Matematičke metode fizike III

Larisa Zoranić

2023/24

Bilješke s predavanja

Literatura

[1] Morten Hjorth-Jensen: *Computational Physics*, University of Oslo, 2007, 2010, 2015.

[2] V. Hari i dr: *Numerička analiza*, skripta, Sveučilište u Zagrebu PMF, 2004.

[3] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Brian P. Flannery: *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, SE, Cambridge University Press, USA, 2002.

[4] Leandra Vranješ Markić: *Matematičke metode fizike 1*, skripta, Sveučilište u Splitu PMFST, 2009.

[5] Saša Krešić-Jurić: Parcijalne diferencijalne jednadžbe, skripta, Sveučilište u Splitu PMFST, 2014.

[6] Ivica Smolić: *Matematičke metode fizike*, skripta, Sveučilište u Zagrebu, PMF 2020.

8 Parcijalne diferencijalne jednadžbe (PDJ)

Diferencijalne jednadžbe su osnovni matematički alat za opis procesa u prirodi, tehnici, ekonimiji i šire. Ovi modeli često uključuju ovisnosti o više različitih parametara što definira parcijalne diferencijalne jednadžbe. U sljedećem poglavlju opisane su neke od metoda numeričkog riješavanja parcijalnih diferencijalnih jednadžbi kroz primjere difuzijske i valne jednadžbe.

8.1 Uvod u parcijalne diferencijalne jednadžbe

8.1.1 Matematička definicija

Parcijalne diferencijalne jednažbe (PDJ) definiraju ponašanje funkcije u koja ovisi o dvije ili više nezavisnih varijabla i sadrže forme koje uključuju parcijalne derivacije funkcije u, samu funkciju u i varijable o kojima funkcija ovisi. Općenito je nepoznata funkcija preslikavanje $u : I \to R$, gdje je $I \subseteq R^n$, a $n \geq 2$ predstavlja broj nezavisnih varijabli o kojima ona ovisi. Neka je $u \equiv u(x_1, x_2, ..., x_n)$, $x_1, x_2, ..., x_n$ n nezavisnih varijabli, a parcijalne derivacije funkcije u označene sa

$$u_{x_i} = \frac{\partial u}{\partial x_i}, u_{x_i x_j} = \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j}... \tag{8.1}$$

pri čemu red parcijalne derivacije odgovara broju indeksa x_i i x_j na funkciji u.
Opći oblik jednadžbe je:

$$F(x_1, x_2, ..., x_n, u, u_{x_1}, ..., u_{x_n}, u_{x_1 x_2}...) = 0 \tag{8.2}$$

pri čemu je red parcijalne diferencijalne jednadžbe red najviše derivacije u jednadžbi. Na primjer za $n = 2$ općenita parcijalna diferencijalna jednadžba prvog reda ima oblik:

$$G(x_1, x_2, u, u_{x_1}, u_{x_2}) = 0 \tag{8.3}$$

a općenita PDJ drugog reda za $n = 2$ je

$$H(x_1, x_2, u, u_{x_1}, u_{x_2}, u_{x_1 x_1}, u_{x_1 x_2}, u_{x_2 x_2}) = 0 \tag{8.4}$$

gdje su F, G i H neke funkcije neprekidne u svim svojim argumentima.

8.1.2 Primjeri PDJ iz fizike

Parcijalne diferencijalne jednadžbe drugog reda često opisuju ponašanje fizikalnih sustava, pri čemu funkcije ovise o prostornim varijablama x, y, z i vremenskoj varijabli t.
Valna jednadžba ima oblik

$$u_{tt} - c^2 \bigtriangledown^2 u = 0 \tag{8.5}$$

pri čemu Lapaceov operator je

$$\bigtriangledown^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{8.6}$$

Ova jednadžba opisuje ponašanje valova na žici, zvučnih valova, valova na površini mora, elektromagnetskih valova i drugih. Na primjer, ako je $u(x, y, z, t)$ tlak zraka u točki prostora (x, y, z) u trenutku t i c brzina zvuka, jednadžba (8.5) opisuje širenje zvučnih valova. Ista jednažba opisuje širenje

elektromagnetskih valova kada je funkcija u potencijal elektičnog polja $\varphi(x, y, z, t)$, a konstanta c brzina svjetlosti.
Toplinska jednadžba oblika

$$u_t - a \bigtriangledown^2 u = 0 \tag{8.7}$$

opisuje širenje topline u prostoru u kojem nema izvora topline, funkcija u je temperatura $T(x, y, z, t)$ i konstanta a je termička vodljivost κ. Isti oblik jednadžbe naziva se i **difuzijska jednadžba** koja opisuje tok mase neke komponentne mješavine koji nastaje zbog razlike u raspodjeli čestica u prostoru. U difuzijskoj jednadžbi funkcija u je koncentracija $c(x, y, z, t)$, a konstanta a je difuzijski koeficijent D.
Laplaceova jednadžba opisuje elektrostatski potencijal $\varphi(x, y, z)$ u vakuumu (ili prostoru koji ne sadrži naboje)

$$\bigtriangledown^2 \varphi = 0 \tag{8.8}$$

dok **Poissonova jednadžba** uključuje gustoću naboja $\rho_e(x, y, z)$

$$\bigtriangledown^2 \varphi = -4\pi\rho_e \tag{8.9}$$

Primjetimo da Laplaceova jednadžba opisuje širenje topline u uvjetima stacionarnog stanja ($u_t = 0$).

Osnovna jednadžba kvantne mehanike je **Schrodingerova jednadžba**

$$-\frac{\hbar}{2m} \bigtriangledown^2 \psi + V(\mathbf{r}) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi \tag{8.10}$$

Rješenje jednadžbe je valna funkcija $\psi(x, y, z, t)$ koja opisuje sustav u polju potencijalne energije $V(\mathbf{r})$. Izvod Schrodingerove jednadžbe slijedi zamjenu opservabli s operatorima

$$\mathbf{p} \to -i\hbar\bigtriangledown$$

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

u nerelativističkom izrazu za energiju čestice mase m i količine gibanja $\mathbf{p}$ i potencijalne energije V

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V.$$

8.1.3 Podjela PDJ

Linearne PDJ su one jednadžbe za koje koefijecijenti uz derivacije ovise samo o nezavisnim varijablama $x_1, x_2, ..., x_n$, a ne o samoj funkciji u ili njenim derivacijama. Na primjer Eulerova jednadžba

$$xu_x + yu_y - nu = 0,$$

je linearna jednadžba prvog reda. Primjer linearne jednadžbe drugog reda je oblik

$$f(x, y)u_{xx} + g(x, y)u_y + h(x, y)u = 0$$

Kvazilinearna PDJ je ona za koju se parcijale derivacije najvišeg reda u jednadžbi pojavljuju linearno s koefcijentima koji su funkcije nezavisnih varijabli, same funkcije i njenih parcijanih derivacija nižeg reda. Primjer kvazilinearne PDJ je neviskozna Burgersova jednadžba

$$u_t + f(u)u_x = 0$$

Ostale PDJ nazivamo **nelinearnim jednadžbama**, na primjer

$$u_x u_{xx}^2 + xuu_y = sin(y)$$

$$(u_x)^2 + (u_y)^2 = 1$$

Općenito linearna jednadžba drugog reda ima oblik:

$$\sum_{i,j=1}^{n} A_{i,j} u_{x_i x_j} + \sum_{i=1}^{n} B_i u_{x_i} + Fu = G \tag{8.11}$$

pri čemu su $A_{i,j}, B_i, F$ i G funkcije varijabli x. Za tzv. klasična rješenja u vrijedi $u_{x_i x_j} = u_{x_j x_i}$ i $A_{i,j} = A_{j,i}$. Jednadžba je homogena za $G = 0$, odnosno nehomogena za $G \neq 0$.
Diferencijalnu jednadžbu (8.11) možemo opisati u obliku

$$L[u] = G \tag{8.12}$$

pri čemu je operator L

$$L \equiv \sum_{i,j=1}^{n} A_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{i=1}^{n} B_i \frac{\partial}{\partial x_i} + F \tag{8.13}$$

(operator F je definiran množenjem funkcije s vrijednosti F). Primjetimo da je operator L linearan te vrijedi princip superpozicije. Ako su rješenja u_1 i u_2 rješenja jednadžbe

$$L[u_i] = G_i, i = 1, 2$$

onda je linearna kombinacija $u = a_1 u_1 + a_2 u_2$, $a_i \in R$ rješenje jednadžbe

$$L[u] = a_1 L[u_1] + a_2 L[u_2] = a_1 G_1 + a_2 G_2$$

Ako su rješenja u_1 i u_2 rješenja homogene jednadžbe $L[u_i] = 0, i = 1, 2$, onda je svaka linearna kombinacija a $u = a_1 u_1 + a_2 u_2$ rješenje za $L[u] = 0$.

8.1.4 Početni i rubni uvjeti

Parcijalne diferencijalne jednadžbe općenito imaju beskonačno rješenja, te se jedinstveno rješenje nameće uz zadavanjem početnih i rubnih uvjeta koje mora zadovoljiti funkcija u i njene derivacije.
Za opis ponašanja fizikalnih sustava nepoznata funkcija u je funkcija prostornih varijabla i vremenske varijable $u \equiv u(x, y, z, t)$. **Početni uvjet** je zadavanje oblika funkcije u i njenih derivacija u početnom vremenskom trenutku $t = t_0$. **Rubni uvjeti** su zadavanje vrijednosti funkcije u i njenih derivacija na rubovima područja na kojem tražimo rješenje.
Pogledajmo primjer modela za opis širenja vala na žici duljine L, što opisuje (1+1)-dim valna jednadžba

$$u_{tt} - c^2 u_{xx} = 0$$

Vrijednost varijable x je zadana za $0 < x < L$, početni vremenski trenutak neka je $t_0 = 0$, a funkcija $u(x, t)$ je amplituda vala u točki x i vremenu t. Ova jednadžba zahtjeva poznavanje početnog položaja i početne brzine žice u svakoj točki $x \in [0, L]$, te zadajemo

$$u(x, t = t_0 = 0) = f(x)$$

$$u_t(x, t = t_0 = 0) = g(x)$$

pri čemu funkcija $f(x)$ je početni oblik žice, a funkcija $g(x)$ je početna brzina, npr. ako žica miruje funkcija $g(x) = 0$. Rubni uvjeti su zadani ponašanjem funkcije u na granici sustava odnosno na rubovima žice. Na primjer ako je žica učvršena u točkama na rubovima $x = 0$ i $x = L$ onda funkcija u zadovoljava **Dirichletov rubni uvjet**

$$u(0,t) = u(L,t) = 0, t \geq 0.$$

Ako krajevi žice slobodno titraju okomito na os x, onda derivacija amplitude iščezava u točkama $x = 0$ i $x = L$ te funkcija u zadovoljava **Neumannov rubni uvjet**

$$u_x(0,t) = u_x(L,t) = 0, t \geq 0.$$

Za primjer žice savinute u oblik kružnice tako da vrijedi da su točke $x = 0$ i $x = L$ jednake, funkcija u zadovoljava **periodičke uvjete**

$$u(0,t) = u(L,t)$$

$$u_x(0,t) = u_x(L,t)$$

za svaki vremenski trenutak $t \geq 0$. Rubni uvjeti mogu biti zadani kombinacijom Dirichletovog i Neumannovog uvjeta, npr. da je samo jedan kraj žice učvršćen, dok drugi kraj je slobodan i giba se okomito na os x.

8.1.5 Metode rješavanja PDJ

Općenito rješavanje parcijalnih diferencijalnih jednadžbi je vrlo složen problem, te se samo u nekim jednostavnijim slučajevima koristi metoda direktne integracije ili uvođenje novih varijabli.
Metoda separacije varijabli je kada funkciju $u(x, y...)$ napišemo kao umnožak zasebnih funkcija, od kojih svaka ovisi samo o jednoj varijabli

$$u(x, y...) = X(x)Y(y)...$$

Uvrstimo ovaj izraz u PDJ, te odvajamo dio koji ovisi o samo jedoj varijabli na jednu stranu, a ostale izraze na drugu stranu jednadžbe. Ova jednakost je ispunjena samo ako su obje strane konstante, jednake tzv. separacijskoj konstanti. Postupak ponavljamo dok početnu PDJ ne svedemo na skup razdvojenih običnih diferencijalnih jednadžbi.
Važno je teorijsko pitanje kada je PDJ uz zadane početne i rubne uvjete dobro postavljen matematički problem. Ovo pitanje je razmatrao francuski matematičar Jacques Hadamard (1865-1963). Prema njegovoj definiciji **problem je dobro postavljen** ako zadovoljava sljedeća tri uvjeta:

- **egzistencija**: problem ima rješenje,
- **jedinstvenost**: rješenje problema je jedinstveno za zadane početne i rubne uvjete,
- **stabilnost**: rješenje jednadžbe na neprekidni način ovisi o parametrima jednadžbe i rubnim i početnim uvjetima.

U fizikalnim modelima moguće je da se kao početni i rubni uvjeti koriste mjereni podaci, koji sadrže grešku mjerenja, te ova greška može bitno utjecati i na točnost rješenja PDJ. Znamo da i svaki numerički izračun sadrži numeričke greške, te se razmatraju točnost i stabilnost numeričkih rješenja PDJ.

8.2 Numeričke metode rješavanja parcijalnih diferencijalnih jednadžbi

Dva su različita pristupa numeričkom riješavanju PDJ **metoda konačnih razlika (diferencija) i metoda konačnih elemenata**. U metodi konačnih razlika derivacije funkcije se aproksimiraju konačnim razlikama, a funkcija u se računa na konačnom broju ekvidistantnih točaka u n-dimenzionalnom prostoru. Na primjer za (1+1)-dim PDJ ($n = 2$) funkcija $u(x,t)$ se računa u čvorovima mreže koji su definirani prostornim i vremenskim korakom. Metoda konačnih elemenata se temelji na drugačijem principu pri čemu diskretizira prostor funkcije u na male konačne elemente za koje izražava funkciju u pomoću linearne kombinacije osnovnih funkcija iz odabranog skupa najčešće polinomskih funkcija.

8.2.1 Metoda konačnih razlika

Metode koje koristimo za numeričko riješavanje PDJ su metoda konačnih razlika i to u obliku tri različita pristupa:

- eksplicitne - direktne metodu
- implicitne - indirektne metode
- Crank-Nicolsonovu metodu - kombinacija eksplicitne i implicitne metode

Metode rješavanje opisat ćemo za (1+1)-dim PDJ oblika jednadžbe difuzije

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} = \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} \tag{8.14}$$

Primjetimo da smo izostavili konstantu a, koju je potrebmo dodati ako je zadana uz problem koji riješavamo.
Uvodimo oznake parcijalnih derivacija $\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} = u_{xx}$ i $\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = u_t$ u PDJ

$$u_{xx} = u_t \tag{8.15}$$

Zadajemo početne i rubne uvjete:

- rubni uvjeti - $0 \leq x \leq L$, $u(0,t) = a(t)$ i $u(L,t) = b(t)$ za $t \geq 0$
- početni uvjeti - $t = 0$ funkcija $u(x,0) = f(x)$ za $0 \leq x \leq L$

Rješavamo jednadžbu za dva tipa koraka, korak $\triangle x$ za prostor koordinata, i korak $\triangle t$ za prostor vremena. Prostor koordinata je dobro definiran uvjetom $0 \leq x \leq L$, te se $\triangle x$ odabire na način:

$$\triangle\, x = \frac{L}{N+1} \tag{8.16}$$

pri čemu je N broj točaka (čvorova) u kojima se računa vrijednost funkcije $u(x,t)$.
Vremenski korak $\triangle t$ odabiremo ovisno o fizikalnom problemu, a ukupni broj koraka M definira ukupno vrijeme $T = M \triangle t$. Vrijednost funkcije nakon i-koraka po x i j-koraka po t zadana je u točkama:

- $t_j = j \triangle t \; j \geq 0$
- $x_i = i \triangle x \; 0 \leq i \leq N+1$

$u(x_i,t_j)$ je vrijednost funkcije u točki x_i u vremenskom trenutku t_j.

8.2.2 Shema eksplicitne metode

Izrazimo parcijalne derivacije preko forma za numeričko deriviranje:

$$u_t = \frac{u(x,t+\triangle t) - u(x,t)}{\triangle t} + O(\triangle t) \approx \frac{u(x_i,t_{j+1}) - u(x_i,t_j)}{\triangle t} \tag{8.17}$$

$$u_{xx} = \frac{u(x+\triangle x,t) - 2u(x,t) + u(x-\triangle x,t)}{\triangle x^2} + O(\triangle x^2) \approx \frac{u(x_{i+1},t_j) - 2u(x_i,t_j) + u(x_{i-1},t_j)}{\triangle x^2} \tag{8.18}$$

Difuzijska jednadžba izražena preko numeričkih aproksimacija prve i druge derivacije je:

$$\frac{u(x_{i+1},t_j) - 2u(x_i,t_j) + u(x_{i-1},t_j)}{\triangle x^2} = \frac{u(x_i,t_{j+1}) - u(x_i,t_j)}{\triangle t} \tag{8.19}$$

Uvodimo parametar $\alpha = \dfrac{\triangle t}{\triangle x^2}$ i napišemo jednadžbu (8.19), tako da vrijednost funcije u u slijedećem vremenskom koraku $j+1$ izrazimo preko vrijednosti funkcije u u prethodnom vremenskom koraku j:

$$u_{i,j+1} = \alpha u_{i+1,j} + (1-2\alpha)u_{i,j} + \alpha u_{i-1,j} \tag{8.20}$$

Primjetimo da je vrijednost funkcije $u_{i,j+1}$ definirana vrijednostima za tri prostorne točke $i-1$, i i $i+1$ u vremenskom koraku j. Neke je zadani početni uvjet funkcija $g(x)$. Prvi korak u riješavanju je pridruživanje početne vrijednosti za $t = 0$:

$$u_{i,0} = g(x_i)$$

U slijedećem koraku računamo vrijednosti $u_{i,1}$:

$$u_{i,1} = \alpha u_{i+1,0} + (1-2\alpha)u_{i,0} + \alpha u_{i-1,0} = \alpha g(x_{i+1}) + (1-2\alpha)g(x_i) + \alpha g(x_{i-1})$$

Slijedeće vrijednosti $u_{i,2}$ računamo iz vrijednosti $u_{i,1}$ prema formuli (8.20).

$$u_{i,2} = \alpha u_{i+1,1} + (1-2\alpha)u_{i,1} + \alpha u_{i-1,1}$$

Vrijednosti se računaju do zadanog ukupnog vremena $T = M \cdot \triangle t$. Metoda se naziva eksplicitna budući da se svaki sljedeći vremenski korak računa direktno iz vrijednosti funkcije u vremenskog prethodnog koraka.

Posebni slučaj je kada su zadani rubni uvjeti $a(t) = b(t) = 0.0$ te jednadžbu (8.20) možemo napisati u matričnoj formi. Definiramo vektor V_j

$$V_j = \begin{bmatrix} u_{1,j} \\ u_{2,j} \\ \dots \\ u_{N,j} \end{bmatrix}$$

koji sadrži vrijednosti funkcije u za N točaka, dok su rubne točke $u_{0,j} = u_{N+1,j} = 0.0$ te se jednadžba (8.20) može izraziti u matričnim obliku

$$V_{j+1} = A \cdot V_j$$

pri čemu je A tridijagonalna matrica reda N:

$$A = \begin{bmatrix} 1-2\alpha & \alpha & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \alpha & 1-2\alpha & \alpha & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \alpha & 1-2\alpha & \alpha \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \alpha & 1-2\alpha \end{bmatrix}$$

Zadani oblik definira rješenje PDJ

$$V_{j+1} = A \cdot V_j = A \cdot (A \cdot V_{j-1}) = ... = A^{j+1} \cdot V_0$$

pri čemu vektor V_0 sadrži vrijednosti funkcije $f(x_i)$.
Pri riješavanju eksplicitne metode nije potrebno koristiti matričnu formu, budući da je jednadžba (8.20) vrlo jednostavna za numeričku implementaciju.

8.2.3 Shema implicitne metode

Izrazimo numeričke derivacije:

$$u_t \approx \frac{u(x_i, t_j) - u(x_i, t_{j-1})}{\triangle t} \tag{8.21}$$

$$u_{xx} \approx \frac{u(x_{i+1}, t_j) - 2u(x_i, t_j) + u(x_{i-1}, t_j)}{\triangle x^2} \tag{8.22}$$

što definira oblik difuzijske jednadžbe:

$$\frac{u(x_{i+1}, t_j) - 2u(x_i, t_j) + u(x_{i-1}, t_j)}{\triangle x^2} = \frac{u(x_i, t_j) - u(x_i, t_{j-1})}{\triangle t} \tag{8.23}$$

uz parametar $\alpha = \dfrac{\triangle t}{\triangle x^2}$ jednadžba postaje:

$$u_{i,j-1} = -\alpha u_{i+1,j} + (1 + 2\alpha)u_{i,j} - \alpha u_{i-1,j} \tag{8.24}$$

Rješavamo jednadžbu uz početan uvjet definiran vrijednostima funkcije $g(x)$ i uz rubne uvjete $a(t) = b(t) = 0.0$. Iskoristimo matričnu formu za V_j i napišimo rješenje u obliku

$$V_{j-1} = A \cdot V_j$$

pri čemu je matrica A jednaka:

$$A = \begin{bmatrix} 1+2\alpha & -\alpha & 0 & ... & 0 & 0 \\ -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha & ... & 0 & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & ... & -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha \\ 0 & 0 & ... & 0 & -\alpha & 1+2\alpha \end{bmatrix}$$

Na sličan način kao i za eksplicitnu shemu možemo naći rješenje, preko inverza matrice A^{-1}:

$$V_j = A^{-1} \cdot V_{j-1} = A^{-1} \cdot (A^{-1} \cdot V_{j-2}) = ... = A^{-j} \cdot V_0$$

Za ovaj račun potrebno je naći inverz matrice A, što je računalno zahtjevan problem i jako ovisan o veličini matrice N. Brži pristup je riješavanje sustava jednadžbi $AX = B$ pri čemu je vektor nepoznanica X jednak vektoru V_{j+1}, matrica A odgovara matrici koja sadrži koeficijente uz nepoznanice, dok je vektor slobodnih koeficijenata B sada zadan s vrijednostima vektora V_{j-1}. Matrica A je tridijagonalna matrica, te možemo koristiti Gauss-Jordanuvu metodu za slučaj tridijagonalne matrice, što dodatno ubrzava numerički račun.
Ova metoda se naziva implicitnom, budući da se na indirektan način izražava vrijednosti prethodnog vremenskog koraka (vekor V_{j-1}) preko vrijednosti slijedećeg koraka (vektor V_j).

8.2.4 Shema Crank-Nicolsonove metode

Crank-Nicolsonova metoda uključuje eksplicitnu i implicitnu shemu. Uvodimo parametra φ, te izrazimo difuzijsku jednažbu u formi:

$$\frac{\varphi}{\triangle x^2}(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) + \frac{1-\varphi}{\triangle x^2}(u_{i+1,j-1} - 2u_{i,j-1} + u_{i-1,j-1}) = \frac{1}{\triangle t}(u_{i,j} - u_{i,j-1}) \quad (8.25)$$

Odabir parametra φ definirati će izraze za različite sheme:

- $\varphi = 0$ - eksplicitna shema
- $\varphi = 1$ - implicitna shema
- $\varphi = 1/2$ - kombinacija eksplicitne i implicitne metode - Crank-Nicolsonova shema

Uvrstimo u jednadžbu (8.25) $\varphi = 1/2$ te razdvojimo članove uz indekse j i $j-1$:

$$-\alpha u_{i+1,j} + (2+2\alpha)u_{i,j} - \alpha u_{i-1,j} = \alpha u_{i+1,j-1} + (2-2\alpha)u_{i,j-1} + \alpha u_{i-1,j-1} \quad (8.26)$$

Napišimo jednadžbu (8.26) u matričnoj formi

$$(2I + \alpha B) \cdot V_j = (2I - \alpha B) \cdot V_{j-1} \quad (8.27)$$

pri čemu je matrica I jedinična matrica reda N, a matrica B jednaka

$$B = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & ... & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & ... & 0 & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & ... & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & ... & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Rješenje se može izraziti u formi:

$$(2I + \alpha B) \cdot V_j = (2I + \alpha B)^{-1} \cdot (2I - \alpha B) \cdot V_{j-1} \quad (8.28)$$

Metoda koja se koristi da bi izbjegli traženja inveza matrice $(2I + \alpha B)$ je kombinacija eksplicitne i implicitne sheme. Problem riješavamo u dva koraka:

- $\tilde{V}_{j-1} = (2I - \alpha B) \cdot V_{j-1}$ - množenje matrica - eksplicitna shema
- $(2I + \alpha B) \cdot V_j = \tilde{V}_{j-1}$ - sustav jednadžbi - implicitna shema

8.2.5 Stabilnost rješenja

Može se primjetiti da je eksplicitna shema jednostavna za numeričku primjenu, ali ona mora ispunjavati dodati uvjet koji definira stabilnost rješenja. Da bi imali stabilno rješenje odnos vremenskog i prostornog koraka, pri primjeni ekspicitne metode, mora zadovoljavati uvjet:

$$\frac{\triangle t}{\triangle x^2} \leq \frac{1}{2} \quad (8.29)$$

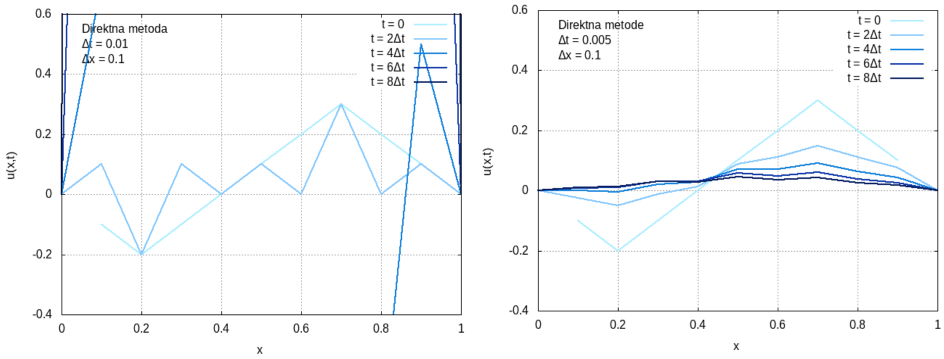
Na primjer, ako je $\triangle x^2 = 0.01$, dobar odabir vremenskog koraka je $\triangle t = 5 \cdot 10^{-5}$. Ovaj uvjet može predstavljati ograničenje u slučaju da zahtjevamo promatranje rješenja na dugim vremenima. Implicitna i Crank-Nicolsonova metoda su stabilne za sve odabire vremenskog i prostornog koraka.

8.2.6 Primjer - numerička rješenja za difuzijsku jednadžbu

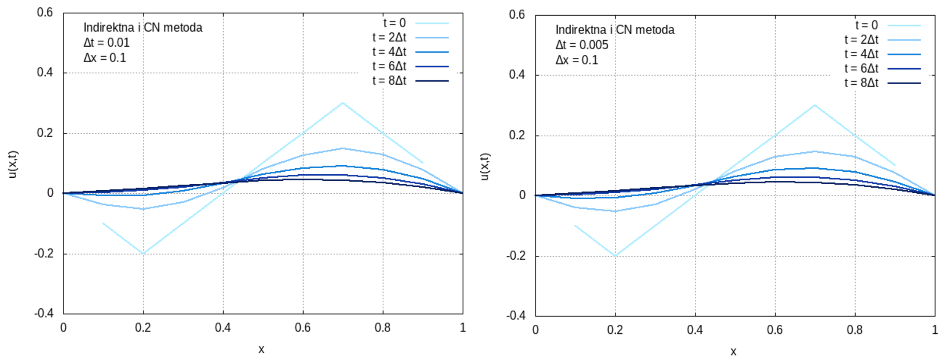
Neka je zadana (1+1)-dim difuzijska jednadžba općeg oblika $u_t = u_{xx}$, a nepoznata funkcija $u(x,t)$ neka je definirana na prostoru vrijednosti $x \in [0,1]$ i $t \geq 0$. Rubni uvjeti su $a(t,0) = 0.0$ i $b(t,1) = 0.0$, a početni uvjet zadani funkcijom $f(x)$

$$u(0,x) = f(x) = \begin{cases} -x & ; \quad x \in \left[\frac{1}{10} \leq x \leq \frac{1}{5}\right] \\ x - \frac{2}{5} & ; \quad x \in \left[\frac{1}{5} < x \leq \frac{7}{10}\right] \\ 1 - x & ; \quad x \in \left[\frac{7}{10} < x \leq 1\right] \end{cases} . \tag{8.30}$$

Na ovom primjeru istražite stabilnost numeričkih rješenja za eksplicitnu, implicitnu i Crank-Nicolsonovu metodu ovisno o odabiru prostornog i vremenskog koraka. Nađite numerička rješenja za zadani korak $\Delta x = 0.1$, te dva odabira vremenska koraka $\Delta t = (\Delta x)^2 = 0.01$ i $\Delta t = \frac{1}{2}(\Delta x)^2 = 0.005$. Grafički prikažite rješenja u vremenima $t = 0.0, 2\Delta t, 4\Delta t, 6\Delta t, 8\Delta t$. Rješenja su prikazana na slikama 8.1 i 8.2.



Slika 8.1: Rješenja za opći oblik difuzijske jednadžbe za zadane početne uvjete 8.30 i $x \in [0,1]$ i $t \geq 0$ u vremenima $t = 0.0, 2\Delta t, 4\Delta t, 6\Delta t, 8\Delta t$ izračunata eksplicitnom metodom. Lijevo rješenja uz odabir prostornog koraka $\Delta x = 0.1$ i vremenskog koraka $\Delta t = 0.01$; desno riješenja za $\Delta x = 0.1$ i $\Delta t = 0.005$



Slika 8.2: Rješenja za opći oblik difuzijske jednadžbe za zadane početne uvjete 8.30 i $x \in [0,1]$ i $t \geq 0$ u vremenima $t = 0.0, 2\Delta t, 4\Delta t, 6\Delta t, 8\Delta t$ izračunata implicitnom i Cranck-Nicolosonovom metodom. Lijevo rješenja uz odabir prostornog koraka $\Delta x = 0.1$ i vremenskog koraka $\Delta t = 0.01$; desno riješenja za $\Delta x = 0.1$ i $\Delta t = 0.005$

8.2.7 Numerička metoda rješavanje valne jednadžbe

Numeričko rješavanje valne jednadžbe slijedi sličan postupak kao i primjer difuzijske jednadžbe. Valna jednadžbe u (1+1)-dim je

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} \tag{8.31}$$

Uz uvođenje anotacije $\dfrac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} = u_{xx}$ i $\dfrac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} = u_{tt}$ jednandžba (8.31) se može skraćeno napisati

$$u_{xx} = u_{tt} \tag{8.32}$$

Primjenom formula za numeričke derivacije:

$$u_{tt} = \frac{u(x, t+\triangle t) - 2u(x,t) + u(x, t+\triangle t)}{\triangle t^2} + O(\triangle t^2) \approx \frac{u(x_i, t_{j+1}) - 2u(x_i, t_j) + u(x_i, t_{j-1})}{\triangle t^2} \tag{8.33}$$

$$u_{xx} = \frac{u(x+\triangle x, t) - 2u(x,t) + u(x-\triangle x, t)}{\triangle x^2} + O(\triangle x^2) \approx \frac{u(x_{i+1}, t_j) - 2u(x_i, t_j) + u(x_{i-1}, t_j)}{\triangle x^2} \tag{8.34}$$

valna jednažba postaje:

$$\frac{u(x_{i+1}, t_j) - 2u(x_i, t_j) + u(x_{i-1}, t_j)}{\triangle x^2} = \frac{u(x_i, t_{j+1}) - 2u(x_i, t_j) + u(x_i, t_{j-1})}{\triangle t^2} \tag{8.35}$$

Uvodimo parametar $\alpha = \dfrac{\triangle t^2}{\triangle x^2}$, te uz malo matematike, dobijemo izraz za eksplicitnu shemu i rješenje $u(x, t_j)$ izraženo preko vrijednosti $u(x, t_j)$ i $u(x, t_{j-1})$:

$$u_{i,j+1} = 2u_{i,j} - u_{i,j-1} + \alpha(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) \tag{8.36}$$

Definiramo početne i rubne uvjete:

- $u_{xx} = u_{tt}$ $0 \leq x \leq L$, $u(0,t) = a(t) = 0.0$ i $u(L,t) = b(t) = 0.0$ za $t \geq 0$
- $t = 0$ - $u(x,0) = g(x)$ za $0 \leq x \leq L$

i uvjet kontinuiranosti valne funkcije na rubnim točkama

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t}|_{t=0} = 0.0 \tag{8.37}$$

Uvjet (8.37) se definira se preko izraza za numeričku derivaciju:

$$u_t \approx \frac{u(x_i, t_{j+1}) - u(x_i, t_{j-1})}{2\triangle t}$$

što vodi formi za $t = 0$

$$u_{t=0} \approx \frac{u(x_i, t_{+1}) - u(x_i, t_{-1})}{2\triangle t} = 0 \Longrightarrow u_{i,+1} = u_{i,-1}$$

Za prvi korak $i = 1$ možemo napisati sljedeće jednakosti:

$$u_{i,1} = 2u_{i,0} - u_{i,-1} + \alpha(u_{i+1,0} - 2u_{i,0} + u_{i-1,0})$$

$$2u_{i,1} = 2u_{i,0} + \alpha(u_{i+1,0} - 2u_{i,0} + u_{i-1,0}) \Longrightarrow u_{i,1} = u_{i,0} + \frac{\alpha}{2}(u_{i+1,0} - 2u_{i,0} + u_{i-1,0})$$

Rješenja za sve vrijednosti $u(x_i, t = 1)$ su jednaka rješenjima za $u(x_i, t = -1)$. Može se pokazati da izraz koji smo dobili za rješenja prvog vremenskog koraka je ekvivalentan općenitom načinu na koji tražimo rješenja, jednadžba (8.36).
izvod na satu
Izrazimo jednadžbu (8.36)

$$u_{i,j+1} = \alpha u_{i+1,j} + 2(1-\alpha)u_{i,j} + \alpha u_{i-1,j} - u_{i,j-1} \tag{8.38}$$

u matričnoj formi:

$$V_{j+1} = A \cdot V_j - V_{j-1} \tag{8.39}$$

Matrica A je definirana:

$$A = \begin{bmatrix} 2(1-\alpha) & \alpha & 0 & ... & 0 & 0 \\ \alpha & 2(1-\alpha) & \alpha & ... & 0 & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & ... & \alpha & 2(1-\alpha) & \alpha \\ 0 & 0 & ... & 0 & \alpha & 2(1-\alpha) \end{bmatrix}$$

Kao i u primjeru za difuzijsku jednadžbu, za eksplicitnu shemu nije potrebno koristiti matrični oblik, budući da je forma (8.38) dovoljna za definiciju numeričkog rješenja.

8.3 Jednadžba širenja topline

Jednadžbe kontinuiteta opisuju očuvanje neke fizikalne veličine na primjer mase, energije ili naboja. Neka je ρ masena gustoća, a veličina $\mathbf{J}$ pripadni tok, odnosno količina mase koja prođe kroz jediničnu površinu u jedinici vremena. Ukupna masa koju sadrži volumen V_0 kojeg zatvara površina A_0 je

$$m = \int_{V_0} \rho dV$$

Masa u jednici volumena koja prolazi kroz element površine $d\mathbf{A}$ (smjer vektora površine definira normala na element površine dA) je

$$\rho \mathbf{v} d\mathbf{A}$$

pri čemu $\mathbf{v}$ je brzina kojom se čestice gibaju, a veličina $\rho\mathbf{v}$ tok mase.
Promjena mase u vremenu je definirana ukupnim tokom kroz zatvorenu površinu A_0

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_0} \rho dV = - \oint_{A_0} \rho \mathbf{v} d\mathbf{A}$$

uz uvjete konstantnog volumena V_0. Primjenom Gaussovog teorema

$$\oint_{A_0} \rho \mathbf{v} d\mathbf{A} = \int_{V_0} \bigtriangledown(\rho \mathbf{v}) dV$$

što vodi do integralne forme

$$\int_{V_0} [\frac{\partial \rho}{\partial t} + \bigtriangledown(\rho \mathbf{v})] dV = 0$$

i diferencijalne forme jednadžbe kontinuteta

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \bigtriangledown(\rho \mathbf{v}) = 0$$

Općenito možemo promatrati količinu fizikalne veličine $F(t)$ u konstantnom volumenu V_0 i površine A_0. Definiramo gustoću veličine $F(t)$ $f(\mathbf{r}, t)$, ukupni tok $\mathbf{J_f}$ te σ_f i s_f gustoće izvora veličine F u (npr. kemijske reakcije) i izvan volumena V_0 (npr. djelovanje vanjskog polja, zračenje ...), što definira jednadžbu

$$\int_{V_0} \frac{\partial f}{\partial t} dV = - \oint_{A_0} \mathbf{J_f} d\mathbf{A} + \int_{V_0} (\sigma_f + s_f) dV$$

uz primjenu Gaussovog teorema, integralne forme

$$\int_{V_0} \frac{\partial f}{\partial t} dV = -\int_{V_0} \bigtriangledown \mathbf{J_f} dV + \int_{V_0} (\sigma_f + s_f) dV \tag{8.40}$$

i diferencijalne forme

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \bigtriangledown \mathbf{J_f} + (\sigma_f + s_f) \tag{8.41}$$

Primjenimo ovaj izraz na energiju, ρe je volumna gustoća energije izražene preko gustoće mase ρ i e količine energije po jedinici mase, te vrijedi

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} = - \bigtriangledown (\rho e \mathbf{v}) - \bigtriangledown \mathbf{J_{de}} - \bigtriangledown \mathbf{J_q} + E_p$$

Ukupna promjena energije ima doprinose od toka mase koji se giba brzinom $\mathbf{v}$, doprinos difuzije $\mathbf{J_{de}}$, toka topline $\mathbf{J_q}$ i izvora E_p.
Za slučaj kada se energija mjenja samo prijenosom topline, odnosno procesom kondukcije, vrijedi

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} = - \bigtriangledown \mathbf{J_q}$$

U jednažbu uključujemo fenomenološki Fourierov zakon koji povezuje tok topline s gradijentom temperature $\mathbf{J_q} = -\kappa \bigtriangledown T$, pri čemu konstanta κ je koeficijent toplinske vodljivosti. Gustoću energije možemo izraziti kao funkciju temperature $\rho e = \rho c_p \bigtriangleup T$ pri čemu je c_p specifični toplinski kapacitet u uvjetima konstantnog tlaka, te vrijedi

$$\frac{\partial(\rho c_p \bigtriangleup T)}{\partial t} = \bigtriangledown[\kappa \bigtriangledown T]$$

uz konstantu $\alpha = \frac{\kappa}{\rho c_p}$

$$\frac{\partial(\bigtriangleup T)}{\partial t} = \alpha \bigtriangledown^2 T$$

što vodi do PDJ oblika (8.15)

$$T(\mathbf{r}, t)_t - \alpha \bigtriangledown^2 T(\mathbf{r}, t) = 0$$

Difuzija opisuje tok čestica (mase) koji pokreće gradijent koncentracije. Ovaj proces je spontan budući da ide u smjeru uspostavljanja ravnotežne koncentracije, odnosno čestice se gibaju iz područja veće koncentracije u područje niže koncentracije. Difuzija ovisi o nasumičnom gibanju čestica i opisuje miješanje ili tok mase bez usmjerenog (drifnog) gibanja. Karakteristika difuzije je dana opisom Brownovog gibanje, te vrijedi da je kvadrat srednjeg pređenog puta čestice proporcionalan vremenu. Fenomenološki opis difuzije dan je Fickovim zakonom $\mathbf{J_d} = -D \bigtriangledown c$, pri čemu je c koncentracija neke komponente u otopini, a D koeficijent difuzije.
Općenito jednadžba koja opisuje transport mase jest

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \bigtriangledown (\rho \mathbf{v}) - \sum_i \bigtriangledown \mathbf{J_{di}} - \bigtriangledown \mathbf{J_v} + M_p$$

pri čemu je doprinos $\rho \mathbf{v}$ tok mase brzinom $\mathbf{v}$, $\mathbf{J_{di}}$ je difuzijski tok i-te komponente u otopini, $\mathbf{J_v}$ tok mase zbog djelovanja vanjskog polja i M_p izvor mase.
Ako je prisutna samo difuzija jednadžbu možemo izraziti zamjenom gustoće sa koncentracijom za neku i-tu komponentu:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \bigtriangledown \mathbf{J_d}$$

Uvrstimo Fickov zakon

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \bigtriangledown[D \bigtriangledown c]$$

što uz konstantu D definira difuzijsku jednadžbu (8.15)

$$\frac{\partial(c(\mathbf{r},t))}{\partial t} - D \bigtriangledown^2 c(\mathbf{r},t) \Longrightarrow c(\mathbf{r},t)_t = D \bigtriangledown^2 c(\mathbf{r},t)$$

8.4 Riješavanje difuzijske jednažbe metodom separacije

Izvod na satu

8.5 Zadaci

Zadatak 8.1. Skicirati na papiru eksplicitnu i implicitnu metodu za 1D difuzijske jednadžbe. Napisati sve korake i pseudokod (skicu algoritma ili blok dijagram).

Zadatak 8.2. Riješiti analitički metodom separacije varijabli 1D difuzijsku jednadžbu za slučaj kada su rubni uvjeti jednaki $u(0,t) = a(t) = 0$ i $u(L,t) = b(t) = 0$.

Zadatak 8.3. (obavezan) Koristeći eksplicitnu shemu, koja je shematski prikazana na slici 8.3 i implicitnu shemu nađite rješenja parcijalne diferencijalne jednadžbe

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = 10^{-2}\ \mathrm{m}^2\ \mathrm{s}^{-1} \cdot \frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial x^2} \tag{8.42}$$

kojom je opisana linearna gustoća čestica.

a) Za rubne uvjete uzmite $\rho(0\ \mathrm{m},t) = \rho(20\ \mathrm{m},t) = 0\ \mathrm{kg\ m}^{-1}$, a za početni uvjet

$$\rho(x,0) = \begin{cases} 5.5\ \mathrm{kg\ /\ m} & ; \quad x \in [2\ \mathrm{m}, 5\ \mathrm{m}] \\ 0.0\ \mathrm{kg\ /\ m} & ; \quad x \notin [2\ \mathrm{m}, 5\ \mathrm{m}] \end{cases}. \tag{8.43}$$

b) Na istom grafu usporedite rješenja dobivena u trenucima $t = j\Delta t$ za $j = 0, 100, 200, 300, 400$ i $\Delta t = 0.5$ s. Što se događa s rubovima i početnom pravokutnom razdiobom gustoće ρ?

c) Koliki Δx ima smisla uzeti?

Zadatak 8.4. (obavezan) Skicirati na papiru Crank-Nicholsonovu shemu, napisati program i izračunati gornji zadatak korištenjem ove metode.

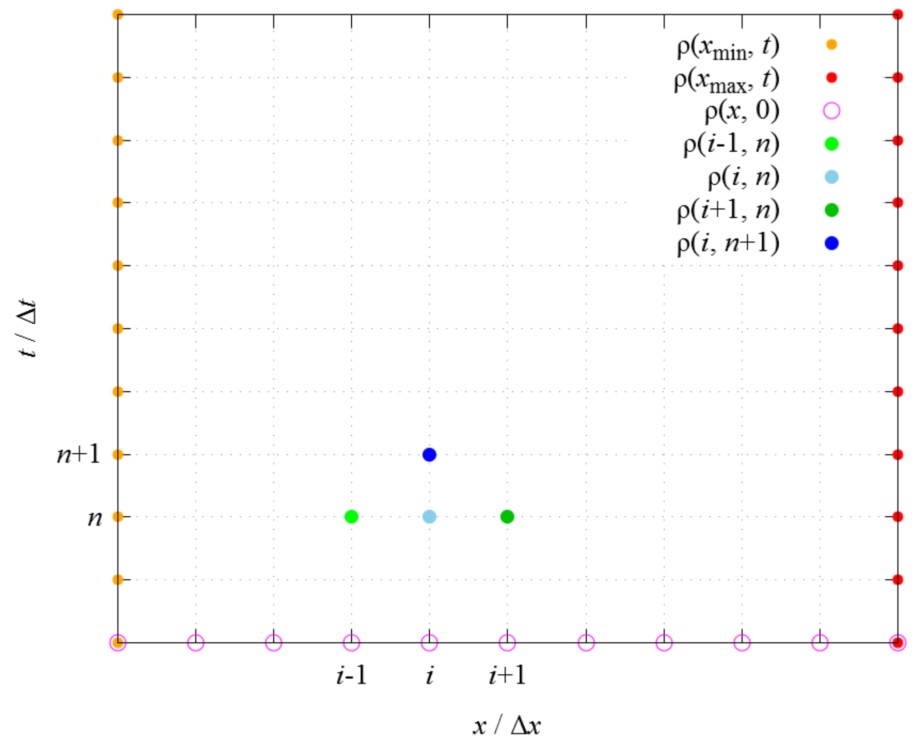
Zadatak 8.5. Eksplictnom metodom naći rješenje valne jednadžbe $u_{xx} = u_{tt}$ za slučaj nametnutih uvjeta:

$$u(0,x) = e^{-400(x-0.3)^2}$$

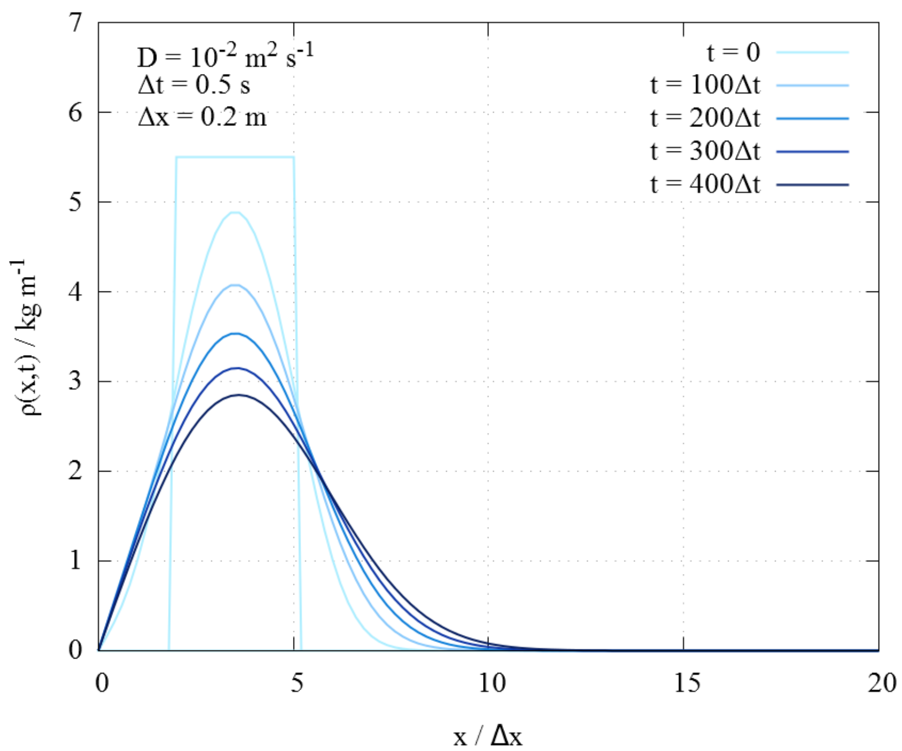
za

$$0 \le x \le 1.0$$

kada vrijedi $u(0,t) = u(1,t) = 0$, te $u_t(x,0) = 0$. Neku su odabrani vremenski i prostorni korak jednaki 0.01. Nacrtati rješenja za $t = 0, 0.05, 0.1, 0.2$.



Slika 8.3: Shematski prikaz rješavanja parcijalne difrencijalne jednadžbe (8.42) eksplicitnom shemom.



Slika 8.4: Prikaz rješenja za zadani zadatak.