

Západočeská univerzita v Plzni  
Fakulta aplikovaných věd  
Katedra matematiky

Bakalářská práce  
**Numerické metody pro řešení  
advektivně-difúzní rovnice**

Plzeň, 2013

Hana Horníková

---

## Čestné prohlášení

Prohlašuji, že jsem bakalářskou práci vypracovala samostatně a výhradně s použitím odborné literatury a pramenů, jejichž úplný seznam je její součástí.

V Plzni dne .....

.....  
Hana Horníková

---

## Poděkování

Ráda bych poděkovala vedoucímu práce Doc. Ing. Marku Brandnerovi, Ph.D. za odborné vedení, trpělivost, čas a vstřícný přístup při vytváření této práce.

---

## Abstrakt

Tato bakalářská práce se zabývá některými iteračními metodami pro hledání řešení stacionární difúzní a advekčně-difúzní diferenciální rovnice. Především je popsána efektivní explicitní metoda založená na převodu původní rovnice na soustavu dvou PDR hyperbolického typu. Jejimi výhodami jsou rychlá konvergence k ustálenému stavu, časový krok velikosti  $O(h)$  a výpočet tokových funkcí se stejnou přesností jako řešení. Navíc umožňuje jednotný přístup k advekci a difúzi při řešení advekčně-difúzní rovnice a lze ji zobecnit pro řešení Navierových-Stokesových rovnic. V závěru práce prezentujeme výsledky numerických experimentů, jejichž hlavním cílem bylo prověření vlastností této metody. Dále jsme testovali rozšíření metody pro řešení rovnic s proměnným difúzním koeficientem s použitím vhodného předpoodmínění.

**Klíčová slova:** difúzní rovnice, advekčně-difúzní rovnice, hyperbolický systém, distribuce reziduí, časový krok  $O(h)$

## Abstract

This bachelor thesis deals with several iterative methods for computing the steady state solution of the diffusion and advection-diffusion equation. In particular, we describe an efficient explicit method based on solving an equivalent first-order hyperbolic system instead of the original equation. Its advantages are fast convergence toward the steady state,  $O(h)$  time step and computation of the solution gradients with the same order of accuracy as the solution. Moreover, it allows a unified approach to advection and diffusion in the case of advection-diffusion equation and it can be generalized for computing the solution of Navier-Stokes equations. At the end of the thesis we present numerical results, the main purpose of which was to verify its properties. We also tested an extension of the method for solving equations with variable diffusion coefficient using suitable preconditioning.

**Keywords:** diffusion equation, advection-diffusion equation, hyperbolic system, residual distribution,  $O(h)$  time step

# Obsah

<b>Úvod</b>	<b>1</b>
<b>1 Základní pojmy</b>	<b>2</b>
1.1 Formulace problémů . . . . .	2
1.1.1 Advekční rovnice . . . . .	2
1.1.2 Difúzní rovnice . . . . .	3
1.1.3 Advekčně-difúzní rovnice . . . . .	3
1.1.4 Zákon zachování . . . . .	3
1.2 Soustava PDR hyperbolického typu . . . . .	4
<b>2 Metody pro řešení parabolických rovnic</b>	<b>5</b>
2.1 Explicitní metoda . . . . .	6
2.2 Implicitní metoda . . . . .	7
<b>3 Převod parabolických rovnic na systém prvního řádu</b>	<b>8</b>
3.1 Metoda distribuce reziduí . . . . .	8
3.2 Převod na hyperbolický systém . . . . .	9
3.2.1 Difúzní rovnice . . . . .	9
3.2.2 Advekčně-difúzní rovnice . . . . .	18
<b>4 Numerické experimenty</b>	<b>21</b>
4.1 Ověření vlastností metody . . . . .	21
4.2 Nezávislost na počáteční podmínce . . . . .	23
4.3 Proměnný difúzní koeficient . . . . .	24
<b>Závěr</b>	<b>27</b>
<b>Literatura</b>	<b>28</b>

# Úvod

Tato bakalářská práce se věnuje několika vybraným iteračním numerickým metodám pro řešení stacionární difúzní a advekčně-difúzní diferenciální rovnice v jedné prostorové dimenzi. Toto řešení lze interpretovat jako ustálené řešení příslušné evoluční rovnice. Zmíněné rovnice obvykle není vhodné řešit explicitními metodami, neboť ty v důsledku nutnosti aproximace druhé prostorové derivace umožňují časový krok pouze o velikosti  $O(h^2)$ , což je značně omezující. V této práci představujeme explicitní metodu, která umožňuje časový krok velikosti  $O(h)$ . Tato metoda navíc při řešení advekčně-difúzní rovnice nevyžaduje speciální přístup k advekčnímu a k difúznímu členu. Advekce a difúze jsou sjednoceny převedením rovnice na soustavu PDR hyperbolického typu, kterou pak můžeme řešit například metodou typu upwind. Další výhodou tohoto přístupu je možnost jeho zobecnění pro řešení Navierových-Stokesových rovnic.

V první kapitole uvedeme tvar jednotlivých rovnic. Ve druhé kapitole stručně zmíníme dvě jednoduché metody konečných diferencí pro řešení parabolických rovnic, explicitní a implicitní. Stěžejní částí práce je třetí kapitola, v níž popíšeme již zmíněnou metodu založenou na převodu difúzní či advekčně-difúzní rovnice na soustavu dvou PDR prvního řádu. Diskretizaci této soustavy provedeme metodou distribuce reziduí. Hlavním cílem práce bude prověřit vlastnosti této metody a případně navrhnout zlepšení pro dosažení co nejrychlejší konvergence k ustálenému stavu. V závěru práce uvedeme výsledky numerických experimentů realizovaných v programu MATLAB.

# Kapitola 1

## Základní pojmy

### 1.1 Formulace problémů

S difúzní a advekčně-difúzní rovnicí, jejichž řešení se tato práce věnuje, se můžeme často setkat například při popisu některých matematických modelů v hydrodynamice. V následujících odstavcích uvedeme matematický popis dvou základních fyzikálních jevů z této oblasti: advekce, difúze a jejich kombinace. Budeme uvažovat jednoduchý model tekutiny v tenké trubici, v níž je přítomna nějaká další látka s koncentrací popsanou funkcí  $u$ .

#### 1.1.1 Advekční rovnice

Advekční (nebo také transportní) rovnicí pro neznámou funkci  $u = u(x, t): \mathbf{R} \times \mathbf{R}_0^+ \rightarrow \mathbf{R}$  rozumíme parciální diferenciální rovnici

$$u_t + cu_x = 0, \tag{1.1}$$

která popisuje unášení látky o koncentraci  $u$  tekutinou proudící trubicí konstantní rychlostí  $c$ . Pokud je  $c > 0$ , jde o proudění směrem zleva doprava, pro  $c < 0$  zprava doleva.

Řešením této rovnice je funkce

$$u(x, t) = g(x - ct), \tag{1.2}$$

kde  $g$  je libovolná diferencovatelná funkce. Toto řešení se nazývá pravá, resp. levá postupná vlna a odpovídá tomu, že počáteční profil  $g(x)$  se s rostoucím časem nezměněný posouvá doprava, resp. doleva rychlostí  $c$ . Hodnota řešení tak na každé přímce s předpisem  $x - ct = k$ ,  $k \in \mathbb{R}$ , zůstává konstantní. Těmto přímkám říkáme charakteristické přímky neboli charakteristiky.

V případě, že rychlost proudění je v různých místech trubice různá, tedy závisí na  $x$ , platí dle zákona zachování

$$u_t + (c(x)u)_x = 0, \tag{1.3}$$

kde charakteristiky již nejsou přímky, ale křivky, a řešení podél nich již není konstantní. Můžeme se ale setkat i s tvarem

$$u_t + c(x)u_x = 0, \tag{1.4}$$

který není konzervativní, ale v některých případech přirozenější. Charakteristiky jsou opět křivky, ale řešení se podél nich nemění.

### 1.1.2 Difúzní rovnice

Pokud tekutina v trubici neproudí (rychlost  $c$  je nulová), koncentrace  $u(x, t)$  přítomné látky ve skutečnosti nezůstává konstantní, ale mění se s časem v důsledku difúze molekul. Molekuly se pohybují z míst s vyšší koncentrací do míst s nižší koncentrací a jejich tok je přímo úměrný gradientu koncentrace. Takovou situaci popisuje difúzní rovnice

$$u_t - au_{xx} = 0, \quad (1.5)$$

kde  $a > 0$  je difúzní koeficient. Kromě difúze v tekutině popisuje tato rovnice také například šíření tepla v tenké tyči.

### 1.1.3 Advekcčně-difúzní rovnice

Zahrneme-li do modelu vliv obou popsaných jevů, proudění i difúze, je funkce  $u$  řešením tzv. advekcčně-difúzní rovnice

$$u_t + cu_x - au_{xx} = 0. \quad (1.6)$$

### 1.1.4 Zákon zachování

Všechny uvedené rovnice vychází z tzv. bilančních zákonů neboli zákonů zachování, vyjadřujících rovnováhu mezi stavovými a tokovými veličinami a jejich změnami. Stavovou veličinou je v tomto případě koncentrace  $u$ , tokovou funkci označme  $\varphi(x, t)$ . Zvolíme libovolný pevný úsek trubice  $a \leq x \leq b$  a časový interval  $\langle t_1, t_2 \rangle$ . Podle zákona zachování je změna celkového množství dané veličiny ve sledovaném úseku  $\langle a, b \rangle$  mezi časy  $t_1$  a  $t_2$  rovna celkovému toku přes hranice intervalu  $x = a$  a  $x = b$ . Tok přes hranici považujeme za kladný, jde-li o tok zleva doprava. Zákon zapíšeme v integrálním tvaru

$$\int_a^b u(x, t_2) dx - \int_a^b u(x, t_1) dx = \int_{t_1}^{t_2} (\varphi(a, t) - \varphi(b, t)) dt. \quad (1.7)$$

Pokud má funkce  $u$  spojitou parciální derivaci vzhledem k  $t$  a tok  $\varphi$  spojitou parciální derivaci vzhledem k  $x$ , můžeme po jednoduchých úpravách vztah (1.7) zapsat ve tvaru

$$\int_{t_1}^{t_2} \int_a^b (u_t(x, t) + \varphi_x(x, t)) dx dt = 0. \quad (1.8)$$

Vzhledem k tomu, že intervaly  $\langle a, b \rangle$  a  $\langle t_1, t_2 \rangle$  byly voleny zcela libovolně, musí být integrand identicky roven nule. Dostáváme vztah

$$u_t(x, t) + \varphi_x(x, t) = 0, \quad (1.9)$$

který vyjadřuje jednorozměrný zákon zachování v diferenciálním (lokálním) tvaru. Jednotlivé rovnice pak získáme vhodnou volbou toku  $\varphi$ , který odpovídá fyzikální podstatě daného jevu. Pro advekcční rovnici je  $\varphi = cu$ , pro difúzní rovnici  $\varphi = -au_x$  a pro advekcčně-difúzní rovnici  $\varphi = cu - au_x$ .



## 1.2 Soustava PDR hyperbolického typu

Soustava parciálních diferenciálních rovnic prvního řádu

$$\mathbf{u}_t + \mathbf{A}\mathbf{u}_x = 0, \quad (1.10)$$

kde  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(x, t): \mathbf{R} \times \mathbf{R}_0^+ \rightarrow \mathbf{R}^n$  a  $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{n \times n}$ , je hyperbolického typu, pokud matice  $\mathbf{A}$  má reálná vlastní čísla a je diagonalizovatelná, tedy platí  $\mathbf{A} = \mathbf{R}\mathbf{\Lambda}\mathbf{R}^{-1}$ , kde  $\mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$  a  $\mathbf{R}$  je matice pravých vlastních vektorů.

Díky diagonalizovatelnosti matice  $\mathbf{A}$  je možné takovýto systém převést na  $n$  na sobě nezávislých advekčních rovnic, jejichž řešení je již snadné. Dosazením za  $\mathbf{A}$  v (1.10) dostaneme

$$\mathbf{u}_t + \mathbf{R}\mathbf{\Lambda}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{u}_x = 0 \quad (1.11)$$

a po vynásobení celé rovnice maticí  $\mathbf{R}^{-1}$  zleva

$$\mathbf{R}^{-1}\mathbf{u}_t + \mathbf{\Lambda}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{u}_x = 0. \quad (1.12)$$

Nyní můžeme zavést substituci  $\mathbf{w} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{u}$  a získáme soustavu  $n$  rovnic s diagonální maticí  $\mathbf{\Lambda}$

$$\mathbf{w}_t + \mathbf{\Lambda}\mathbf{w}_x = 0. \quad (1.13)$$

Po vyřešení jednotlivých rovnic pro  $\mathbf{w}$  přejdeme zpět k původním proměnným pomocí transformace  $\mathbf{u} = \mathbf{R}\mathbf{w}$ .

## Kapitola 2

# Metody pro řešení parabolických rovnic

Naším cílem je nalézt numerické řešení počátečně-okrajové úlohy pro advekčně-difúzní rovnici v ustáleném stavu. Asi nejjednodušší volbou je použití některé z metod konečných diferencí, které jsou založené na aproximaci parciálních derivací pomocí poměrných diferencí. Při řešení takových úloh pro rovnice parabolického typu těmito metodami postupujeme jako při řešení počáteční úlohy v proměnné  $t$ , tedy počítáme hodnoty přibližného řešení postupně po jednotlivých časových vrstvách. V případě výpočtu ustáleného řešení zastavíme výpočet ve chvíli, kdy se od sebe dvě po sobě jdoucí přibližná řešení liší méně, než je nějaká zadaná tolerance.

Tyto metody lze bez podstatných rozdílů aplikovat na obecnou parabolickou rovnici, popíšeme si je tedy na nejjednodušší z nich.

Uvažujme počátečně-okrajovou úlohu pro nehomogenní difúzní rovnici v jedné prostorové proměnné

$$\begin{aligned} u_t - au_{xx} &= f(x), & x \in (0, L), & & t \geq 0, & & a > 0, \\ u(x, 0) &= \tilde{u}(x), & x \in \langle 0, L \rangle, & & & & \\ u(0, t) &= u_0(t), & u(L, t) &= u_L(t), & t \geq 0, & & \end{aligned} \quad (2.1)$$

která popisuje difúzi v tenké trubici délky  $L$ , na jejíchž koncích jsou udržovány hodnoty koncentrace  $u$  dané funkcemi  $u_0(t)$  a  $u_L(t)$ , s počátečním rozložením koncentrace  $\tilde{u}(x)$  a hustotou rozložení zdrojů  $f(x)$ . Předpokládejme, že funkce  $\tilde{u}(x)$ ,  $u_0(t)$  a  $u_L(t)$  splňují podmínky kompatibility

$$\tilde{u}(0) = u_0(0), \quad \tilde{u}(L) = u_L(0) \quad (2.2)$$

a že úloha (2.1) má právě jedno klasické řešení.

Na intervalu  $\langle 0, L \rangle$  zvolíme rovnoměrnou síť uzlů  $x_j, j = 0, 1, \dots, J$ , s krokem  $h > 0$  a pro  $t \geq 0$  síť uzlů  $t_n, n = 0, 1, \dots$ , s pevným krokem  $\tau > 0$ . Hodnotu přesného řešení v uzlu  $(x_j, t_n)$  označíme zkráceně  $u_j^n$  a její aproximaci  $U_j^n$ . Na nulté časové vrstvě položíme  $U_j^0 = \tilde{u}(x_j)$  pro  $j = 0, 1, \dots, J$  a pro splnění okrajových podmínek klademe vždy  $U_0^{n+1} = u_0(t_{n+1})$  a  $U_J^{n+1} = u_L(t_{n+1})$ .

## 2.1 Explicitní metoda

Nejjednodušší diferenční metodou, kterou můžeme použít, je explicitní Eulerova metoda, kde první derivaci podle časové proměnné aproximujeme jednostrannou poměrnou diferencí

$$u_t(x_j, t_n) \approx \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau}. \quad (2.3)$$

Druhou derivaci podle prostorové proměnné nahradíme druhou poměrnou diferencí

$$u_{xx}(x_j, t_n) \approx \frac{u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n}{h^2}. \quad (2.4)$$

Tímto způsobem získáme z původní difúzní rovnice diferenční rovnici

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\tau} - a \frac{U_{j-1}^n - 2U_j^n + U_{j+1}^n}{h^2} = f_j, \quad j = 1, 2, \dots, J-1, \quad (2.5)$$

kde  $f_j = f(x_j)$ . Ta aproximuje původní diferenciální rovnici s diskretizační chybou velikosti  $O(\tau + h^2)$ , metoda je tedy prvního řádu v proměnné  $t$  a druhého řádu v proměnné  $x$ . Jednoduchými úpravami (2.5) dostáváme explicitní formuli pro výpočet přibližného řešení na nové časové vrstvě  $t_{n+1}$

$$U_j^{n+1} = rU_{j-1}^n + (1 - 2r)U_j^n + rU_{j+1}^n + \tau f_j \quad (2.6)$$

pro  $j = 1, \dots, J-1$ , kde jsme označili  $r = \frac{a\tau}{h^2}$ .

Doplníme-li schéma o okrajové podmínky  $U_0^n = u_0(t_n)$  a  $U_J^n = u_L(t_n)$ , můžeme je celé zapsat maticově jako

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} U_1^{n+1} \\ U_2^{n+1} \\ \vdots \\ U_{J-2}^{n+1} \\ U_{J-1}^{n+1} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1-2r & r & 0 & \cdots & 0 \\ r & 1-2r & r & \cdots & 0 \\ \ddots & \ddots & \ddots & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & r & 1-2r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1^n \\ U_2^n \\ \vdots \\ U_{J-2}^n \\ U_{J-1}^n \end{bmatrix} + \\ &+ \begin{bmatrix} ru_0(t_n) + \tau f_1 \\ \tau f_2 \\ \vdots \\ \tau f_{J-2} \\ ru_L(t_n) + \tau f_{J-1} \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

zkráceně

$$\mathbf{U}^{(n+1)} = \mathbf{H}\mathbf{U}^{(n)} + \mathbf{F}^{(n)}. \quad (2.8)$$

Nevýhodami této metody jsou nízký řád přesnosti v  $t$  a její podmíněná stabilita, která je nevýhodou explicitních metod obecně. Podmínkou stability metody je

$$0 < r \leq \frac{1}{2}, \quad (2.9)$$

z čehož plyne omezení délky časového kroku vztahem

$$0 < \tau \leq \frac{h^2}{2a}. \quad (2.10)$$

Vidíme tedy, že délka časového kroku je v tomto případě  $O(h^2)$ , což je značně omezující, zejména při výpočtu na velkých časových intervalech. S touto vlastností se setkáme u řady explicitních metod pro parabolické rovnice.

## 2.2 Implicitní metoda

Omezení délky časového kroku (2.10) u explicitní metody lze odstranit například zavedením implicitní metody. Postup jejího odvození je analogický jako u explicitní metody s tím rozdílem, že druhou prostorovou derivaci aproximujeme na časové vrstvě  $t_{n+1}$ . Získáme tak diferenční schéma

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\tau} - a \frac{U_{j-1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j+1}^{n+1}}{h^2} = f_j, \quad j = 1, 2, \dots, J-1, \quad (2.11)$$

jehož diskretizační chyba je opět velikosti  $O(\tau + h^2)$ . Jednoduchou úpravou (2.11) dostaneme implicitní vztah pro výpočet řešení na nové časové vrstvě

$$-rU_{j-1}^{n+1} + (1 + 2r)U_j^{n+1} - rU_{j+1}^{n+1} = U_j^n + \tau f_j \quad (2.12)$$

pro  $j = 1, \dots, J-1$ , jsme opět označili  $r = \frac{a\tau}{h^2}$ .

S použitím okrajových podmínek  $U_0^{n+1} = u_0(t_{n+1})$  a  $U_J^{n+1} = u_L(t_{n+1})$  lze soustavu opět zapsat maticově

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} 1+2r & -r & 0 & \cdots & 0 \\ -r & 1+2r & -r & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & -r & 1+2r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1^{n+1} \\ U_2^{n+1} \\ \vdots \\ U_{J-2}^{n+1} \\ U_{J-1}^{n+1} \end{bmatrix} = \\ & = \begin{bmatrix} U_1^n \\ U_2^n \\ \vdots \\ U_{J-2}^n \\ U_{J-1}^n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} ru_0(t_{n+1}) + \tau f_1 \\ \tau f_2 \\ \vdots \\ \tau f_{J-2} \\ ru_L(t_{n+1}) + \tau f_{J-1} \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

zkráceně

$$\mathbf{H}\mathbf{U}^{(n+1)} = \mathbf{U}^{(n)} + \mathbf{F}^{(n)}. \quad (2.14)$$

V každém kroku této metody musíme tedy řešit soustavu lineárních algebraických rovnic pro neznámé  $U_1^{n+1}, \dots, U_{J-1}^{n+1}$ , která je jednoznačně řešitelná, neboť matice  $\mathbf{H}$  je ostře diagonálně dominantní. Výpočet se tím však poněkud komplikuje.

Implicitní metoda je stabilní bez ohledu na volbu parametru  $r$ , délky kroků  $h$  a  $\tau$  můžeme tedy volit nezávisle na sobě. Více o explicitní a implicitní metodě lze nalézt například v [5].

Pro řešení parabolických rovnic existuje kromě dvou výše popsaných samozřejmě ještě řada dalších metod, z nichž některé můžeme také najít v [5].

## Kapitola 3

# Převod parabolických rovnic na systém prvního řádu

V této kapitole popíšeme explicitní metodu pro výpočet řešení stacionární difúzní a advekčně-difúzní rovnice, jejíž hlavní výhodou je, že na rozdíl od řady explicitních metod pro parabolické rovnice umožňuje časový krok délky  $O(h)$  namísto  $O(h^2)$  a zaručuje tak rychlejší konvergenci k ustálenému stavu.

Je založena na převodu difúzní, resp. advekčně-difúzní rovnice, která je 2. řádu, na hyperbolický systém rovnic 1. řádu zavedením tokových funkcí jako nových neznámých. To přináší další velkou výhodu, kterou je výpočet tokových funkcí se stejnou přesností jako řešení samotného.

Metoda bude odvozena na základě diskretizace pomocí metody distribuce reziduí. Uved'eme si nejprve obecně tuto metodu.

### 3.1 Metoda distribuce reziduí

Uvažujme zákon zachování v jedné prostorové dimenzi

$$u_t + \varphi_x = f, \quad (3.1)$$

pro který nás zajímá řešení v ustáleném stavu. Na intervalu, na němž hledáme řešení, zvolíme síť uzlů  $x_j, j = 0, 1, \dots, J$ , které mohou být v intervalu libovolně rozloženy. Tyto uzly dělí daný interval na  $J - 1$  podintervalů  $(x_j, x_{j+1}), j = 0, 1, \dots, J - 1$ . Řešení uvažujeme na jednotlivých podintervalech lineární.

Prvním krokem metody distribuce reziduí je výpočet rezidua  $\phi_{j+1/2}$  pro každý podinterval  $(x_j, x_{j+1})$ . Jeho hodnota je rovna integrálu ze stacionární části rovnice

$$\phi_{j+1/2} = - \int_{x_j}^{x_{j+1}} (\varphi_x - f) dx \approx -(\varphi_{j+1} - \varphi_j) + \frac{f_{j+1} + f_j}{2}(x_{j+1} - x_j), \quad (3.2)$$

kde pro výpočet integrálu ze zdrojového členu bylo použito lichoběžníkové pravidlo. Hodnota rezidua vyjadřuje chybu, s jakou je v daném podintervalu splněna stacionární rovnice. Pokud je tato chyba nenulová, musíme změnit hodnoty řešení v uzlech tak, abychom ji zmenšili.

V této chvíli přichází na řadu druhý krok metody – distribuce. Reziduum  $\phi_{j+1/2}$  rozdělíme na dvě části  $\phi_{j+1/2}^-$  a  $\phi_{j+1/2}^+$ , které budou přidány do uzlů  $x_j$  a  $x_{j+1}$ , v poměru daném

### 3.2. PŘEVOD NA HYPERBOLICKÝ SYSTÉM

---

koeficienty  $\beta_{j+1/2}^-$  a  $\beta_{j+1/2}^+$

$$\phi_{j+1/2}^- = \beta_{j+1/2}^- \phi_{j+1/2}, \quad \phi_{j+1/2}^+ = \beta_{j+1/2}^+ \phi_{j+1/2}, \quad (3.3)$$

kde pro koeficienty platí

$$\beta_{j+1/2}^- + \beta_{j+1/2}^+ = 1. \quad (3.4)$$

Pro uzel  $x_j$  pak dostaneme semidiskrétní rovnici

$$\frac{du_j}{dt} = \frac{1}{h_j} (\phi_{j-1/2}^+ + \phi_{j+1/2}^-) = \frac{1}{h_j} (\beta_{j-1/2}^+ \phi_{j-1/2} + \beta_{j+1/2}^- \phi_{j+1/2}), \quad (3.5)$$

kde  $h_j = (x_{j+1} - x_{j-1})/2$ . Tuto rovnici integrujeme, dokud nedosáhneme ustáleného stavu.

Klíčovou roli hraje samozřejmě volba koeficientů  $\beta_{j+1/2}^-$  a  $\beta_{j+1/2}^+$ , která je závislá na metodě a souvisí s fyzikálními vlastnostmi daného modelu.

## 3.2 Převod na hyperbolický systém

Nyní popíšeme samotnou metodu, jejíž odvození a analýzu lze nalézt v [3] a [4]. Soustředíme se nejprve opět pouze na difúzní rovnici.

### 3.2.1 Difúzní rovnice

Uvažujeme stále úlohu (2.1) pro difúzní rovnici v jedné prostorové proměnné. Pro ustálený stav ( $u_t = 0$ ) platí

$$-au_{xx} = f. \quad (3.6)$$

Zavedeme-li novou funkci  $p$  jako

$$p(x, t) = u_x(x, t), \quad (3.7)$$

dostaneme soustavu rovnic pro  $u$  a  $p$

$$\begin{aligned} -ap_x &= f, \\ u_x &= p. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Jde o tzv. smíšenou formulaci úlohy. Druhou rovnici vynásobíme výrazem  $-1/T_r$ , kde  $T_r > 0$  je parametr zvaný relaxační čas, a na levou stranu obou rovnic formálně přidáme časové derivace  $u_t$ , resp.  $p_t$

$$\begin{aligned} u_t - ap_x &= f, \\ p_t - \frac{1}{T_r} u_x &= -\frac{p}{T_r}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Systém (3.9) je asymptoticky ekvivalentní s difúzní rovnicí pro  $T_r \rightarrow 0$  a v ustáleném stavu, kdy  $u_t = p_t = 0$ , je s ní ekvivalentní dokonce pro libovolné  $T_r$ .

Soustavu můžeme zapsat v maticovém tvaru

$$\mathbf{q}_t + \mathbf{A}\mathbf{q}_x = \mathbf{g}, \quad (3.10)$$

kde

$$\mathbf{q} = \begin{bmatrix} u \\ p \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & -a \\ -\frac{1}{T_r} & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{g} = \begin{bmatrix} f \\ -\frac{p}{T_r} \end{bmatrix}. \quad (3.11)$$

### 3.2. PŘEVOD NA HYPERBOLICKÝ SYSTÉM

Vlastní čísla matice  $\mathbf{A}$  ( $\lambda_{1,2} = \pm\sqrt{a/T_r}$ ) jsou reálná a různá, systém (3.9) je tedy hyperbolický a místo difúzní rovnice jsme získali systém advekčních rovnic, popisujících dvojici vln šířících se stejnou rychlostí opačným směrem. Matice  $\mathbf{A}$  je diagonalizovatelná, tedy platí  $\mathbf{A} = \mathbf{R}\mathbf{\Lambda}\mathbf{R}^{-1}$ , kde

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} -L_r & L_r \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} \sqrt{a/T_r} & 0 \\ 0 & -\sqrt{a/T_r} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{R}^{-1} = \begin{bmatrix} -1/2L_r & 1/2 \\ 1/2L_r & 1/2 \end{bmatrix}. \quad (3.12)$$

Poznamenejme, že v případě nulových zdrojů  $f$  nezávisí ustálené řešení na hodnotě koeficientu  $a$ , ale časový průběh přibližného řešení ano. Numericky můžeme tuto závislost odstranit vhodnou volbou časového kroku. U schémat pro řešení difúzní rovnice (například u schémat z kapitoly 2) stačí volit  $\tau \sim \frac{1}{a}$ . V tomto případě dosáhneme nezávislosti na  $a$ , pokud celá pravá strana systému

$$\begin{aligned} u_t &= ap_x, \\ p_t &= (u_x - p)/T_r. \end{aligned} \quad (3.13)$$

bude úměrná  $a$ . To zajistíme volbou  $T_r \sim \frac{1}{a}$ , konkrétně

$$T_r = \frac{L_r^2}{a}, \quad (3.14)$$

kde  $L_r$  je délkový parametr.

#### Diskretizace

Diskretizaci provedeme metodou distribuce reziduí popsanou výše. Pro jednoduchost budeme uvažovat ekvidistantní síť uzlů s krokem  $h = x_{j+1} - x_j$  pro  $j = 0, \dots, J-1$ . Hodnoty přesných řešení  $u$  a  $p$  v uzlu  $x_j$  označíme zkráceně  $\mathbf{q}_j = [u_j, p_j]^T$  a jejich aproximace  $\mathbf{Q}_j = [U_j, P_j]^T$ . Analogické značení zavedeme i pro pravou stranu  $\mathbf{g}$ . V každém uzlu uchováváme hodnoty  $\mathbf{Q}_j, j = 0, 1, \dots, J$ , přičemž máme k dispozici dvě okrajové podmínky pro  $u$ . Naším cílem je tedy vypočítat aproximaci ustáleného řešení  $\{U_j\}$  ve všech vnitřních uzlech sítě a  $\{P_j\}$  ve všech uzlech. Počet neznámých je stejný jako počet reziduí, což znamená, že všechna rezidua mohou být v ustáleném stavu beze zbytku vynulována. Z toho vyplývá existence jednoznačného řešení.

Hodnota rezidua pro podinterval  $(x_j, x_{j+1})$  je

$$\Phi_{j+1/2} = \int_{x_j}^{x_{j+1}} (-\mathbf{A}\mathbf{q}_x + \mathbf{g}) dx, \quad (3.15)$$

což můžeme aproximovat jako

$$\Phi_{j+1/2} \approx -\mathbf{A}(\mathbf{Q}_{j+1} - \mathbf{Q}_j) + \frac{\mathbf{G}_{j+1} + \mathbf{G}_j}{2} h. \quad (3.16)$$

Poté určíme koeficienty distribuce, matice  $\mathcal{B}_{j+1/2}^-$  a  $\mathcal{B}_{j+1/2}^+$ , a rozdělíme reziduum do uzlů  $x_j$  a  $x_{j+1}$  následujícím způsobem

$$\Phi_{j+1/2}^- = \mathcal{B}_{j+1/2}^- \Phi_{j+1/2}, \quad \Phi_{j+1/2}^+ = \mathcal{B}_{j+1/2}^+ \Phi_{j+1/2}, \quad (3.17)$$

přičemž platí

$$\mathcal{B}_{j+1/2}^- + \mathcal{B}_{j+1/2}^+ = \mathbf{I}, \quad \mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.18)$$

### 3.2. PŘEVOD NA HYPERBOLICKÝ SYSTÉM

Toto provedeme pro všechny podintervaly a získáme semidiskrétní formuli

$$\frac{d\mathbf{Q}_j}{dt} = \frac{1}{h}(\Phi_{j-1/2}^+ + \Phi_{j+1/2}^-) = \frac{1}{h}(\mathcal{B}_{j-1/2}^+ \Phi_{j-1/2} + \mathcal{B}_{j+1/2}^- \Phi_{j+1/2}), \quad (3.19)$$

kterou integrujeme, dokud nedosáhneme ustáleného stavu. Schéma můžeme snadno použít i pro neuniformní síť, stačí jen místo  $h$  použít  $h_j$  definované jako  $h_j = (x_{j+1} - x_{j-1})/2$ .

Nyní určíme konkrétní tvar distribučních matic  $\mathcal{B}_{j+1/2}^-$  a  $\mathcal{B}_{j+1/2}^+$ . Jak již bylo řečeno výše, tyto matice musí odrážet fyzikální vlastnosti modelu, který námi řešená rovnice popisuje. V našem případě se jedná o hyperbolický systém popisující dvě vlny šířící se stejnou rychlostí opačným směrem, bude tedy vhodné využít upwinding.

Distribuční matice lze volit například takto (viz [3])

$$\mathcal{B}_j^C = \frac{1}{2}\mathbf{I} - \frac{\bar{\tau}}{2h}\mathbf{A}, \quad \mathcal{B}_{j+1}^C = \frac{1}{2}\mathbf{I} + \frac{\bar{\tau}}{2h}\mathbf{A}, \quad (3.20)$$

kde časový krok  $\tau$  nahradil časový parametr  $\bar{\tau}$ , který nemusí být roven skutečnému časovému kroku, neboť přesný časový vývoj řešení hyperbolického systému nás nezajímá. Nejjednodušší volbou parametru  $\bar{\tau}$  je

$$\bar{\tau} = \frac{h}{\sqrt{a/T_r}}, \quad (3.21)$$

což vychází z CFL podmínky stability pro advekční rovnici s rychlostí  $\sqrt{a/T_r}$ . Dosadíme-li (3.21) do (3.20) a využijeme-li faktu, že matice  $\mathbf{A}$  je diagonalizovatelná, získáme distribuční matice ve tvaru

$$\mathcal{B}_{j+1/2}^- = \frac{1}{2}\mathbf{I} - \frac{1}{2\sqrt{a/T_r}}\mathbf{R} \begin{bmatrix} \sqrt{a/T_r} & 0 \\ 0 & -\sqrt{a/T_r} \end{bmatrix} \mathbf{R}^{-1} = \mathbf{R} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{R}^{-1}, \quad (3.22)$$

$$\mathcal{B}_{j+1/2}^+ = \frac{1}{2}\mathbf{I} + \frac{1}{2\sqrt{a/T_r}}\mathbf{R} \begin{bmatrix} \sqrt{a/T_r} & 0 \\ 0 & -\sqrt{a/T_r} \end{bmatrix} \mathbf{R}^{-1} = \mathbf{R} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{R}^{-1}. \quad (3.23)$$

Všimněme si, že část řešení se zápornou rychlostí je přenesena doleva a část s kladnou rychlostí doprava.

Použijeme-li nyní aproximaci časové derivace pomocí jednostranné diference

$$\frac{d\mathbf{Q}_j}{dt} \approx \frac{\mathbf{Q}_j^{n+1} - \mathbf{Q}_j^n}{\tau}, \quad (3.24)$$

získáme explicitní schéma pro výpočet hodnot  $\mathbf{Q}_j, j = 1, \dots, J-1$ , na nové časové vrstvě

$$\mathbf{Q}_j^{n+1} = \mathbf{Q}_j^n + \frac{\tau}{h}(\mathcal{B}_{j-1/2}^+ \Phi_{j-1/2} + \mathcal{B}_{j+1/2}^- \Phi_{j+1/2}). \quad (3.25)$$

Pokud dále definujeme matice

$$\mathbf{A}^+ = \mathbf{R} \begin{bmatrix} \sqrt{a/T_r} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{R}^{-1}, \quad \mathbf{A}^- = \mathbf{R} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{a/T_r} \end{bmatrix} \mathbf{R}^{-1}, \quad (3.26)$$

pro které platí  $\mathbf{A}^+ = \mathcal{B}_{j+1/2}^+ \mathbf{A}$ ,  $\mathbf{A}^- = \mathcal{B}_{j+1/2}^- \mathbf{A}$ , a dosadíme do (3.25) konkrétní tvar reziduí  $\Phi_{j-1/2}$  a  $\Phi_{j+1/2}$ , můžeme psát

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_j^{n+1} &= \mathbf{Q}_j^n - \frac{\tau}{h}\mathbf{A}^+(\mathbf{Q}_j^n - \mathbf{Q}_{j-1}^n) - \frac{\tau}{h}\mathbf{A}^-(\mathbf{Q}_{j+1}^n - \mathbf{Q}_j^n) + \\ &+ \tau\mathcal{B}_{j+1/2}^+ \frac{\mathbf{G}_{j-1} + \mathbf{G}_j}{2} + \tau\mathcal{B}_{j+1/2}^- \frac{\mathbf{G}_j + \mathbf{G}_{j+1}}{2}, \end{aligned} \quad (3.27)$$



### 3.2. PŘEVOD NA HYPERBOLICKÝ SYSTÉM

což ve skutečnosti není nic jiného než metoda typu upwind prvního řádu pro hyperbolický systém (3.9). Poznamenejme, že v ustáleném stavu, kdy  $\mathbf{Q}_j^{n+1} = \mathbf{Q}_j^n$  řešení nezávisí na velikosti časového kroku  $\tau$ .

V ustáleném stavu toto schéma odpovídá metodě zvané „box-scheme“, o které víme, že je druhého řádu (více o této metodě nalezneme například v [7]).

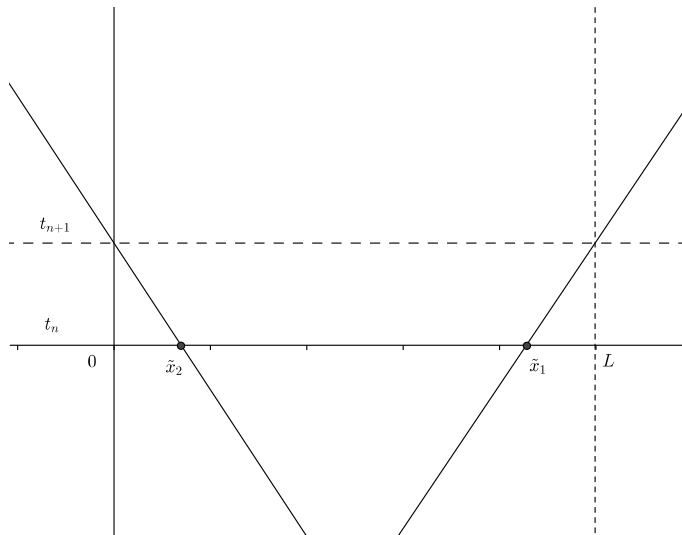
#### Okrajové podmínky

V případě úlohy (2.1) s Dirichletovými okrajovými podmínkami máme v krajních uzlech  $x_0$  a  $x_J$  definovány okrajové podmínky pro  $u$  a je třeba stanovit hodnoty  $p$  v těchto bodech. Využijeme toho, že systém je hyperbolický se dvěma vlnami šířícími se po charakteristikách doleva a doprava a oběma krajními uzly prochází vždy jedna charakteristika. S využitím diagonalizovatelnosti matice  $\mathbf{A}$  převedeme systém (3.10) na systém

$$\mathbf{W}_t + \mathbf{\Lambda}\mathbf{W}_x = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{F}, \quad \text{kde} \quad \mathbf{W} = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix} \quad (3.28)$$

a  $\mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\sqrt{a/T_r}, -\sqrt{a/T_r})$ . Systém (3.28) je tedy dvojicí nezávislých nehomogenních advekčních rovnic pro proměnné  $w_1$  a  $w_2$ , kde  $w_1$  se šíří rychlostí  $\sqrt{a/T_r}$  doprava a  $w_2$  stejnou rychlostí doleva, přičemž nezůstávají konstantní.

Hodnotu  $p$  v bodě  $x_0$ , resp.  $x_L$ , určíme pomocí hodnot  $w_1$  a  $w_2$  na předchozí časové vrstvě v bodě  $\tilde{x}_2$ , resp.  $\tilde{x}_1$ , kde se se s ní charakteristika protne, jak je naznačeno na obrázku (3.1). Přibližné hodnoty  $w_1$  a  $w_2$  v těchto průsečících určíme lineární interpolací hodnot v sousedních



Obrázek 3.1: Charakteristiky procházející krajními uzly v časové vrstvě  $t_{n+1}$ .

uzlech. Jejich nové hodnoty v krajních uzlech vypočteme jedním krokem Eulerovy metody. Hodnotu  $p$  pak získáme pomocí zpětné transformace  $\mathbf{Q} = \mathbf{R}\mathbf{W}$ .

Analogicky bychom postupovali v případě Neumannových okrajových podmínek, kdy bychom měli v bodech  $x_0$  a  $x_J$  definovány hodnoty  $p$ .

### Časový krok délky $O(h)$

Jak již bylo zmíněno, schéma (3.19) s volbou distribučních matic (3.22) a (3.23) není nic jiného než metoda typu upwind, pro niž je z literatury známa CFL podmínka

$$\max_i |\lambda_i| \frac{\tau}{h} \leq 1, \quad (3.29)$$

kde  $\lambda_i$  jsou vlastní čísla matice  $\mathbf{A}$ . V našem případě platí

$$\tau \leq h \sqrt{\frac{T_r}{a}} = \frac{hL_r}{a}. \quad (3.30)$$

Časový krok je tedy úměrný  $h$  namísto obvyklého  $h^2$ , což je velká výhoda oproti schémátům tradičně používaným pro parabolické rovnice. Je ovšem důležité si uvědomit, že to platí pouze pokud  $L_r = O(1)$ . Poznamenejme také, že tato vlastnost vyplývá z charakteru hyperbolického systému a není tedy speciální vlastností diskretizace metodou distribuce reziduí. Toto omezení časového kroku bychom získali i pro diskretizaci metodou konečných diferencí či konečných objemů. Časový krok velikosti  $O(h)$  zároveň napovídá, že počet kroků v čase potřebný k dosažení ustáleného stavu bude růst lineárně se zmenšujícím se krokem  $h$ . To se pokusíme ukázat později.

Z Fourierovy analýzy vyplývá (viz [3]), že pro  $\bar{\tau} = \frac{h}{\sqrt{a/T_r}}$  je požadavek  $L_r = O(1)$  splněn pro

$$L_r \geq \frac{h}{4} \left( 1 + \frac{1}{\sin \frac{\pi h}{2}} \right) \quad (3.31)$$

a optimální hodnota  $L_r$  je dána

$$L_r = \frac{h}{4} \left( 1 + \frac{1}{\sin \frac{\pi h}{2}} \right). \quad (3.32)$$

Můžeme také použít jednodušší aproximaci

$$L_r = \frac{1}{6} + \frac{h}{4}, \quad (3.33)$$

která splňuje (3.31) pro  $h < \frac{1}{3}$ .

### Diskretizační chyba

V následujícím odstavci uvedeme odvození diskretizační chyby, potažmo řádu metody, jak jej můžeme najít v [3]. Pro tuto chvíli budeme uvažovat nulovou pravou stranu difúzní rovnice  $f = 0$ . Pokud bychom navíc uvažovali  $\mathbf{q}$  po částech lineární, pro přesnou hodnotu rezidua by platilo

$$\Phi_{j+1/2} = -\mathbf{A}(\mathbf{q}_{j+1} - \mathbf{q}_j) + \frac{\mathbf{g}_{j+1} + \mathbf{g}_j}{2} h. \quad (3.34)$$

Dosadíme-li tento tvar reziduí a tvar distribučních matic z (3.20) do (3.19), dostaneme

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{q}_j}{dt} &= \frac{1}{h} \left[ \left( \frac{1}{2}\mathbf{I} + \frac{\bar{\tau}}{2h}\mathbf{A} \right) \left( -\mathbf{A}(\mathbf{q}_j - \mathbf{q}_{j-1}) + \frac{h}{2}(\mathbf{g}_j + \mathbf{g}_{j-1}) \right) + \right. \\ &\quad \left. \left( \frac{1}{2}\mathbf{I} - \frac{\bar{\tau}}{2h}\mathbf{A} \right) \left( -\mathbf{A}(\mathbf{q}_{j+1} - \mathbf{q}_j) + \frac{h}{2}(\mathbf{g}_{j+1} + \mathbf{g}_j) \right) \right], \end{aligned} \quad (3.35)$$

### 3.2. PŘEVOD NA HYPERBOLICKÝ SYSTÉM

kde v tomto případě  $\mathbf{g}_j = [0, -p_j/T_r]^T$ . Po roznásobení a několika úpravách získáme

$$\frac{du_j}{dt} = \frac{\bar{\tau}a}{2h^2T_r}(u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}) + \left(\frac{a}{2h} - \frac{\bar{\tau}a}{4hT_r}\right)(p_{j+1} - p_{j-1}) \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned} \frac{dp_j}{dt} &= \frac{1}{2hT_r}(u_{j+1} - u_{j-1}) + \frac{\bar{\tau}a}{2h^2T_r}(p_{j-1} - 2p_j + p_{j+1}) - \\ &\quad - \frac{1}{4T_r}(p_{j+1} + 2p_j + p_{j-1}). \end{aligned} \quad (3.37)$$

Nyní využijeme Taylorova rozvoje funkcí  $u$  a  $p$  v okolí bodu  $x_j$  a můžeme psát

$$\frac{du_j}{dt} = ap_x + \frac{\bar{\tau}a}{2T_r}(u_x - p)_x + O(h^2), \quad (3.38)$$

$$\frac{dp_j}{dt} = (u_x - p)/T_r + \frac{\bar{\tau}a}{2T_r}(p_x)_x + O(h^2) \quad (3.39)$$

nebo též maticově

$$\frac{d\mathbf{q}_j}{dt} = \left[\mathbf{I} - \frac{\bar{\tau}}{2}\mathbf{A}\partial_x\right]\mathbf{r} + O(h^2), \quad (3.40)$$

kde

$$\mathbf{r} = [ap_x, (u_x - p)/T_r]^T \quad (3.41)$$

je vektor rezidua. Vzhledem k tomu, že tento vektor se v ustáleném stavu vynuluje, získáváme přesnost druhého řádu.

Diskretizační chybu můžeme analyzovat také jiným způsobem. Předpokládejme, že hladká řešení  $u$  a  $p$  jsou přesnými řešeními diskrétních rovnic v ustáleném stavu, tedy  $\frac{du_j}{dt} = \frac{dp_j}{dt} = 0$ . Potom splňují následující

$$0 = ap_x + \frac{\bar{\tau}a}{2T_r}(u_x - p)_x + O(h^2), \quad (3.42)$$

$$0 = (u_x - p)/T_r + \frac{\bar{\tau}a}{2T_r}(p_x)_x + O(h^2). \quad (3.43)$$

Pro naši volbu  $\bar{\tau} = \frac{h}{\sqrt{a/T_r}} = \frac{hL_r}{a}$  dostaneme

$$0 = ap_x + \frac{ah}{2L_r}(u_x - p)_x + O(h^2), \quad (3.44)$$

$$0 = \frac{a}{L_r^2}(u_x - p) + \frac{ah}{2L_r}(p_x)_x + O(h^2), \quad (3.45)$$

odkud je pro  $L_r = O(1)$  zřejmé, že numerické řešení konverguje k řešení soustavy

$$\begin{aligned} ap_x &= 0, \\ \frac{1}{L_r}u_x &= \frac{p}{T_r} \end{aligned} \quad (3.46)$$

pro  $h \rightarrow 0$ . Vyjádřením  $p_x$  z (3.44) a dosazením do (3.45) a vyjádřením  $(u_x - p)$  z (3.45) a dosazením do (3.44) získáme

$$0 = ap_x - \frac{ah^2}{4}(p_x)_x + O(h^2), \quad (3.47)$$

$$0 = (u_x - p) - \frac{h^2}{4}(u_x - p)_x + O(h^2), \quad (3.48)$$

### 3.2. PŘEVOD NA HYPERBOLICKÝ SYSTÉM

z čehož je vidět, že přibližné řešení je aproximací druhého řádu.

Při použití některých přístupů pro smíšenou formulaci (3.8) ovšem nedostaneme stejný řád přesnosti pro obě neznámé funkce  $u, p$ . Například při použití metody konečných prvků je v důsledku nutnosti splnění tzv. LBB podmínky jedna část řešení stanovena s přesností nižšího řádu. Není-li LBB podmínka splněna, matice soustavy získané z metody konečných prvků je singularní. Provedeme-li však její regularizaci, můžeme dosáhnout výsledku s přesností stejného řádu pro obě části řešení. Právě taková regularizace je obsažena v metodě popsané v této kapitole.

#### Počet kroků

Pokusme se nyní odvodit závislost počtu kroků v čase potřebného k dosažení ustáleného stavu na velikosti  $h$ . Začneme úvahou uvedenou v [1]. Předpokládejme, že máme nějakou iterační metodu zapsanou ve tvaru

$$\mathbf{U}^{(n)} = \mathbf{H}\mathbf{U}^{(n-1)} + \mathbf{F}, \quad (3.49)$$

kde  $\mathbf{U}^{(n)} = [U_1^n, \dots, U_m^n]$  je vektor přibližného řešení na  $n$ -té časové vrstvě a  $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ . Pro přesné řešení  $\mathbf{U}^*$  musí platit

$$\mathbf{U}^* = \mathbf{H}\mathbf{U}^* + \mathbf{F}. \quad (3.50)$$

Odečteme-li (3.50) od (3.49), získáme rekurentní vztah pro chybu na  $n$ -té časové vrstvě

$$\mathbf{E}^{(n)} = \mathbf{H}\mathbf{E}^{(n-1)}, \quad (3.51)$$

z čehož plyne

$$\mathbf{E}^{(n)} = \mathbf{H}^n \mathbf{E}^{(0)}. \quad (3.52)$$

Matici  $\mathbf{H}$  můžeme rozložit na součin  $\mathbf{H} = \mathbf{T}\mathbf{J}\mathbf{T}^{-1}$ , kde  $\mathbf{J}$  je Jordanův kanonický tvar matice  $\mathbf{H}$  a  $\mathbf{T}$  je regulární matice. Pro spektrální normu chyby  $\mathbf{E}^{(n)}$  platí

$$\|\mathbf{E}^{(n)}\|_2 \leq \|\mathbf{H}^n\|_2 \|\mathbf{E}^{(0)}\|_2 \leq \|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{J}^n\|_2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2 \|\mathbf{E}^{(0)}\|_2 = \kappa(\mathbf{T}) \|\mathbf{J}^n\|_2 \|\mathbf{E}^{(0)}\|_2, \quad (3.53)$$

kde  $\kappa(\mathbf{T}) = \|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2$  je číslo podmíněnosti matice  $\mathbf{T}$ . Pokud je matice  $\mathbf{J}$  diagonální, platí  $\|\mathbf{J}^n\|_2 = \|\mathbf{J}\|_2^n$  a její spektrální norma je rovna spektrálnímu poloměru  $\rho(\mathbf{H})$  matice  $\mathbf{H}$ . V takovém případě tedy platí

$$\|\mathbf{E}^{(n)}\|_2 \leq \kappa(\mathbf{T}) \rho(\mathbf{H})^n \|\mathbf{E}^{(0)}\|_2. \quad (3.54)$$

Řekněme, že řešení považujeme za ustálené, pokud  $\|\mathbf{E}^{(k)}\|_2 \leq \epsilon \|\mathbf{E}^{(0)}\|_2$ , kde  $\epsilon > 0$  je předem dáno. Naším cílem je tedy nalézt takový počet kroků  $k$ , pro který je toto splněno. Víme, že

$$\|\mathbf{E}^{(k)}\|_2 \leq \kappa(\mathbf{T}) \rho(\mathbf{H})^k \|\mathbf{E}^{(0)}\|_2, \quad (3.55)$$

takže požadujeme, aby

$$\kappa(\mathbf{T}) \rho(\mathbf{H})^k \approx \epsilon. \quad (3.56)$$

Pro hledaný počet kroků  $k$  tedy platí

$$k \approx \frac{\log(\epsilon) - \log(\kappa(\mathbf{T}))}{\log(\rho(\mathbf{H}))}. \quad (3.57)$$

### 3.2. PŘEVOD NA HYPERBOLICKÝ SYSTÉM

---

Pokud je navíc matice  $\mathbf{H}$  symetrická, její vlastní vektory, které tvoří sloupce matice  $\mathbf{T}$ , jsou ortogonální a  $\kappa(\mathbf{T}) = 1$ . Vztah (3.57) se tedy zjednoduší na

$$k \approx \frac{\log(\epsilon)}{\log(\rho(\mathbf{H}))}. \quad (3.58)$$

Na základě uvedené úvahy stanovme nejprve počet časových kroků potřebný pro dosažení ustáleného stavu při výpočtu řešení stacionární difúzní rovnice explicitní metodou z oddílu 2.1. Uvažujme difúzní koeficient  $a = 1$ . Vlastní čísla matice přechodu mezi časovými vrstvami  $\mathbf{H}$  mají v tomto případě tvar

$$\lambda_p = 1 + \frac{2\tau}{h^2}(\cos(p\pi h) - 1), \quad p = 1, \dots, J - 1. \quad (3.59)$$

Zvolíme-li časový krok jako  $\tau = \frac{h^2}{2}$ , zjednoduší se vztah pro vlastní čísla na

$$\lambda_p = \cos(p\pi h). \quad (3.60)$$

Funkce  $\cos(p\pi h)$  proměnné  $p$  má periodu  $\frac{2}{h} = 2J$ , její hodnoty tedy pro  $p = 1, \dots, J - 1$  klesají. Navíc platí  $|\lambda_1| = |\lambda_{J-1}|$ . Proto můžeme říci, že pro spektrální poloměr matice  $\mathbf{H}$  platí

$$\rho(\mathbf{H}) = |\lambda_1| = |\cos(\pi h)| = \cos(\pi h), \quad (3.61)$$

kde poslední rovnost platí pro  $h \leq \frac{1}{2}$ . Budeme požadovat přesnost  $\epsilon = Ch^2$ ,  $C \in \mathbb{R}$ . Pro počet kroků  $k$  tedy platí

$$k \approx \frac{\log(\epsilon)}{\log(\rho(\mathbf{H}))} = \frac{\log(Ch^2)}{\log(\cos(\pi h))} = \frac{\log(C) + 2\log(h)}{\log(\cos(\pi h))}. \quad (3.62)$$

Pro malá  $h$  můžeme použít aproximaci kosinu pomocí Taylorova rozvoje v okolí nuly

$$\cos(\pi h) = 1 - \frac{\pi^2 h^2}{2} + O(h^4) \quad (3.63)$$

a dostaneme

$$k \approx \frac{\log(C) + 2\log(h)}{\log(1 - \frac{\pi^2 h^2}{2})}. \quad (3.64)$$

Stejně tak můžeme využít aproximaci logaritmu pomocí Taylorova rozvoje

$$\log(1 - \frac{\pi^2 h^2}{2}) = -\frac{\pi^2 h^2}{2} + O(h^4) \quad (3.65)$$

a získáme

$$k \approx \frac{\log(C) + 2\log(h)}{-\frac{\pi^2 h^2}{2}}. \quad (3.66)$$

Můžeme tedy říci, že počet kroků

$$k = O(\log(h)/h^2). \quad (3.67)$$

Nyní se pokusme stejným způsobem stanovit počet kroků  $k$  pro naši metodu typu upwind.

### 3.2. PŘEVOD NA HYPERBOLICKÝ SYSTÉM

Pro jednoduchost uvažujme skalární advekční rovnici s rychlostí  $c > 0$  a okrajovou podmínkou na levém okraji

$$\begin{aligned} u_t + cu_x &= f, & x \in (0, L), & t \geq 0, & c > 0, \\ u(x, 0) &= \tilde{u}(x), & x \in \langle 0, L \rangle, \\ u(0, t) &= u_0(t), & t \geq 0. \end{aligned} \quad (3.68)$$

Po diskretizaci a jednoduchých úpravách získáme schéma pro výpočet řešení na nové časové vrstvě

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \frac{c\tau}{h}(U_j^n - U_{j-1}^n) + \frac{\tau}{2}(f_{j-1} + f_j), \quad j = 2, \dots, J \quad (3.69)$$

a pro  $j = 1$  platí

$$U_1^{n+1} = U_1^n - \frac{c\tau}{h}(U_1^n - u_0(t_n)) + \frac{\tau}{2}(f_0 + f_1). \quad (3.70)$$

Celé schéma můžeme zapsat maticově jako

$$\mathbf{U}^{(n+1)} = \begin{bmatrix} 1-r & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ r & 1-r & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & r & 1-r \end{bmatrix} \mathbf{U}^{(n)} + \begin{bmatrix} \frac{\tau}{2}(f_0 + f_1) + ru_0(t_n) \\ \frac{\tau}{2}(f_1 + f_2) \\ \vdots \\ \frac{\tau}{2}(f_{J-2} + f_{J-1}) \\ \frac{\tau}{2}(f_{J-1} + f_J) \end{bmatrix}, \quad (3.71)$$

zkráceně

$$\mathbf{U}^{(n+1)} = \mathbf{H}\mathbf{U}^{(n)} + \mathbf{F}^{(n)}, \quad (3.72)$$

kde jsme označili  $r = \frac{c\tau}{h}$ .

Matice  $\mathbf{H}$  je trojúhelníková, její vlastní čísla tedy najdeme na diagonále. Všechna jsou rovna  $1 - r$ , proto i spektrální poloměr  $\rho(\mathbf{H}) = 1 - r$ . Volíme-li časový krok  $\tau = \frac{h}{c}$ , bude spektrální poloměr roven nule, což by mohlo zdánlivě napovídat, že ustáleného stavu dosáhneme okamžitě během jediného kroku. Ve skutečnosti je k tomu ovšem potřeba  $J$  kroků. Problémem je, že matice  $\mathbf{H}$  v tomto případě není diagonalizovatelná, normu matice  $\mathbf{J}$  proto nemůžeme ztotožnit se spektrálním poloměrem  $\rho(\mathbf{H})$ , čímž se situace komplikuje. Dalším problémem je určení čísla podmíněnosti  $\kappa(\mathbf{T})$  matice  $\mathbf{T}$ , které zde není rovno jedné. Zkusíme tedy zvolit jiný postup.

Za ustálené řešení, kterého chceme dosáhnout, budeme nyní považovat přesné řešení  $u$  v takovém čase  $T$ , že  $u(x, T)$  se od přesného ustáleného řešení liší méně, než je nějaká daná tolerance. Tu volíme výrazně menší, než je chyba aproximace prostorové proměnné. Odchylku můžeme měřit pomocí velikosti rezidua. Upozorníme, že čas  $T$  je závislý na modelu, což ovšem neovlivňuje naši úvahu. Pro počet kroků  $N$  potřebný k dosažení tohoto ustáleného stavu platí

$$N = \frac{T}{\tau}, \quad (3.73)$$

neboli pro naši volbu  $\tau = \frac{h}{c}$

$$N = \frac{cT}{h}. \quad (3.74)$$

V tomto případě tedy můžeme říci, že počet kroků

$$N = O(1/h), \quad (3.75)$$

což znamená, že roste lineárně se zmenšujícím se krokem  $h$ . Zmenšíme-li tedy  $h$  na polovinu, k dosažení ustáleného stavu bude potřeba dvojnásobek iterací. Naproti tomu pro explicitní metodu z oddílu 2.1 by platilo  $N = O(1/h^2)$ .

### 3.2.2 Advektivně-difúzní rovnice

V tomto oddíle naznačíme rozšíření výše uvedené metody pro řešení advektivně-difúzní rovnice

$$u_t + cu_x - au_{xx} = f, \quad (3.76)$$

kde  $c > 0$  je rychlost proudění a  $a > 0$  je difúzní koeficient. K jejímu řešení se obvykle používá kombinace dvou různých schémat – pro advektivní a pro difúzní rovnici. Tento postup ale není ideální, neboť v některých případech může vést k řadě problémů. Těm se můžeme vyhnout, pokud použijeme metodu převodu na hyperbolický systém, kterou jsme popsali výše pro difúzní rovnici. Tato metoda si i v tomto případě zachovává své vlastnosti – rychlou konvergenci k ustálenému stavu s časovým krokem délky  $O(h)$  a výpočet řešení i tokových funkcí se stejnou přesností. Navíc nabízí stejnou přesnost výpočtu pro všechna Reynoldsova čísla. Následující popis metody a její podrobnější analýzu nalezneme v [4].

Přidáním advektivního členu  $cu_x$  do hyperbolického systému (3.9) získáme systém

$$\begin{aligned} u_t + cu_x - ap_x &= f, \\ p_t - \frac{1}{T_r}u_x &= -\frac{p}{T_r}, \end{aligned} \quad (3.77)$$

který je opět v ustáleném stavu ekvivalentní s původní rovnicí (3.76) pro libovolné  $T_r$ . Systém (3.77) můžeme opět zapsat maticově jako

$$\mathbf{q}_t + \mathbf{A}\mathbf{q}_x = \mathbf{g}, \quad (3.78)$$

kde

$$\mathbf{q} = \begin{bmatrix} u \\ p \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} c & -a \\ -\frac{1}{T_r} & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{g} = \begin{bmatrix} f \\ -\frac{p}{T_r} \end{bmatrix}. \quad (3.79)$$

Tento systém je stejně jako (3.9) hyperbolický, neboť matice  $\mathbf{A}$  má reálná vlastní čísla

$$\lambda_1 = \frac{c}{2} \left[ 1 - \sqrt{1 + \frac{4a}{c^2 T_r}} \right], \quad \lambda_2 = \frac{c}{2} \left[ 1 + \sqrt{1 + \frac{4a}{c^2 T_r}} \right] \quad (3.80)$$

a lineárně nezávislé vlastní vektory. Matice pravých vlastních vektorů je

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} -\lambda_1 T_r & -\lambda_2 T_r \\ 1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.81)$$

Parametr  $T_r$  v tomto případě definujeme jako podíl délkového parametru  $L_r$  a charakteristické rychlosti systému (vlastního čísla matice  $\mathbf{A}$ ), abychom sjednotili relaxační a charakteristickou časovou škálu a tím urychlili konvergenci k ustálenému stavu. Definujeme tedy

$$T_r = \frac{L_r}{\lambda_2} = \frac{L_r}{\frac{c}{2} \left[ 1 + \sqrt{1 + \frac{4a}{c^2 T_r}} \right]}, \quad (3.82)$$

kde  $\lambda_2$  je zvoleno pro zachování kladné rychlosti v limitních případech, kdy  $a \rightarrow 0$  nebo  $c \rightarrow 0$ . Vyřešíme-li tuto rovnici pro  $T_r$ , dostaneme

$$T_r = \frac{L_r}{c + a/L_r}. \quad (3.83)$$

### 3.2. PŘEVOD NA HYPERBOLICKÝ SYSTÉM

V případě, že  $c \rightarrow 0$  je toto přesně  $T_r$ , které jsme definovali dříve při řešení difúzní rovnice (viz (3.14)). Dosadíme-li (3.83) do výrazů v (3.80), dostaneme vyjádření vlastních čísel jako

$$\lambda_1 = -\frac{c}{Re_{L_r}}, \quad \lambda_2 = c \left( 1 + \frac{1}{Re_{L_r}} \right), \quad (3.84)$$

kde jsme zavedli tzv. Reynoldsovo číslo

$$Re_{L_r} \equiv \frac{cL_r}{a}. \quad (3.85)$$

Reynoldsovo číslo je bezrozměrný parametr, který udává poměr rychlosti čisté advekce a rychlosti difúze

$$Re_{L_r} = \frac{cL_r}{a} = \frac{c}{a/L_r} = \frac{c}{|c_d|}. \quad (3.86)$$

Hodnota parametru  $L_r$  pro difúzní rovnici byla volena tak, aby optimalizovala konkrétní numerické schéma z hlediska tlumení a propagace chyby. Pro advekčně-difúzní rovnici lze jeho optimální hodnotu stanovit na diferenciální úrovni tak, aby tuhost systému byla minimální a ustáleného stavu bylo dosaženo co nejrychleji. Touto hodnotou je

$$L_r = \frac{1}{2\pi} \left[ \frac{Re_\pi}{\sqrt{1 + Re_\pi^2 + 1}} + \sqrt{1 + \frac{2}{\sqrt{1 + Re_\pi^2 + 1}}} \right], \quad (3.87)$$

kde

$$Re_\pi \equiv \frac{c(1/\pi)}{a}, \quad (3.88)$$

k jejímuž nalezení bylo stejně jako v případě difúzní rovnice využito Fourierovy analýzy (viz [4]).

#### Diskretizace

Pro diskretizaci použijeme opět metodu distribuce reziduí. Stále uvažujeme ekvidistantní síť uzlů s krokem  $h = x_{j+1} - x_j$  pro  $j = 0, \dots, J-1$ , v každém uzlu uchováváme hodnoty  $\mathbf{Q}_j = [U_j, P_j]^T$ ,  $j = 0, \dots, J$  a v obou krajních uzlech máme okrajovou podmínku pro  $u$ . Hodnota rezidua pro  $(x_j, x_{j+1})$  je

$$\begin{aligned} \Phi_{j+1/2} &= \int_{x_j}^{x_{j+1}} (-\mathbf{A}\mathbf{q}_x + \mathbf{g})dx \approx \\ &\approx -\mathbf{A}(\mathbf{Q}_{j+1} - \mathbf{Q}_j) + (w_j \mathbf{G}_j + w_{j+1} \mathbf{G}_{j+1})h, \end{aligned} \quad (3.89)$$

kde  $w_j, w_{j+1}$  jsou váhy použité kvadratury, které splňují  $w_j + w_{j+1} = 1$ . Reziduum rozdělíme do krajních uzlů pomocí distribučních matic

$$\mathcal{B}_{j+1/2}^- = \frac{1}{2} \mathbf{R} \begin{bmatrix} \left(1 - \frac{\lambda_1}{|\lambda_1|}\right) & 0 \\ 0 & \left(1 - \frac{\lambda_2}{|\lambda_2|}\right) \end{bmatrix} \mathbf{R}^{-1}, \quad (3.90)$$

$$\mathcal{B}_{j+1/2}^+ = \frac{1}{2} \mathbf{R} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{\lambda_1}{|\lambda_1|}\right) & 0 \\ 0 & \left(1 + \frac{\lambda_2}{|\lambda_2|}\right) \end{bmatrix} \mathbf{R}^{-1}, \quad (3.91)$$



### 3.2. PŘEVOD NA HYPERBOLICKÝ SYSTÉM

---

které zajišťují přenos části řešení s kladnou rychlostí směrem doprava a části se zápornou rychlostí směrem doleva neboli upwinding. Dostáváme semidiskrétní formuli

$$\frac{d\mathbf{Q}_j}{dt} = \frac{1}{h}(\mathcal{B}_{j-1/2}^+ \Phi_{j-1/2} + \mathcal{B}_{j+1/2}^- \Phi_{j+1/2}), \quad (3.92)$$

kterou integrujeme v čase, dokud nedosáhneme ustáleného stavu.

# Kapitola 4

## Numerické experimenty

V této kapitole uvádíme výsledky numerických experimentů, které byly realizovány v programu MATLAB. Hlavním cílem bylo prověřit vlastnosti metody uvedené v kapitole 3, konkrétně závislost rychlosti konvergence na volbě parametru  $L_r$ , počet iterací nutný k dosažení ustáleného stavu vzhledem k velikosti  $h$  a řád metody. Všechny experimenty se týkaly pouze případu difúzní rovnice.

Dále jsme se pokusili rozšířit tuto metodu pro difúzní rovnici s nekonztantním difúzním koeficientem  $a(x)$ .

### 4.1 Ověření vlastností metody

Výsledky uvedené v této části byly získány pro úlohu

$$\begin{aligned} u_t - u_{xx} &= \pi^2 \sin(\pi x), & x \in (0, 1), & \quad t \geq 0 \\ u(x, 0) &= x(x - 1), & x \in (0, 1), \\ u(0, t) &= 0, & u(1, t) = 0, & \quad t \geq 0, \end{aligned} \tag{4.1}$$

jejímž přesným řešením je funkce  $u(x, t) = \sin(\pi x)$ . Časový krok jsme volili vzhledem k podmínce (3.30) jako  $\tau = 0.99 \frac{hL_r}{a} = 0.99 hL_r$ . Řešení považujeme za ustálené, pokud jsou rezidua v uzlech dostatečně zredukována. Jako zastavovací podmínku jsme tedy použili

$$\|\mathbf{r}_u^{(k)}\|_1 < 10^{-9} \|\mathbf{r}_u^{(0)}\|_1 \quad \wedge \quad \|\mathbf{r}_p^{(k)}\|_1 < 10^{-9} \|\mathbf{r}_p^{(0)}\|_1, \tag{4.2}$$

kde  $\mathbf{r}_u^{(k)}$ , resp.  $\mathbf{r}_p^{(k)}$ , je vektor reziduí v jednotlivých uzlech pro proměnnou  $u$ , resp.  $p$ , v  $k$ -tém iteračním kroku.

V tabulkách 4.1, 4.2 a 4.3 uvádíme informace o počtu iterací,  $L_1$  normě chyby  $u$  a  $p$  a řádu chyb pro sítě s krokem  $h = 1/8, 1/16, \dots, 1/256$  pro tři různé volby parametru  $L_r$ . První volbou je optimální hodnota

$$L_r = \frac{h}{4} \left( 1 + \frac{1}{\sin \frac{\pi h}{2}} \right)$$

odvozená Nishikawou v [3]. Druhou volbou je aproximace této hodnoty

$$L_r = \frac{1}{6} + \frac{h}{4}$$

a nakonec volíme  $L_r = 1$ .

#### 4.1. OVĚŘENÍ VLASTNOSTÍ METODY

Řád chyby  $s$  můžeme odhadnout vztahem

$$s \approx \frac{\log(\|\mathbf{E}_{h_1}\|/\|\mathbf{E}_{h_2}\|)}{\log(h_1/h_2)}, \quad (4.3)$$

kde  $h_1, h_2$  jsou dva různé diskretizační kroky a  $\mathbf{E}_{h_1}, \mathbf{E}_{h_2}$  jsou příslušné vektory chyby. V našem případě používáme vždy  $h_1, h_2$  taková, že  $h_1/h_2 = 2$ , řád chyby tedy odhadujeme jako

$$s \approx \frac{\log(\|\mathbf{E}_{h_1}\|/\|\mathbf{E}_{h_2}\|)}{\log(2)}. \quad (4.4)$$

$J$	počet iterací	chyba $u$	řád	chyba $p$	řád
8	158	$3.67 \cdot 10^{-2}$		$5.60 \cdot 10^{-2}$	
16	352	$9.21 \cdot 10^{-3}$	1.99	$9.28 \cdot 10^{-3}$	2.59
32	546	$2.27 \cdot 10^{-3}$	2.02	$1.90 \cdot 10^{-3}$	2.29
64	681	$5.60 \cdot 10^{-4}$	2.02	$4.34 \cdot 10^{-4}$	2.13
128	1057	$1.39 \cdot 10^{-4}$	2.01	$1.04 \cdot 10^{-4}$	2.06
256	2185	$3.46 \cdot 10^{-5}$	2.01	$2.56 \cdot 10^{-5}$	2.02

Tabulka 4.1: Výsledky pro  $L_r = \frac{h}{4} \left(1 + \frac{1}{\sin \frac{\pi h}{2}}\right)$ .

$J$	počet iterací	chyba $u$	řád	chyba $p$	řád
8	158	$3.74 \cdot 10^{-2}$		$5.53 \cdot 10^{-2}$	
16	367	$9.41 \cdot 10^{-3}$	1.99	$9.23 \cdot 10^{-3}$	2.58
32	545	$2.32 \cdot 10^{-3}$	2.02	$1.90 \cdot 10^{-3}$	2.28
64	680	$5.73 \cdot 10^{-4}$	2.02	$4.34 \cdot 10^{-4}$	2.13
128	861	$1.42 \cdot 10^{-4}$	2.01	$1.04 \cdot 10^{-4}$	2.06
256	2110	$3.54 \cdot 10^{-5}$	2.00	$2.56 \cdot 10^{-5}$	2.02

Tabulka 4.2: Výsledky pro  $L_r = \frac{1}{6} + \frac{h}{4}$ .

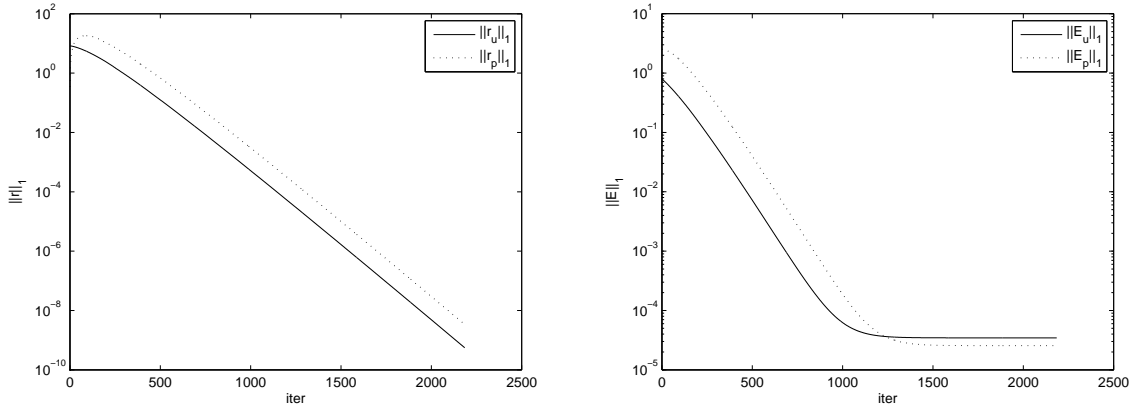
$J$	počet iterací	chyba $u$	řád	chyba $p$	řád
8	448	$1.20 \cdot 10^{-1}$		$4.20 \cdot 10^{-2}$	
16	650	$3.21 \cdot 10^{-2}$	1.90	$8.38 \cdot 10^{-3}$	2.33
32	1202	$8.25 \cdot 10^{-3}$	1.96	$1.84 \cdot 10^{-3}$	2.19
64	2479	$2.09 \cdot 10^{-3}$	1.98	$4.31 \cdot 10^{-4}$	2.10
128	5227	$5.25 \cdot 10^{-4}$	1.99	$1.04 \cdot 10^{-4}$	2.05
256	10728	$1.32 \cdot 10^{-4}$	1.99	$2.55 \cdot 10^{-5}$	2.03

Tabulka 4.3: Výsledky pro  $L_r = 1$ .

Z výsledků je vidět, že první dvě volby  $L_r$  jsou z hlediska rychlosti konvergence k ustálenému stavu srovnatelné, kdežto pro  $L_r = 1$  je konvergence výrazně pomalejší. Odhad řádu chyby je ve všech případech přibližně 2 pro  $u$  i  $p$ , což nasvědčuje tomu, že obě neznámé funkce jsou skutečně vypočteny s přesností druhého řádu. Počet iterací v čase roste zhruba lineárně se zmenšujícím se krokem  $h$ .

## 4.2. NEZÁVISLOST NA POČÁTEČNÍ PODMÍNCE

Na obrázku 4.1 vidíme grafy znázorňující vývoj velikosti  $L1$  normy vektorů rezidua pro  $u$  a  $p$  (vlevo) a vektorů chyby  $u$  a  $p$  (vpravo) v průběhu iteračního procesu. Konkrétně jsme zde volili  $L_r = \frac{h}{4} \left(1 + \frac{1}{\sin \frac{\pi h}{2}}\right)$  a  $J = 256$ . Všimněme si, že velikost normy chyby  $u$  i  $p$  klesá



Obrázek 4.1: Vývoj normy reziduí a chyb s počtem iterací.

poměrně rychle na malé hodnoty a poté se již mění velmi pomalu. Prakticky tedy není nutné volit tak přísnou zastavovací podmínku, stejné přesnosti je možné dosáhnout za nižší počet iterací. My jsme těmito experimenty ovšem ověřili závislost počtu kroků na velikosti  $h$  podle vztahu (3.75).

Navržená iterační metoda nemá charakter hladiče. Díky tomu, že jsme použili diskretizaci typu upwind a díky vhodné volbě  $L_r$  jsou současně eliminovány všechny frekvenční složky chyby (v případě hladiče jsou eliminovány pouze složky s vyššími frekvencemi). Důsledky tohoto faktu lze také vypořádat na průběhu velikosti rezidua v závislosti na počtu iterací.

## 4.2 Nezavislost na počáteční podmínce

Jelikož ustálené řešení nezávisí na počáteční podmínce, i numerická řešení pro různé počáteční podmínky by se při stejné volbě všech parametrů měla lišit pouze v počtu iterací potřebných k jejich nalezení. Důležitou vlastností řešení difúzní rovnice je také to, že je pro každé  $t > 0$  hladké i v případě, že počáteční podmínka hladká není nebo dokonce obsahuje nespojitosti. Uvažujme opět úlohu (4.1), ovšem nyní s nespojitou počáteční podmínkou

$$u(x, 0) = \begin{cases} 1 & \dots & x \in (\frac{1}{4}, \frac{3}{4}) \\ 0 & \dots & x \in (0, \frac{1}{4}) \cup (\frac{3}{4}, 1). \end{cases} \quad (4.5)$$

Výsledky pro tuto úlohu uvádíme v tabulce 4.4. Srovnajme je s výsledky v tabulce 4.1. Kromě nezávislosti na počáteční podmínce jsme ověřili, že metoda pro nespojitou počáteční podmínku neselže a zachová si své vlastnosti – přesnost druhého řádu pro obě neznámé funkce  $u$  a  $p$  a zhruba lineární růst počtu iterací.

$J$	počet iterací	chyba $u$	řád	chyba $p$	řád
8	180	$3.67 \cdot 10^{-2}$		$5.60 \cdot 10^{-2}$	
16	432	$9.21 \cdot 10^{-3}$	1.99	$9.28 \cdot 10^{-3}$	2.59
32	699	$2.27 \cdot 10^{-3}$	2.02	$1.90 \cdot 10^{-3}$	2.29
64	840	$5.60 \cdot 10^{-4}$	2.02	$4.34 \cdot 10^{-4}$	2.13
128	897	$1.39 \cdot 10^{-4}$	2.01	$1.04 \cdot 10^{-4}$	2.06
256	1670	$3.46 \cdot 10^{-5}$	2.01	$2.56 \cdot 10^{-5}$	2.03

Tabulka 4.4: Výsledky pro nespojitou počáteční podmínku s  $L_r = \frac{h}{4} \left(1 + \frac{1}{\sin \frac{\pi h}{2}}\right)$ .

### 4.3 Proměnný difúzní koeficient

Naším dalším cílem bylo rozšíření dané metody pro řešení difúzní rovnice s proměnným difúzním koeficientem v nekonzervativním tvaru

$$u_t - a(x)u_{xx} = f, \quad \forall x \in \langle 0, L \rangle : a(x) > 0. \quad (4.6)$$

Stejným postupem jako v oddíle 3.2.1 získáme soustavu

$$\begin{aligned} -a(x)p_x &= f, \\ -\frac{1}{T_r(x)}u_x &= -\frac{p}{T_r(x)} \end{aligned} \quad (4.7)$$

neboli

$$\mathbf{A}(x)\mathbf{q}_x = \mathbf{g}, \quad (4.8)$$

jejíž řešení budeme hledat jako ustálené řešení soustavy

$$\mathbf{q}_t + \mathbf{A}(x)\mathbf{q}_x = \mathbf{g}, \quad (4.9)$$

kde

$$\mathbf{q} = \begin{bmatrix} u \\ p \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}(x) = \begin{bmatrix} 0 & -a(x) \\ -\frac{1}{T_r(x)} & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{g} = \begin{bmatrix} f \\ -\frac{p}{T_r(x)} \end{bmatrix}. \quad (4.10)$$

Vlastní čísla matice  $\mathbf{A}(x)$  mají nyní tvar  $\lambda_{1,2} = \pm\sqrt{a(x)/T_r(x)}$ , jsou reálná a různá, systém (4.9) je tedy hyperbolický. Také opět platí  $\mathbf{A}(x) = \mathbf{R}\mathbf{\Lambda}(x)\mathbf{R}^{-1}$ , kde

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} -L_r & L_r \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{R}^{-1} = \begin{bmatrix} -1/2L_r & 1/2 \\ 1/2L_r & 1/2 \end{bmatrix}, \quad (4.11)$$

$$\mathbf{\Lambda}(x) = \begin{bmatrix} \sqrt{a(x)/T_r(x)} & 0 \\ 0 & -\sqrt{a(x)/T_r(x)} \end{bmatrix}. \quad (4.12)$$

Jsou-li hodnoty  $a(x)$  pro různá  $x$  velmi rozdílné, zejména pokud  $a(x) \rightarrow 0$  pro některá  $x$ , může být systém (4.9) tzv. stiff-systémem. To by v tomto případě znamenalo, že v některých místech je rychlost proudění relativně velká, z čehož vyplývá nutnost volby malého časového kroku, a v některých místech téměř nulová, takže ustáleného stavu dosáhneme až za velmi dlouhou dobu. Tomu můžeme předejít vhodným předpokmáním

$$\mathbf{q}_t + \mathbf{P}(x) [\mathbf{A}(x)\mathbf{q}_x - \mathbf{g}] = 0. \quad (4.13)$$

### 4.3. PROMĚNNÝ DIFÚZNÍ KOEFICIENT

Předpodmiňovač  $\mathbf{P}(x)$  volíme jako

$$\mathbf{P}(x) = \max_x[\rho(\mathbf{A}(x))] |\mathbf{A}|^{-1} \quad (4.14)$$

(viz [6]), kde  $\rho(\mathbf{A}(x))$  je spektrální poloměr matice  $\mathbf{A}(x)$  a

$$|\mathbf{A}| = \mathbf{R} \begin{bmatrix} \sqrt{a(x)/T_r(x)} & 0 \\ 0 & \sqrt{a(x)/T_r(x)} \end{bmatrix} \mathbf{R}^{-1}. \quad (4.15)$$

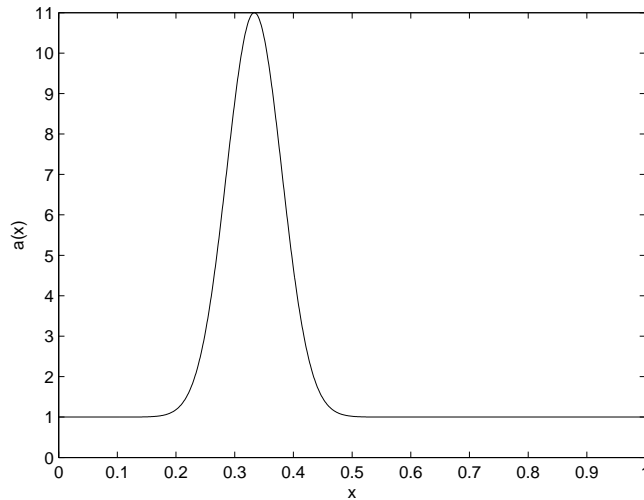
Experimenty byly provedeny na úloze

$$\begin{aligned} u_t - a(x)u_{xx} &= f, & x \in (0, 1), & t \geq 0, \\ u(x, 0) &= x(x-1), & x \in (0, 1), \\ u(0, t) &= 0, & u(1, t) = 0, & t \geq 0, \end{aligned} \quad (4.16)$$

kde jsme funkci  $a(x)$  volili tak, aby nebyla na daném intervalu symetrická a její průběh nebyl blízky konstantní funkci, konkrétně

$$a(x) = 10e^{-(15x-5)^2} + 1. \quad (4.17)$$

Její graf vidíme na obrázku 4.2. Pravou stranu  $f(x)$  rovnice jsme stanovili tak, aby přesným



Obrázek 4.2: Graf funkce  $a(x)$ .

řešením úlohy byla opět funkce  $u(x, t) = \sin(\pi x)$ .

V tabulce 4.5 uvádíme výsledky numerických experimentů pro tuto úlohu bez použití předpokládání, v tabulce 4.6 již s předpokládáním. Pro všechny experimenty jsme volili parametr  $L_r$  podle vztahu (3.32). Časový krok jsme v případě bez předpokládání volili v souladu s podmínkou (3.29) jako

$$\tau = 0.99 \frac{h}{\lambda_{max}}, \quad (4.18)$$

### 4.3. PROMĚNNÝ DIFÚZNÍ KOEFICIENT

---

kde

$$\lambda_{max} = \max_{x \in (0,1)} \sqrt{\frac{a(x)}{T_r(x)}} \quad (4.19)$$

je největší hodnota kladného vlastního čísla matice  $\mathbf{A}$  na intervalu  $(0, 1)$ . Očekávali bychom, že volba časového kroku podle vztahu (4.18) bude vhodná i při použití předpokládání, ale ukazuje se, že v takovém případě je algoritmus nestabilní. Proto volíme přísnější omezení časového kroku

$$\tau = 0.9 \frac{h}{\lambda_{max}}. \quad (4.20)$$

$J$	počet iterací	chyba $u$	řád	chyba $p$	řád
8	477	$2.67 \cdot 10^{-1}$		$9.01 \cdot 10^{-1}$	
16	878	$5.35 \cdot 10^{-2}$	2.32	$1.58 \cdot 10^{-1}$	2.51
32	1894	$1.35 \cdot 10^{-2}$	1.99	$3.86 \cdot 10^{-2}$	2.03
64	3797	$3.39 \cdot 10^{-3}$	2.00	$9.50 \cdot 10^{-3}$	2.02
128	7604	$8.47 \cdot 10^{-4}$	2.00	$2.36 \cdot 10^{-3}$	2.01
256	15229	$2.12 \cdot 10^{-4}$	2.00	$5.88 \cdot 10^{-4}$	2.00

Tabulka 4.5: Výsledky bez použití předpokládání.

$J$	počet iterací	chyba $u$	řád	chyba $p$	řád
8	150	$2.67 \cdot 10^{-1}$		$9.00 \cdot 10^{-1}$	
16	240	$5.36 \cdot 10^{-2}$	2.32	$1.58 \cdot 10^{-1}$	2.51
32	361	$1.35 \cdot 10^{-2}$	1.99	$3.86 \cdot 10^{-2}$	2.03
64	577	$3.39 \cdot 10^{-3}$	1.99	$9.50 \cdot 10^{-3}$	2.02
128	1015	$8.48 \cdot 10^{-4}$	2.00	$2.36 \cdot 10^{-3}$	2.01
256	1861	$2.12 \cdot 10^{-4}$	2.00	$5.88 \cdot 10^{-4}$	2.00

Tabulka 4.6: Výsledky s předpokládáním.

Z výsledků v tabulkách je vidět, že se nám uvedeným předpokládáním skutečně podařilo výrazně urychlit konvergenci k ustálenému stavu.

# Závěr

Tato práce se zabývala některými numerickými metodami pro řešení stacionární difúzní a advekčně-difúzní diferenciální rovnice. Zmínili jsme jednoduchou explicitní a implicitní metodu konečných diferencí pro řešení těchto rovnic a jejich hlavní nevýhody. Dále jsme podrobněji popsali explicitní metodu založenou na převodu difúzní či advekčně-difúzní rovnice na soustavu dvou PDR prvního řádu a blíže se věnovali některým jejím vlastnostem. Mezi hlavní přednosti této metody patří možnost jednotného přístupu k advekci a difúzi při řešení advekčně-difúzní rovnice, výpočet řešení i tokových funkcí s přesností druhého řádu a časový krok velikosti  $O(h)$ .

Tuto metodu jsme implementovali v prostředí MATLAB a na modelové úloze pro difúzní rovnici jsme testovali její vlastnosti. Ověřili jsme, že dostáváme výsledek s přesností druhého řádu pro samotné řešení i tokovou funkci a že počet iterací potřebný k dosažení ustáleného stavu roste lineárně se zmenšujícím se diskretizačním krokem  $h$ . Dále jsme také testovali vliv volby parametru  $L_r$  na rychlost konvergence, nezávislost získaného řešení na počáteční podmínce a funkčnost metody pro nespojitou počáteční podmínku. Jednoduchou úpravou jsme rozšířili metodu i pro řešení rovnic s proměnným difúzním koeficientem v nekonzervativním tvaru a našli jsme vhodné předpokládání, jehož pomocí je možné výrazně urychlit konvergenci k ustálenému stavu.

Zajímavými náměty k budoucí práci jsou například aplikace vhodné metody typu multigríd pro další urychlení konvergence či využití metod jako je GMRES, rozšíření metody pro řešení nelineárních rovnic a otestování kombinace explicitní metody pro parabolickou rovnici s metodou pro soustavu 1. řádu. Samozřejmostí je rozšíření metod do více prostorových dimenzí.



# Literatura

- [1] LEVEQUE, Randall J. Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2007. ISBN 978-0-89871-629-0.
- [2] LEVEQUE, Randall J. Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems. Cambridge: Cambridge University Press, 2002. ISBN 0-521-81087-6.
- [3] NISHIKAWA, Hiroaki. A First-Order System Approach for Diffusion Equation. I: Second-Order Residual Distribution Schemes. *Journal of Computational Physics*. 2007, roč. 227, č. 1, s. 315-352.
- [4] NISHIKAWA, Hiroaki. A First-Order System Approach for Diffusion Equation. II: Unification of Advection and Diffusion. *Journal of Computational Physics*. 2010, roč. 229, č. 11, s. 3989-4016.
- [5] MÍKA, Stanislav, Petr PŘIKRYL a Marek BRANDNER. Speciální numerické metody: numerické metody řešení okrajových úloh pro diferenciální rovnice. 1. vyd. Plzeň: Vydavatelský servis, 2006. ISBN 80-868-4313-0.
- [6] VAN LEER, Bram, Wen-Tzong LEE a Philip L. ROE. Characteristic time-stepping or local preconditioning of the Euler equations. In: AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, 10th, Honolulu, HI, June 24-27, 1991, Technical Papers (A91-40701 17-34). Washington, DC, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1991, p. 260-282.
- [7] PEROT, J.B. a V. SUBRAMANIAN. A discrete calculus analysis of the Keller Box scheme and a generalization of the method to arbitrary meshes. *Journal of Computational Physics*. 2007, vol. 226, issue 1, s. 494-508. DOI: 10.1016/j.jcp.2007.04.015.