16.03.2020

Materiały uzupełniające do wykładu z MOMP w dn. 17.03.2020

Sławomir Kubacki

Podstawowy materiał do tego wykładu zawarty jest na stronach 18-24 w skrypcie ComputationalFluidDynamics_LectureNotes.pdf.

https://meil.pw.edu.pl/za/ZA/Courses/MOMPy

Proszę o zapoznanie się z:

- pojęciem zgodności (consistency) i rzędu aproksymacji (order of approximation) – rozdział 9.1

- techniką konstruowania schematu różnicowego dla pochodnej centralnej drugiego rzędu (rozdział 9.2.1) i pochodnej pierwszego rzędu (rozdział 9.2.2) – schemat jednostronny

- należy zapamiętać rozwinięcie funkcji w szereg Taylora (to będzie potrzebne na egzaminie).

Na poprzednim wykładzie w dn. 10.03.2020 przedstawiona została metodyka konstruowania schematów różnicowych dla pochodnych dowolnego rzędu dokładności, na potrzeby dyskretyzacji i późniejszego rozwiązania (w sposób przybliżony) różnego rodzaju równań różniczkowych.

W ramach niniejszego przedmiotu równania różniczkowe będą nam służyć do opisu procesów cieplno-przepływowych. Istnieje jednak wiele innych zastosowań tej techniki w fizyce, matematyce itp. Warto o tym pamiętać, bo metody przybliżone pozwalają na uzyskanie rozwiązań różnego rodzaju zagadnień, bez konieczności sięgania do rozwiązań analitycznych (dokładnych), które nie zawsze są dostępne (patrz równania Naviera-Stokesa).

W ramach niniejszego wykładu będziemy zajmować się rozwiązaniem prostego, modelowego, zagadnienia. Metoda ta może być w przyszłości zastosowana do rozwiązania, (w sposób przybliżony), równania konwekcji-dyfuzji z członem źródłowym, czy równań Naviera-Stokesa.

Zadanie 1. W pierwszej kolejności warto rozważyć konstrukcję schematu różnicowego dla pochodnej pierwszego rzędu. Pochodną oznaczamy symbolem u’.

Proponujemy schemat w postaci :

$$u'_j \approx \alpha u_{j-1} + \beta u_j + \gamma u_{j+1} \tag{1}$$

Rozwijamy składniki u_{j-1} i u_{j+1} w szereg Taylora. Otrzymujemy:

$$u_{j-1} = u_j - hu'_j + \frac{h^2}{2}u''_j - \frac{h^3}{6}u'''_j + h.o.t. \tag{2}$$

$u_j = u_j$ tego składnika nie musimy rozwijać, ale zapisujemy dla porządku (3)

$$u_{j+1} = u_j + hu'_j + \frac{h^2}{2}u''_j + \frac{h^3}{6}u'''_j + \text{h.o.t.} \tag{4}$$

Zapis 'h.o.t.' oznacza wyrazy wyższego rzędu (higher order terms). Wstawiamy rozwinięcia (2-4) do Równ. (1) i otrzymujemy po przekształceniach :

$$\begin{aligned} 1\cdot u'_j \approx \quad & u_j\left(\alpha+\beta+\gamma\right) \\ & +u'_j\left(-\alpha h+\gamma h\right) \\ & +u''_j\left(\alpha\frac{h^2}{2}+\gamma\frac{h^2}{2}\right) \\ & +u'''_j\left(-\alpha\frac{h^3}{6}+\gamma\frac{h^3}{6}\right) \\ & +u^{iv}_j(....)+.... \end{aligned} \tag{5}$$

W Równ. (1) mamy trzy niewiadome, α, β i γ. Potrzebujemy więc trzech równań, aby móc wyznaczyć nieznane wartości współczynników α, β i γ. Równanie (5) można również zapisać w postaci ogólnej

$$\Phi(u) = \Phi_h(u) + E_h\left(u\right) \tag{6}$$

lub w postaci

$$E_h\left(u\right) = \Phi(u) - \Phi_h(u) \tag{7}$$

gdzie (w tym przypadku): $\Phi(u) = u'_j$, $\Phi_h(u)$ - to będzie dyskretna reprezentacja pochodnej pierwszego rzędu (póki co jeszcze jej nie znamy), która powstanie ze składników na prawej stronie Równ. (5), natomiast $E_h\left(u\right)$ to będzie błąd (tego też na razie nie znamy). Równ. (7) pokazuje że błąd jest tym mniejszy im dyskretna reprezentacja pochodnej (opisana składnikiem $\Phi_h(u)$) najlepiej opisuje jej dokładną postać w punkcie x_j : $\Phi(u) = u'_j = 1\cdot u'_j$. Współczynniki w równ. (5) musimy więc tak zdefiniować, aby błąd $E_h\left(u\right)$ w równ. (7) był jak najmniejszy. Najlepszym sposobem na 'wyzerowanie' błędu jest wyrugowanie, krok po kroku, składników na prawej stronie równ. (5). Rozpoczynamy od składników wiodących, czyli tych które są proporcjonalne do u_j (do h^0), (wyrazy w pierwszej linii po prawej w równ. 5), następnie eliminujemy składniki proporcjonalne do u'_j (do h^1) (wyrazy w 2 linii w równ. 5 i wyraz po lewej stronie !), proporcjonalne do u''_j (wyrazy w 3 linii w równ. 5) i itd. Wyrazy proporcjonalne do u_j są tylko na prawej stronie równ. 5 (nie ma odpowiedniego wyrazu po lewej stronie czyli inaczej mówiąc po lewej stronie mamy $0u_j$). Aby składnik, w pierwszej linii po prawej stronie równ. (5) wyrugować, to $u_j(\alpha+\beta+\gamma)=0u_j=0$. Rozwiązanie tego równania wymaga (zakładając, że u_j jest niezerowe) aby $(\alpha+\beta+\gamma)=0$. Mamy pierwsze równanie. Wyrugowanie składników proporcjonalnych do u'_j w równ. (5) wymaga spełnienia równania $u'_j(-\alpha h+\gamma h)=1\cdot u'_j$. Zakładając że u'_j jest niezerowe, spełnienie tego równania wymaga aby $(-\alpha h+\gamma h)=1$. W ten sposób mamy drugie równanie. Równanie trzecie uzyskujemy przyrównując do siebie odpowiednie składniki proporcjonalne do u''_j w równ. (5). Mamy więc: $\left(\alpha\frac{h^2}{2}+\gamma\frac{h^2}{2}\right)=0$. Itd. Warto zauważyć, że w ten sposób możemy sformułować dowolną liczbę równań. Ale tak naprawdę tutaj potrzebujemy tylko 3. Mamy więc:

$$(\alpha+\beta+\gamma)=0 \tag{8}$$

$$(-\alpha h+\gamma h)=1 \tag{9}$$

$$\left(\alpha\frac{h^2}{2}+\gamma\frac{h^2}{2}\right)=0 \tag{10}$$

Rozwiązanie równ. (8), (9) i (10) daje: $\alpha=-\frac{1}{2h}$, $\beta=0$, $\gamma=\frac{1}{2h}$. Wprowadzając te współczynniki do schematu (1) otrzymujemy

$$u'_j\approx\frac{u_{j+1}-u_{j-1}}{2h} \tag{11}$$

Teraz pojawia się pytanie jaki jest rząd wzoru różnicowego danego związkiem (11) i jaki jest wiodący składnik błędu. Aby to oszacować musimy wstawić rozwinięcia (2-4) do równ. (1) przyjmując $\alpha=-\frac{1}{2h}$, $\beta=0$, $\gamma=\frac{1}{2h}$ i wprowadzić te związki do równ. (7). Błąd $E_h(u)$ wynosi:

$$E_h(u)=\left|\Phi(u)-\Phi_h(u)\right|=\left|u'_j-\left(\alpha u_{j-1}+\beta u_j+\gamma u_{j+1}\right)\right|=$$
$$=\left|u'_j-\left(-\frac{1}{2h}u_{j-1}+\frac{1}{2h}u_{j+1}\right)\right|= \tag{12}$$
$$=\left|u'_j-\left(-\frac{1}{2h}u_j+\frac{1}{2h}u_j+\frac{1}{2}u'_j+\frac{1}{2}u'_j-\frac{h}{4}u''_j+\frac{h}{4}u''_j+\frac{h^2}{12}u'''_j+\frac{h^2}{12}u'''_j+h.o.t.\right)\right|$$

Pierwsze 7 składników na prawej stronie równ. (12) zeruje się. Oznacza to, że współczynniki , α, β i γ zostały poprawnie wyznaczone. Błąd wynosi:

$$E_h(u)=\left|\frac{h^2}{6}u'''_j+h.o.t.\right| \tag{13}$$

<u>Składnik $\frac{h^2}{6}u'''_j$ w równ. (13) to **wiodący składnik błędu**</u>. Składnik ten proporcjonalny jest do h^2. <u>Oznacza to że wzór różnicowy (11) jest wzorem **drugiego rzędu dokładności**</u>. W równ. (13) występują tez składniki błędu proporcjonalne do $h^{3,}$ h^4 itd (oznaczone h.o.t.). Ale są one mniej znaczące, bo ogólnie dla małej wartości h (h=0.01 lub mniej) wyrazy podniesione do potęgi 3 i 4 h ($h^{3,}$ h^4) i większych są mniej znaczące od składnika proporcjonalnego do 2 (h^2).

<u>**Zadanie 2.**</u> Teraz możemy zająć się rozwiązaniem nieco bardziej złożonego zagadnienia. Dane są

$$u_j, u_{j+1}, u_{j-3}, u'_{j-1}$$

Należy znaleźć możliwie najbardziej dokładną aproksymację pochodnej trzeciego rzędu u'''_j i pokazać rząd wzoru różnicowego. Wzór różnicowy dany jest więc związkiem:

$$u'''_j=\alpha u_j+\beta u_{j+1}+\gamma u_{j-3}+\delta u'_{j-1} \tag{14}$$

Mamy 4 nieznane współczynniki α, β, γ i δ. Rozwijamy wartości funkcji w szereg Taylora lub zapisujemy tj. poprzednio

$$u_j=u_j \tag{15}$$

$$u_{j+1}=u_j+hu'_j+\frac{h^2}{2}u''_j+\frac{h^3}{6}u'''_j+\frac{h^4}{24}u^{iv}_j+h.o.t. \tag{16}$$

$$u_{j-3} = u_j - 3hu'_j + \frac{9h^2}{2}u''_j - \frac{27h^3}{6}u'''_j + \frac{81h^4}{24}u^{iv}_j + h.o.t. \tag{17}$$

W przypadku ostatniego składnika we wzorze (14) stosujemy podstawienie $u'_{j-1} = g_{j-1}$ i rozwijamy funkcję *g* w szereg Taylora

$$g_{j-1} = g_j - hg'_j + \frac{h^2}{2}g''_j - \frac{h^3}{6}g'''_j + \frac{h^4}{24}g^{iv}_j + h.o.t. \tag{18}$$

Co daje po wprowadzeniu podstawienia

$$u_{j-1} = u'_j - hu''_j + \frac{h^2}{2}u'''_j - \frac{h^3}{6}u^{iv}_j + \frac{h^4}{24}u^{v}_j + h.o.t. \tag{19}$$

Rozwinięcia (15-17) i (19) wprowadzamy do wzoru (14) i definiujemy 4 równania wg. reguły przedstawionej powyżej:

$$\alpha + \beta + \gamma = 0 \tag{20}$$

$$\beta h - 3\gamma h + \delta = 0 \tag{21}$$

$$\frac{h^2}{2}\beta + \frac{9h^2}{2}\gamma - \delta h = 0 \tag{22}$$

$$\frac{h^3}{6}\beta - \frac{27h^3}{6}\gamma + \frac{h^2}{2}\delta = 1 \tag{23}$$

Rozwiązanie układu równań (20-23) daje:

$$\alpha = 0,\ \beta = \frac{3}{8h^3},\ \gamma = -\frac{3}{8h^3}, \delta = -\frac{3}{2h^2} \tag{24}$$

Wzór aproksymacyjny dany jest więc związkiem

$$u'''_j = \frac{3}{8h^3}u_{j+1} - \frac{3}{8h^3}u_{j-3} - \frac{3}{2h^2}u'_{j-1} \tag{25}$$

Błąd $E_h(u)$ wynosi

$$\begin{aligned} E_h(u) &= \left|\Phi(u) - \Phi_h(u)\right| = \left|u'''_j - \left(\alpha u_j + \beta u_{j+1} + \gamma u_{j-3} + \delta u'_{j-1}\right)\right| = \\ &= \left|u^{iv}_j h^1\left(\frac{3}{8\cdot 24} - \frac{3\cdot 81}{8\cdot 27} + \frac{3}{2\cdot 6}\right) + h.o.t.\right| \end{aligned} \tag{26}$$

Składnik $u_j^{iv} h^1 \left(\frac{3}{8 \cdot 24} - \frac{3 \cdot 81}{8 \cdot 27} + \frac{3}{2 \cdot 6} \right)$ jest wiodącym składnikiem błędu. **Aproksymacja (25) jest pierwszego rzędu dokładności bo mamy h^1 przy wiodącym składniku błędu w równ. (26).**