Numerikus módszerek

→ PDE-k analitikus kezelése még 1D esetén is bonyolult, főként
időfüggő peremfeltétel esetén
vagy 3D problémára
⇒ numerikus módszerek alkalmazása:
pl: végeselemes módszer
véges térfogatok
véges differencia módszer

→ Véges differenciák: deriváltak differenciális közelítése

pl.: előrelépő (forward):

→ $f(x_0+h)$ kifejtése Taylor-sorral:

$$f(x_0+h) = f(x_0) + f'(x_0)h + f''(x_0)\frac{h^2}{2!} + \dots$$

→ ezt levágjuk, $\sim O(h^2)$

$$\Rightarrow \boxed{f'(x_0) \cong \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h}}$$

→ ezt az elsőrendű derivált előrelépő differenciális közelítésének nevezzük!

→ elsőrendben pontos közelítés

→ „h"-t lépésköznek nevezzük

→ hátralépőhöz hasonlóan járunk el:
$$\boxed{f'(x_0) \cong \frac{f(x_0) - f(x_0-h)}{h}}$$
→ 1. rendben pontos

→ centrális:
$$\boxed{f'(x_0) \cong \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h}}$$
→ 2. rendben pontos!

→ ez a megközelítés KDE-ek és PDE-k
esetén is működik

→ KDE esetén: csak időbeli „diszkretizálás"
(1 változó)

$\downarrow$

folytonos rendszerről
diszkrét rendszerre
való származtatás

→ PDE esetén: térben és időben is diszkretizálunk

⇒ Fourier-féle hővezetési egyenlet példája: $\frac{\partial T}{\partial \tau} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$

$$
(*) \left\{
\begin{aligned}
\frac{\partial T}{\partial \tau} &\approx \frac{T(x, \tau+\Delta\tau) - T(x,\tau)}{\Delta \tau} \quad \text{előrelépő} \\
\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} &\approx \frac{T(x+\Delta x, \tau) - 2T(x,\tau) + T(x-\Delta x, \tau)}{\Delta x^2} \quad \text{centrális}
\end{aligned}
\right.
$$

Megjegyzések:

→ ez csak 1 lehetséges választás!

→ a közelítés módja önkényes!

→ de nem minden közelítés működik egyformán jól!

→ van olyan PDE, amit a fenti (*) diszkretizálás egyáltalán nem tud megoldani, de hővezetésre jól működik

→ (*) diszkretizációt explicit ~~...~~ közelítésnek hívjuk:
$T(x, \tau+\Delta\tau)$ egyértelműen kifejezhető és rá az algebrai egyenlet megoldható

→ (*)-ban előrelépő helyett hátralépő közelítést használva implicit ~~...~~ közelítést kapunk, ez igaz akkor is, ha a $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ tagot a $\tau+\Delta\tau$ értékkel írjuk fel

→ explicit vs. implicit közötti különbség:

Numerikus stabilitás!

→ fizikailag stabil folyamatok is viselkedhetnek numerikusan instabilan!

→ ez minden numerikus módszer esetén kritérium!

→ stabil akkor, ha a közelítés hibája korlátos marad (és lehetőleg nem is növekszik az időlépéssel folyamán!)

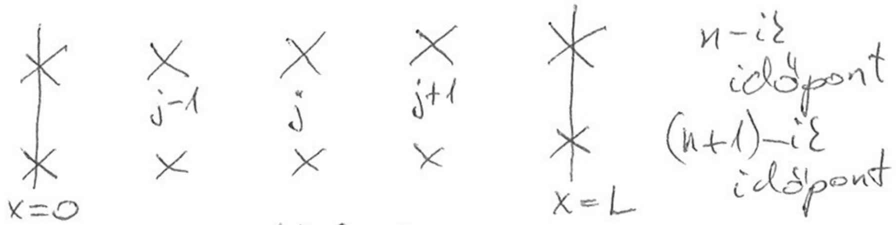
→ vizsgálatára: Neumann- és Jury-kritériumok

↳ itt most csak ezt tárgyaljuk

Jury: Routh-Hurwitz-kritériumok diszkrét megfelelője

→ Diszkretizált alak

↳ 1, Háló:



→ így T_{j}^{n} n időlépés, j térlépés

Fourier: $$\frac{1}{\Delta t}\left(T_j^{n+1} - T_j^n\right) = \frac{a}{\Delta x^2}\left(T_{j+1}^n - 2T_j^n + T_{j-1}^n\right)$$

→ explicit → feltételesen stabil

→ a feltételt a Neumann-kritérium által határozzuk meg!

→ Tételezzük fel a diszkrét <u>differencia egyenlet</u> megoldását az alábbi formában:

$$T = \xi^n e^{ikj\Delta x} \qquad \text{(síkhullám mo.)}$$

↳ i: képzetes egység $= \sqrt{-1}$
k: hullámszám, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$
ξ: növekményi faktor (hullám amplitudó)
n: időlépés
$j\Delta x$: j-ik térlépés

→ behelyettesítve:

$$e^{ikj\Delta x}\left(\xi^{n+1} - \xi^n\right) = \frac{\Delta t\, a}{\Delta x^2}\xi^n\left(e^{ik(j+1)\Delta x} - 2e^{ikj\Delta x} + e^{ik(j-1)\Delta x}\right)$$

→ elosztva mindkét oldalt $e^{ikj\Delta x}$-el és ξ^n-el:

$$\underline{\xi = \frac{\Delta t\, a}{\Delta x^2}\left(2\cos(k\Delta x) - 2\right) + 1}$$

→ Neumann-kritérium: $|\xi| \leq 1$ → stabilitás!
→ ha $|\xi| = 1$ → konzervatív séma!

a, $\cos(k\Delta x) = 1$ → $\xi = 1$ ✓

b, $\cos(k\Delta x) = -1$ → $-1 < -4\frac{a\Delta t}{\Delta x^2} + 1 < 1$

↳ $-4\frac{a\Delta t}{\Delta x^2} + 1 < 1 \Rightarrow -4\frac{a\Delta t}{\Delta x^2} < 0$ ez mindig ✓

↳ $-1 < -4\frac{a\Delta t}{\Delta x^2} + 1 \Rightarrow \boxed{\frac{1}{2} < \frac{a\Delta t}{\Delta x^2}}$

! stabilitási kritérium!

→ a stabilitási feltétel más és más minden egyenletre, minden módszer esetén!

→ ez szükséges feltétele a megoldás <u>konvergenciájához</u>

→ speciális eset az implicit sémára: <u>Crank-Nicolson</u>

$$\frac{1}{\Delta t}\left(T_j^{n+1}-T_j^n\right)=\frac{1}{2\Delta x^2}\underbrace{\left(T_{j+1}^n-2T_j^n+T_{j-1}^n\right)}_{\text{explicit}}+\frac{1}{2\Delta x^2}\underbrace{\left(T_{j+1}^{n+1}-2T_j^{n+1}+T_{j-1}^{n+1}\right)}_{\text{implicit}}$$

→ másodrendben pontos, mindig stabil séma

→ általánosan: $\frac{1}{2}$ helyett pl Θ

→ explicit és implicit tagok <u>konvex kombinációja</u>: $(1-\Theta)(\text{expl.}) + \Theta\,(\text{impl.})$

→ $\Theta = 0$ → explicit

$\Theta = 1$ → implicit

$\Theta = 1/2$ → C-N séma

<u>Kitekintés a Fourier-egyenleten túlra</u>

→ az anyagmodelleknek <u>érvényességi határaik</u> vannak!

pl: extrém alacsony hőm. ($\sim 1-20$ K)

ritka közegek, gázok (magas légkör)

inhomogén anyagok (habok, közetek, ...)

....

→ Kísérletileg bizonyított, hogy a Fourier-törvény <u>nem</u> elegendő

⇒ Nagyon széles elméleti háttér

$\underline{q} = -\lambda \nabla T$ Fourier-tv.

$\tau_q \frac{\partial \underline{q}}{\partial t} + \underline{q} = -\lambda \nabla T$ Maxwell-Cattaneo-Vernotte

$\tau_q \frac{\partial \underline{q}}{\partial t} + \underline{q} = -\lambda \nabla T + \mathcal{K}^2 \Delta \underline{q}$ Guyer-Krumhansl

→ és még sokan mások ....

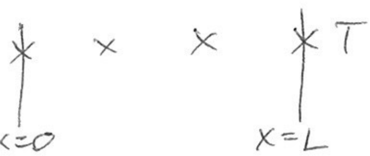
<u>Fontos:</u> → a másodfajú peremet <u>NEM</u> lehet úgy értelmezni, mint adott hőmérséklet gradiens(!) <u>kiterjesztett</u> hővez. egyenlet <u>esetén</u>: $\underline{q} \neq -\lambda \nabla T$

→ itt: másodfajú perem = adott $\underline{q}$

⇒ ∇T a peremen <u>nem</u> ismert!

→ véges differenciás megoldáshoz: <u>eltolt mezős</u> diszkretizáció

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \Delta T \quad \Rightarrow \quad \left.\begin{array}{l} \varrho c_v \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot \underline{q} = 0 \\ \tau_q \frac{\partial \underline{q}}{\partial t} + \underline{q} = -\lambda \nabla T \end{array}\right\}$$



helyett

⇒ T-re nem kell peremet előírni

⇒ $\underline{q}$ is eltolható T helyett

⇒ termodinamikailag „természetesebb" diszkretizáció

→ VEM megoldások: COMSOL