Применение СПО для решения задач аэро- и газовой динамики

Лекция 3. Численные методы. Основные понятия. Численное решение уравнения переноса

Преподаватель: Романова Дарья Игоревна

Институт системного программирования им. В.П. Иванникова РАН, Москва

2023

Решение уравнений механики сплошной среды

Аналитическое решение

решение, записанное в формульном виде, содержащее в себе известные или определённые функции от параметров.

Численное решение

приближенное решение конкретного уравнения с заданной точностью.

Самые популярные численные методы

- Метод конечных разностей
- Метод конечных объёмов
- Метод конечных элементов

Самые популярные численные методы

Метод конечных разностей

численный метод решения дифференциальных уравнений в частных производных (УрЧП), основанный на замене производных разностными схемами. Является сеточным методом.

Метод конечных объёмов

численный метод интегрирования дифференциальных УрЧП в некоторой подобласти (ячейке). Также, как и для метода конечных разностей, производные аппроксимируются конечно-разностными схемами. Является сеточным методом.

Метод конечных элементов

численный метод решения дифференциальных УрЧП, когда в каждом из элементов (ячеек) выбирается функция, аппроксимирующая искомую переменную. Данная функция равна нулю за пределами своего элемента и представляет собой некоторую функцию (например, полином) внутри своего элемента.

Уравнение переноса

Уравнение переноса

дифференциальное уравнение в частных производных, описывающее изменение скалярной величины в пространстве и времени.

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\varphi \boldsymbol{U}) = 0.$$

Уравнение переноса

Распишем откуда появляется это уравнение. Для индивидуального объёма интеграл от скалярной величины не меняется (действительно, если скалярная величина определяет цвет частички, то в индивидуальном объёме сплошной среды количество раскрашенных частичек не поменяется). И количество окрашенных частичек со временем не меняется.

$$\int\limits_{V_{\text{инд}}} \varphi dV = \text{const}, \quad \frac{d}{dt}\int\limits_{V_{\text{инд}}} \varphi dV = 0.$$

В соответствии с формулой дифференцирования по времени интеграла по подвижному объёму получаем:

$$\int\limits_{V} \frac{\partial \varphi}{\partial t} dV + \int\limits_{\Sigma} \varphi \boldsymbol{U_n} d\sigma = 0.$$

Применяем формулу Гаусса-Остроградского:

$$\int\limits_{V} \frac{\partial \varphi}{\partial t} dV + \int\limits_{V} \boldsymbol{\nabla} \cdot (\varphi \boldsymbol{U}) dV = 0.$$

Уравнение переноса

для несжимаемой жидкости в одномерном случае

Уравнение переноса:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\varphi \boldsymbol{U}) = 0.$$

При $\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{U} = 0$, $\boldsymbol{U} = (U, 0, 0)$:

Уравнение переноса для несжимаемой жидкости в одномерном случае

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + U \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0.$$

Аналитическое решение

В случае, если $U = \text{const}$, имеет аналитическое решение:

$$\varphi(x, t) = \varphi_0(x - Ut).$$

Уравнение переноса

аналитическое решение

Для решения, необходимо свести дифференциальное уравнение переноса в частных производных первого порядка к обыкновенному дифференциальному уравнению (ОДУ) вдоль соответствующей кривой пространства-времени, то есть получить уравнение вида

$$\frac{d}{ds}\varphi(x(s), t(s)) = \Phi(U, x(s), t(s)),$$

где $(x(s), t(s))$ — характеристика (кривая пространства-времени).
Производная от сложной функции записывается в виде

$$\frac{d}{ds}\varphi(x(s), t(s)) = \frac{\partial \varphi}{\partial x}\frac{dx}{ds} + \frac{\partial \varphi}{\partial t}\frac{dt}{ds}.$$

Если положить, что $\frac{dx}{ds} = U$, а $\frac{dt}{ds} = 1$, то

$$\frac{d}{ds}\varphi(x(s), t(s)) = \frac{\partial \varphi}{\partial x}\frac{dx}{ds} + \frac{\partial \varphi}{\partial t}\frac{dt}{ds} = U\frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0.$$

Уравнение переноса

аналитическое решение

Вдоль характеристики $(x(s), t(s))$ исходное уравнение превращается в ОДУ

$$\frac{d\varphi}{ds} = \Phi(U, x(s), t(s)) = 0,$$

которое говорит о том, что вдоль характеристик решение постоянное. Таким образом, $\varphi(x(s), t(s)) = \varphi_0(x(0), t(0)) = \varphi_0(x_0, 0)$, где точки $(x(s), t(s))$ и $(x_0, 0)$ лежат на одной характеристике. Тогда для нахождения общего решения достаточно найти характеристики уравнения, решая следующую систему ОДУ:

$$\begin{cases} \dfrac{dt}{ds} = 1, \quad \text{при} \quad t(0) = 0, & \text{получаем} \quad t = s, \\ \dfrac{dx}{ds} = U, \quad \text{при} \quad x(0) = x_0, & \text{получаем} \quad x = Us + x_0 = Ut + x_0, \\ \dfrac{d\varphi}{ds} = 0, \quad \text{при} \quad \varphi(0) = \varphi_0(x_0), & \text{получаем} \quad \varphi(x(t), t) = \varphi_0(x_0, 0) = \varphi_0(x - Ut). \end{cases}$$

В нашем случае, характеристики — это семейство прямых с наклоном U, и решение φ остается постоянным вдоль каждой из характеристик.

Уравнение переноса

аналитическое решение

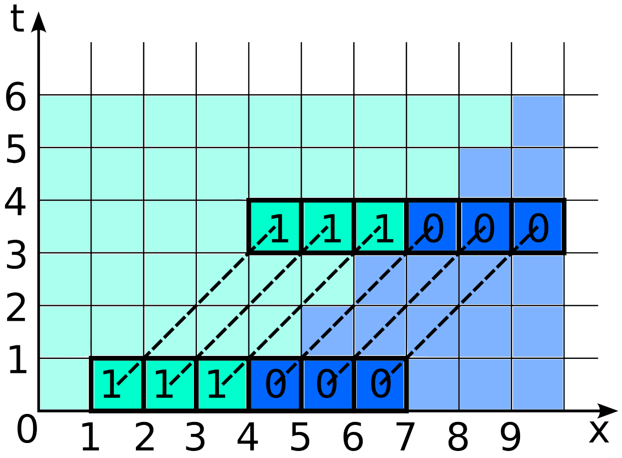
Уравнение переноса для несжимаемой жидкости в одномерном случае

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + U\frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0.$$

В случае, если $U = \text{const}$, имеет аналитическое решение:

$$\varphi(x, t) = \varphi_0(x - Ut),$$

где $x = Ut + x_0$ — уравнение характеристики.

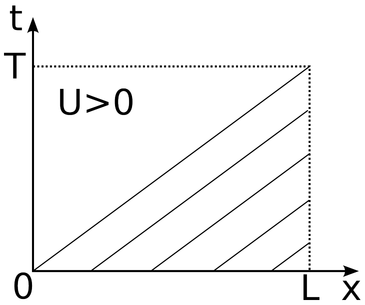


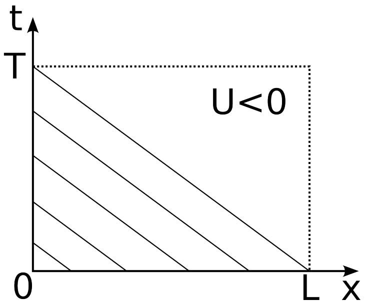
Заданы начальные данные $\varphi(x,0) = \varphi_0(x)$. Так как начальные данные заданы на всей прямой $t = 0$, то характеристика, выпущенная из любой точки полуплоскости (x,t), $t > 0$, пересечёт линию $t = 0$.Поэтому решение в любой момент времени определяется как $\varphi(x,t) = \varphi_0(x - Ut)$.

Уравнение переноса

Начально-краевая задача

Пусть **начальные данные** заданы в ограниченной области: $0 \leq x \leq L$, и требуется определить решение при $t \leq T$, $0 < x \leq L$. Выпустим из каждой точки отрезка $[0, L]$ характеристики. В зависимости от знака U они закроют лишь правую или левую часть прямоугольника $[0 < t \leq T] \times [0 \leq x \leq L]$. Для того, чтобы определить решение во всем прямоугольнике, необходимо задать **краевые условия**. Если $U > 0$, краевые условия при $x = 0$, если $U < 0$, то при $x = L$.





Численное решение уравнений механики сплошной среды

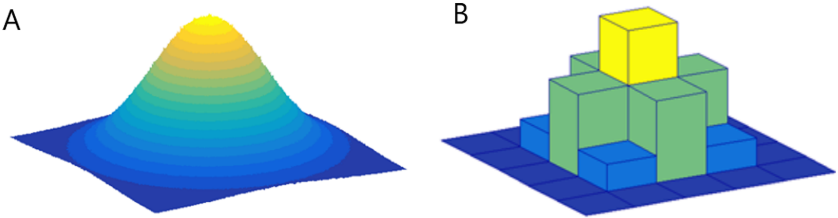
Алгоритм нахождения численного решения

1. Дискретизация рассматриваемой области пространства-времени;
2. Аппроксимация дифференциальных операторов;
3. Составление матрицы коэффициентов;
4. Нахождение решения на временном шаге.

Дискретизация

Дискретизация

разделение пространства или времени на фиксированные по размеру области, точки или отрезки.



Аппроксимация дифференциальных операторов

Производная функции $\varphi = \varphi(x)$

это предел отношения приращения функции $\Delta\varphi$ к приращению аргумента Δx при стремлении Δx к 0.

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta\varphi}{\Delta x}.$$

Аппроксимацией производной

с помощью отношения конечных разностей

$$\frac{\partial\varphi}{\partial x} \approx \frac{\Delta\varphi}{\Delta x}.$$

Аппроксимация дифференциальных операторов

Аппроксимация производной по времени

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\varphi^{n+1} - \varphi^{n}}{dt}$$

Аппроксимация производной по пространству первого порядка

Разность вперёд	Разность назад	Центральная разность
$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{\varphi_{i+1} - \varphi_{i}}{dx}$	$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{\varphi_{i} - \varphi_{i-1}}{dx}$	$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{\varphi_{i+1} - \varphi_{i-1}}{2dx}$

Аппроксимация производной по пространству второго порядка

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \frac{\varphi_{i+1} - 2\varphi_{i} + \varphi_{i-1}}{dx^2}$$

Аппроксимация уравнения переноса

Уравнение переноса для несжимаемой жидкости в одномерном случае при $U = \text{const}$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + U\frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0.$$

Явная аппроксимация против потока уравнения переноса для несжимаемой жидкости в одномерном случае при $U = \text{const} > 0$

$$\frac{\varphi_i^{n+1} - \varphi_i^n}{dt} + U\frac{\varphi_i^n - \varphi_{i-1}^n}{dx} = 0$$

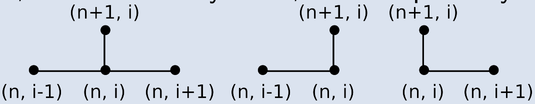
Неявная аппроксимация против потока уравнения переноса для несжимаемой жидкости в одномерном случае при $U = \text{const} > 0$

$$\frac{\varphi_i^{n+1} - \varphi_i^n}{dt} + U\frac{\varphi_i^{n+1} - \varphi_{i-1}^{n+1}}{dx} = 0$$

Схема аппроксимации и её устойчивость

Шаблон разностной схемы

указывает способ образования разностной схемы (на рисунке слева направо: центральная разность, явный левый уголок, явный правый уголок)

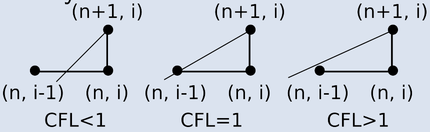


Критерий Куранта-Фридрихса-Леви

При $U > 0$, рассмотрим схему явный левый уголок:

$$\varphi_i^{n+1} = \varphi_i^n - Udt\frac{\varphi_i^n - \varphi_{i-1}^n}{dx} = \varphi_i^n - CFL(\varphi_i^n - \varphi_{i-1}^n).$$

Здесь $CFL = \frac{Udt}{dx}$ — число Куранта. Если $CFL \leq 1$, то схема устойчива, в противном случае — схема неустойчива.



Явная аппроксимация против потока уравнения переноса

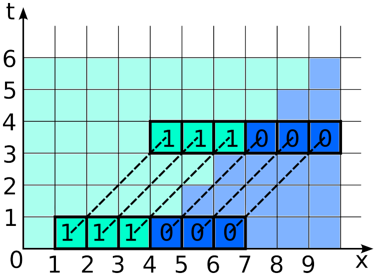
Явная аппроксимация против потока уравнения переноса для несжимаемой жидкости в одномерном случае при $U = \text{const} > 0$

$$\frac{\varphi_i^{n+1} - \varphi_i^n}{dt} + U\frac{\varphi_i^n - \varphi_{i-1}^n}{dx} = 0$$

Решение может быть найдено явно

$$\varphi_i^{n+1} = \varphi_i^n - Udt\frac{\varphi_i^n - \varphi_{i-1}^n}{dx}$$

Решение уравнения переноса явным методом



Пусть $U = 1$, $dx = 1$, $dt = 1$, в момент времени $t = 0$: $\varphi = 1$ при $x < 4$ и $\varphi = 0$ при $x \geq 4$ или в терминах ячеек $\varphi_i^0 = 1$ при $i \leq 3$ и $\varphi_i^0 = 0$ при $i > 3$. Будем называть ячейку i-ой, если она лежит в интервале $i < x \leq i + 1$ и аналогично для t. При

$$\varphi_i^{n+1} = \varphi_i^n - Udt\frac{\varphi_i^n - \varphi_{i-1}^n}{dx}$$

найдем решение для момента времени $t = 1$ для интервала $2 < x \leq 8$.

$$\varphi_2^1 = \varphi_2^0 - Udt\frac{\varphi_2^0 - \varphi_1^0}{dx} = 1 - \frac{1-1}{1} = 1 \qquad \varphi_5^1 = \varphi_5^0 - Udt\frac{\varphi_5^0 - \varphi_4^0}{dx} = 0 - \frac{0-0}{1} = 0$$

$$\varphi_3^1 = \varphi_3^0 - Udt\frac{\varphi_3^0 - \varphi_2^0}{dx} = 1 - \frac{1-1}{1} = 1 \qquad \varphi_6^1 = \varphi_6^0 - Udt\frac{\varphi_6^0 - \varphi_5^0}{dx} = 0 - \frac{0-0}{1} = 0$$

$$\varphi_4^1 = \varphi_4^0 - Udt\frac{\varphi_4^0 - \varphi_3^0}{dx} = 0 - \frac{0-1}{1} = 1 \qquad \varphi_7^1 = \varphi_7^0 - Udt\frac{\varphi_7^0 - \varphi_6^0}{dx} = 0 - \frac{0-0}{1} = 0$$

Неявная аппроксимация против потока уравнения переноса

Явная аппроксимация против потока уравнения переноса

$$\frac{\varphi_i^{n+1} - \varphi_i^n}{dt} + U\frac{\varphi_i^{n+1} - \varphi_{i-1}^{n+1}}{dx} = 0.$$

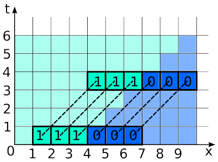
Можем видеть, что данное выражение является линейным алгебраическим уравнением, где значения искомой величины на новом временном слое φ_i^{n+1} являются неизвестными.

Система линейных алгебраических уравнений

Уравнения аппроксимации записываются для каждой из рассматриваемых ячеек, то есть для каждого i из некоторого отрезка $[N, K]$, и образуют систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). Значения искомой величины в каждой из рассматриваемых ячеек являются неизвестными СЛАУ, относительно которых она записывается. Перепишем уравнение, оставив слева неизвестные, а вправо от знака равенства перенесем свободные члены:

$$\varphi_i^{n+1}\left(1 + \frac{Udt}{dx}\right) - \varphi_{i-1}^{n+1}\frac{Udt}{dx} = \varphi_i^n$$

Решение уравнения переноса неявным методом



Пусть $U = 1$, $dx = 1$, $dt = 1$, в момент времени $t = 0$: $\varphi = 1$ при $x < 4$ и $\varphi = 0$ при $x \geq 4$ или в терминах ячеек $\varphi_i^0 = 1$ при $i \leq 3$ и $\varphi_i^0 = 0$ при $i > 3$. Найдем решение для момента времени $t = 1$ для интервала $2 < x \leq 8$ если $\varphi_i^{n+1}\left(1 + \frac{Udt}{dx}\right) - \varphi_{i-1}^{n+1}\frac{Udt}{dx} = \varphi_i^n$.

$$
\begin{cases}
2\varphi_2^1 - \boldsymbol{\varphi_1^0} = \varphi_2^0 \\
2\varphi_3^1 - \varphi_2^1 = \varphi_3^0 \\
2\varphi_4^1 - \varphi_3^1 = \varphi_4^0 \\
2\varphi_5^1 - \varphi_4^1 = \varphi_5^0 \\
2\varphi_6^1 - \varphi_5^1 = \varphi_6^0 \\
2\varphi_7^1 - \varphi_6^1 = \varphi_7^0
\end{cases}
\Leftrightarrow
\begin{cases}
(2)\varphi_2^1 + (0)\varphi_3^1 + (0)\varphi_4^1 + (0)\varphi_5^1 + (0)\varphi_6^1 + (0)\varphi_7^1 = 2 \\
(-1)\varphi_2^1 + (2)\varphi_3^1 + (0)\varphi_4^1 + (0)\varphi_5^1 + (0)\varphi_6^1 + (0)\varphi_7^1 = 1 \\
(0)\varphi_2^1 + (-1)\varphi_3^1 + (2)\varphi_4^1 + (0)\varphi_5^1 + (0)\varphi_6^1 + (0)\varphi_7^1 = 0 \\
(0)\varphi_2^1 + (0)\varphi_3^1 + (-1)\varphi_4^1 + (2)\varphi_5^1 + (0)\varphi_6^1 + (0)\varphi_7^1 = 0 \\
(0)\varphi_2^1 + (0)\varphi_3^1 + (0)\varphi_4^1 + (-1)\varphi_5^1 + (2)\varphi_6^1 + (0)\varphi_7^1 = 0 \\
(0)\varphi_2^1 + (0)\varphi_3^1 + (0)\varphi_4^1 + (0)\varphi_5^1 + (-1)\varphi_6^1 + (2)\varphi_7^1 = 0
\end{cases}
$$

Решение уравнения переноса неявным методом

Используем матричный вид $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$.

Здесь $\boldsymbol{x} = (\varphi_2^1, \varphi_3^1, \varphi_4^1, \varphi_5^1, \varphi_6^1, \varphi_7^1)$, $\boldsymbol{b} = (2, 1, 0, 0, 0, 0)$, $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$.

Для нахождения $\boldsymbol{x}$ надо вычислить обратную матрицу:

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 0.5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.25 & 0.5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.125 & 0.25 & 0.5 & 0 & 0 & 0 \\ 0.0625 & 0.125 & 0.25 & 0.5 & 0 & 0 \\ 0.03125 & 0.0625 & 0.125 & 0.25 & 0.5 & 0 \\ 0.015625 & 0.03125 & 0.0625 & 0.125 & 0.25 & 0.5 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0.5 \\ 0.25 \\ 0.125 \\ 0.0625 \end{pmatrix}.$$

Решение уравнения переноса неявным методом

Можем видеть появление размытия ступеньки решения, что говорит, о недостатке численного метода.

Для исправления данной проблемы производная по пространству берется не в центрах ячеек, а на границах, тогда размытие локализуется в соседних со ступенькой ячейках.

Для полного избавления от размытия также вводится регуляризационные члены.

Разреженная матрица коэффициентов

Матрица коэффициентов $\boldsymbol{A}$ — **разреженная**.

Разреженная матрица

матрица с преимущественно нулевыми элементами. В противном случае, если большая часть элементов матрицы ненулевые, матрица считается **плотной**.

При хранении и преобразовании разрежённых матриц в компьютере используются специальные алгоритмы и структуры данных, которые учитывают разрежённую структуру матрицы.

Существует несколько способов хранения (представления) разреженных матриц, различающихся:

- удобством изменения структуры матрицы (активно используется косвенная адресация) — это структуры в виде списков и словарей,
- скоростью доступа к элементам и возможной оптимизацией матричных вычислений (чаще используются плотные блоки-массивы, увеличивая локальность доступа к памяти).

Способы хранения (представления) разреженных матриц

Словарь по ключам (DOK — Dictionary of Keys) строится как словарь, где ключ — это пара (строка, столбец), а значение — это соответствующий строке и столбцу элемент матрицы.

Список списков (LIL — List of Lists) строится как список строк, где строка — это список узлов вида (столбец, значение).

Список координат (COO — Coordinate list) хранится список из элементов вида (строка, столбец, значение).

Сжатое хранение строкой (CSR — Compressed Sparse Row, CRS — Compressed Row Storage, Йельский формат) когда мы представляем исходную матрицу в виде трёх массивов: массива значений, массива индексов столбцов, массива индексов строк.

Задача

Решить явным и неявным методом уравнение конвекции-диффузии:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + U\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\kappa \frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)$$

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!

Список литературы