x)) \text{ pro } \lambda \rightarrow 0^+, \\
 (v) \quad & \|F_\lambda(x) - m(F(x))\|^2 \leq \|m(F(x))\|^2 - \|F_\lambda(x)\|^2,
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

kde $m(F(x))$ je nejmenší (v normě) prvek množiny $F(x)$. Funkce F_λ se v literatuře označuje jako Yosidova aproximace.

4.2 Formulace úlohy a existence řešení

Necht' $F : \mathbb{R}^n \rightrightarrows \mathbb{R}^n$ je mnohoznačná funkce a $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ je daná funkce. Pro $T > 0$ uvažujme problém najít absolutně spojitou funkci $x : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^n$ takovou, že

$$\begin{cases} \dot{x}(t) \in f(t) - F(x(t)), & \text{pro skoro všechna } t \in (0, T], \\ x(0) = \bar{x} \in \mathbb{R}^n. \end{cases} \tag{4.6}$$

Následující tvrzení vychází z [7] (Theorem 1 na str. 147), [9] a [10] (Theorem 2.2).

Věta 2. *Necht' $F : \mathbb{R}^n \rightrightarrows \mathbb{R}^n$ je maximálně monotónní mnohoznačná funkce. Uvažujme funkci $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$, která je lipschitzovsky spojitá na celém intervalu $[0, T]$. Potom existuje právě jedna funkce $x(\cdot)$, která splňuje (4.6). Navíc $x(\cdot)$ je lipschitzovsky spojitá funkce na celém $[0, T]$, pro každé $t \in [0, T]$ limita*

$$\dot{x}^+(t) := \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{x(t+h) - x(t)}{h}$$

existuje a platí

$$\dot{x}^+(t) = m\left(f(t) - F(x(t))\right),$$

kde m opět značí nejmenší prvek v normě. Navíc $\dot{x}(t)$ je spojitá zprava v každém bodě $t \in [0, T]$, tedy platí

$$\lim_{s \rightarrow t^+} \dot{x}^+(s) = \dot{x}^+(t).$$

4.3 Aproximace mnohoznačného zobrazení klasickou funkcí

Pro $T > 0$ a $\lambda > 0$ uvažujme úlohu

$$\begin{cases} \dot{x}_\lambda(t) = -F_\lambda(x_\lambda(t)) + f(t) & \text{pro } t \in (0, T], \\ x_\lambda(0) = \bar{x} \in \mathbb{R}^n. \end{cases} \quad (4.7)$$

Následující tvrzení vychází z [11] (Theorem 55.A.) a [12] (Theorem 31.A.).

Lemma 3. *Pro $T > 0$ necht' $F : \mathbb{R}^n \rightrightarrows \mathbb{R}^n$ je maximálně monotónní mnohoznačná funkce a $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ je lipschitzovsky spojitá funkce na $[0, T]$ s konstantou $l > 0$. Potom existuje $C > 0$ takové, že pro každé $\lambda > 0$ platí*

$$\sup_{t \in [0, T]} \|x_\lambda(t) - x(t)\| \leq C\sqrt{\lambda}, \quad (4.8)$$

kde $x : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^n$ splňuje (4.6) a $x_\lambda : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^n$ splňuje (4.7).

4.4 Newtonova metoda pro řešení soustav rovnic

4.4.1 Klasická Newtonova metoda

Necht' je dána soustava nelineárních rovnic $G(x) = 0$, kde

$$G = (g_1(x), g_2(x), \dots, g_n(x))^T, \quad g_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

a necht' navíc

$$g_i \in C^1(\mathbb{R}^n), \quad \forall i = 1, 2, \dots, n. \quad (4.9)$$

Celý algoritmus Newtonovy metody můžeme popsat ve třech krocích.

1. Nejprve stanovíme Jacobiho matici vektorové funkce G :

$$G'(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \frac{\partial g_1}{\partial x_2} & \dots & \dots & \frac{\partial g_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial g_2}{\partial x_1} & \frac{\partial g_2}{\partial x_2} & \dots & \dots & \frac{\partial g_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g_n}{\partial x_1} & \frac{\partial g_n}{\partial x_2} & \dots & \dots & \frac{\partial g_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}. \quad (4.10)$$

2. Dále zvolme nějaký počáteční vektor $x_0 \in \mathbb{R}^n$.

3. (a) Vyřešíme lineární soustavu $G'(x_k) \cdot w_k = -G(x_k)$.

(b) Dostaneme novou aproximaci $x_{k+1} = x_k + w_k$.

Třetí krok opakujeme tak dlouho, dokud nezískáme dostatečně dobrou aproximaci řešení (např. když hodnota $\|w_k\|$ bude dostatečně malá). Je třeba zdůraznit, že počáteční vektor x_0 se volí tak, aby matice soustavy $G'(x_0)$ byla regulární. Pokud by nebyla, musí se zvolit jiný počáteční vektor x_0 .

4.4.2 Zobecnění pro nehladké funkce

Zobecněná Newtonova metoda je nástrojem pro řešení soustav rovnic v případě, kdy není splněná podmínka (4.9). Algoritmus zobecněné Newtonovy metody je v podstatě stejný jako u klasické metody, nicméně prvky zobecněné Jacobiho matice (která je analogií matice (4.10) u klasické metody) se volí jinak a tato volba závisí na tom, jak se funkce chová v okolí daného bodu. Podrobný popis je nad rámec tohoto textu a lze ho najít např. v [6]. My zde uvedeme postup při volbě hodnot zobecněné Jacobiho matice v případě, kdy máme po částech hladkou vektorovou funkci $G(x)$, což odpovídá případům v první kapitole. Pro připomenutí, numerická metoda, která pracovala s původním modelem (1.1) - (1.6), vedla na soustavu danou vztahy (1.8) - (1.12). Druhá metoda založená na aproximaci původního subdiferenciálu $\partial l(s)$ vystupujícího v (1.3) jednoznačnou funkcí $h(s)$ (tzv. Yosidova aproximace, viz (1.25)) vedla na podobnou soustavu, kde navíc vystupovala rovnice (1.27). Jedinou nehladkou funkcí vystupující v matici první metody byla funkce $F^{-1}(s)$ (viz obr. 1.4), zatímco v matici druhé metody vystupovala funkce $h(s)$ definovaná v (1.25) (viz také obr. 1.18). Z toho důvodu prvky zobecněné Jacobiho matice se většinou shodují s prvky klasické Jacobiho matice. Obě tyto funkce nemají derivaci v bodech -1 a 1 , nicméně jsou v těchto bodech lipschitzovsky spojité a existují obě jednostranné derivace. Díky tomu lze při konstrukci zobecněné Jacobiho matice za příslušné derivace těchto funkcí $F^{-1}(s)$ a $h(s)$ v bodech -1 a 1 volit libovolnou hodnotu z intervalu $[f'_-, f'_+]$, kde f'_- je hodnota derivace příslušné funkce zleva, analogicky f'_+ je hodnota derivace zprava.

Poznámka 16. Je třeba zdůraznit jednu důležitou věc. Součástí algoritmu Newtonovy metody (klasické nebo zobecněné) je volba počátečního vektoru. V první kapitole jsme zmiňovali, že pro konstrukci tohoto vektoru je lepší volit přímo hodnoty známé z předchozího časového kroku. Zásadním rozdílem mezi metodou, která pracuje se soustavou (1.8) - (1.12), a metodou pracující s Yosidovou aproximací je to, že v druhém případě hodnoty skupenství mohou ležet

i mimo interval $[-1, 1]$. Konkrétně u této metody docházelo k jevu, který přímo ilustrují obr. (1.22) a (1.23), kdy na počátku časového intervalu hodnota skupenství ledu klesne pod hodnotu -1 . Následně po nějaké době začne růst, přejde dolní mez intervalu $[-1, 1]$ a po uplynutí času přejde dokonce i horní mez $+1$ (což odpovídá okamžiku, kdy led roztaje). Následně po krátké době začne opět klesat a až do konce časového intervalu se blíží shora k hodnotě $+1$. Znamená to tedy, že při použití této metody situace, kdy kvůli nehladkosti musíme prvky zobecněné Jacobiho matice volit podle výše uvedeného postupu, nastane během celého výpočtu maximálně dvakrát. Nicméně pravděpodobnost, že v určitém časovém kroku dostaneme hodnotu skupenství rovné přesně -1 nebo $+1$, je velmi malá nezávisle na jemnosti sítě (která je dána časovým a prostorovým krokem).

Závěr

V této práci jsme navrhli několik numerických postupů pro řešení soustav parciálních diferenciálních rovnic s diferenciální inkluzí. Následně jsme tyto metody aplikovali na konkrétní model z oblasti termodynamiky, který popisuje proces rozmrazování čelního skla motorového vozidla, a ukázali jsme, že všechny tyto metody dávají velmi blízké výsledky. Při řešení jednodimenzionální verze modelu jsme také zjistili, že všechny metody jsou prvního řádu a s použitím přesnějších poměrných diferencí tyto metody dosahují až druhého řádu konvergence. Významnou výhodou modelů tohoto typu je možnost zkoumat chování různých numerických metod na jejich jednodimenzionální verzi, kde všechny výpočty jsou výrazně jednodušší. Model řešený v této práci je také dobrou ukázkou toho, jakou výhodu má implicitní Eulerova metoda oproti metodě explicitní, která vyžaduje časový krok úměrný druhé mocnině kroku prostorové diskretizace, což se zásadně projevuje na časové a paměťové náročnosti výpočtů. U implicitní metody nejsme tolik vázáni na volbu velikosti časového kroku, na druhou stranu v každé časové iteraci musíme řešit soustavu obecně nelineárních algebraických rovnic. V případě našeho modelu nevyžadujeme velkou přesnost vypočtených hodnot, zejména časových okamžiků, kdy led roztaje. Díky tomu nepotřebujeme ve výpočtech používat příliš jemnou síť, což by mohlo vést k časově a paměťově velmi náročným výpočtům (zejména ve třech dimenzích). V popsaných matematických modelech vystupují fyzikální parametry jejichž hodnoty nejsme schopni přesně stanovit. Zdůrazněme, že zatímco některé parametry vystupující v našem modelu jsou tabulkovými veličinami, hodnoty některých jiných parametrů závisí na konkrétní situaci a musí se stanovit experimentálně (v tomto textu se jednalo hlavně o parametry α_i , α , α_g a ρ). Proto by bylo vhodné do budoucna provést detailněji citlivostní analýzu vzhledem k příslušným fyzikálním parametrům. Vzhledem k tomu, že řada teoretických poznatků je založena na slabé nebo jinak zobecněné formulaci úloh podobných našemu problému, bylo by vhodné také navrhnout numerickou metodu, která z těchto formulací vychází. Následně bychom tuto metodu porovnali s metodami zmíněnými v textu (konkrétně jejich kvalitativní vlastnosti). Dále bychom srovnali získaná přibližná řešení a náročnost výpočtů.

Literatura

- [1] KREJČÍ, P.: *Controllability of phase transitions in two-phase systems (prezentace na workshopu MÚ AV ČR)*, *Mathematica*, Mathematics for Industry, Praha, 2018.
- [2] ROUBAL, T.: *Regularita zobrazení (rigorózní práce)*, FAV ZČU, 2018.
- [3] KREJČÍ, P.: *Hysteresis, convexity and dissipation in hyperbolic equations*, Mathematical Institute, Academy of Sciences of the Czech Republic.
- [4] GAVIOLI, CH., KREJČÍ, P.: *Control and controllability of PDEs with hysteresis*, Applied Mathematics & Optimization. Springer Science+Business Media, LLC, part of Springer Nature 2020.
<https://doi.org/10.1007/s00245-020-09663-6>
- [5] DONTCHEV, A., LEMPIO, F.: *Difference methods for differential inclusions (a survey)*, HAL Id: hal-01571241, 2017.
- [6] QI, L., SUN, JIE: A nonsmooth version of Newton's method. *Math. Program.* 58. 353-367. 10.1007/BF01581275, 1993.
- [7] AUBIN, J. P., CELLINA, A.: *Differential Inclusions: Set-Valued Maps and Viability Theory*. Grundlehren der mathematischen Wissenschaften. Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- [8] AUBIN, J. P., FRANKOWSKA, H.: *Set-valued analysis*. Modern Birkhäuser Classics. Reprint of the 1990 edition [MR1048347]. Birkhäuser Boston, Inc., Boston, MA, 2009.
- [9] ELLIOTT, C. M.: On the convergence of a one-step method for the numerical solution of an ordinary differential inclusion. *IMA J. Numer. Anal.*, 5(1):3-21, 1985.
- [10] MIELKE, A.: Chapter 6 - evolution of rate-independent systems. In C. Dafermos E. Feireisl, editors, *Handbook of Differential Equations: Evolutionary Equations*, volume 2 of

Handbook of Differential Equations: Evolutionary Equations, pages 461 - 559. North-Holland, 2005.

- [11] ZEIDLER E.: *Nonlinear functional analysis and its applications. I. Fixed-point theorems*, translated from the German by Peter R. Wadsack. Springer-Verlag, New York, 1986.
- [12] ZEIDLER E.: *Nonlinear functional analysis and its applications. II/B. Nonlinear monotone operators*, translated from the German by the author and Leo F. Boron. Springer-Verlag, New York, 1990.