



Kandidaatintutkielma
Fysikaalisten tieteiden kandidaattiohjelma
Teoreettinen fysiikka

Diffuusioyhtälön numeerinen ratkaiseminen eksplisiittisellä menetelmällä

Mikko Tuokkola

12.12.2021

Ohjaaja(t): Dosentti, yliopistonlehtori, Antti Kuronen

Tarkastaja(t): Antti Kuronen

HELSINGIN YLIOPISTO
MATEMAATTIS-LUONNONTIETEELLINEN TIEDEKUNTA

PL 64 (Gustaf Hällströmin katu 2a)
00014 Helsingin yliopisto

Tiedekunta — Fakultet — Faculty		Koulutusohjelma — Utbildningsprogram — Degree programme	
Matemaattis-luonnontieteellinen tiedekunta		Fysikaalisten tieteiden kandidaattiohjelma Teoreettinen fysiikka	
Tekijä — Författare — Author			
Mikko Tuokkola			
Työn nimi — Arbetets titel — Title			
Diffusioyhtälön numeerinen ratkaiseminen eksplisiittisellä menetelmällä			
Työn laji — Arbetets art — Level	Aika — Datum — Month and year	Sivumäärä — Sidantal — Number of pages	
Kandidaatintutkielma	12.12.2021	31	
Tiivistelmä — Referat — Abstract			
<p>Diffusio on fysikaalinen prosessi, jossa ainetta siirtyy spontaanisti väkevämmästä pitoisuudesta laimeampaan. Diffusioyhtälö on parabolinen osittaisdifferentiaalinen yhtälö, joka kuvaa makroskooppisella tasolla systeemin hiukkas- tai lämpötilajakauman ajallista muutosta. Yhtälö on pääpiirteittäin samanlainen riippumatta siitä, mikä diffundoituva aine tai ominaisuus on ja tässä tutkielmassa yhtälöä käsitellään muodossa $\frac{\partial C}{\partial t} = D\nabla^2 C$.</p> <p>Diffusioyhtälö on mahdollista ratkaista numeerisesti useilla erilaisilla menetelmillä. Tässä tutkielmassa perehdytään differenssimenetelmistä eksplisiittiseen menetelmään. Menetelmä perustuu yhtälön aika- ja paikkaderivaattojen approksimoimiseen Taylorin polynomien avulla. Eksplisiittisessä menetelmässä huomiodaan vain sarjojen ensimmäiset termit, mikä tekee menetelmästä nopean, mutta aiheuttaa virhettä. Menetelmällä voidaan laskea konsentraatio C paikassa \vec{r} ajanhetkellä $t + \Delta t$, kun konsentraatio paikan lähellä hetkeä aiemmin tiedetään. Tällöin on mahdollista tarkastella systeemin aikakehitystä ja laskea tarkasteltavan pisteen konsentraatio, millä tahansa ajanhetkellä, jos systeemin alkutila ja yhtälön reunaehdot tunnetaan.</p> <p>Tutkielmassa tarkastellaan eksplisiittisen menetelmän antamia tuloksia yksi-, kaksi- ja kolmiulotteisissa esimerkkitapauksissa, jotka voidaan ratkaista sekä analyyttisesti että numeerisesti. Tuloksista voidaan päätellä, että menetelmällä saadaan diffusioyhtälön ratkaisuksi tuloksia, jotka ovat hyvin lähellä analyyttistä ratkaisua. Menetelmän tulosten tarkkuuteen vaikuttaa käytettyjen aika- ja paikka-askelien koko sekä tarkasteltu tilanne. Etenkin paikka-askelen koolla havaitaan olevan merkittävä vaikutus tuloksen tarkkuuteen. Mitä pienempi paikka-askel on, sitä tarkempia myös tulokset ovat. Myös funktion alkutilanteen huomataan vaikuttavan tuloksen laatuun. Jos alkutilanteessa funktio on monimutkainen, numeerinen menetelmä tuottaa vähemmän tarkan tuloksen.</p>			
Avainsanat — Nyckelord — Keywords			
Diffusio, Diffusioyhtälö, Differenssimenetelmä, Eksplisiittinen menetelmä, Numeerinen ratkaiseminen			
Säilytyspaikka — Förvaringsställe — Where deposited			
Muita tietoja — Övriga uppgifter — Additional information			
GitHub: https://github.com/mjtuokko/Diffusion_simulation_explicit_method			

Sisältö

Symboliluettelo	vii
1 Johdanto	1
2 Diffuusioyhtälö	3
2.1 Diffuusioyhtälön johtaminen	3
2.2 Dimensioton yhtälö	4
3 Diffuusioyhtälön numeerinen ratkaiseminen	5
3.1 Diffuusion aikakehitys eksplisiittisellä menetelmällä	5
3.2 Alkuarvojen ja reunaehtojen huomioiminen	8
4 Esimerkkitapaus yksiulotteisesta diffuusioyhtälöstä	11
4.1 Analyttinen ratkaisu	11
4.2 Analyttisen ja numeerisen ratkaisun vertailu	12
5 Esimerkkitapaus kaksiulotteisesta diffuusioyhtälöstä	15
5.1 Analyttinen ratkaisu	16
5.2 Analyttisen ja numeerisen ratkaisun vertailu	16
6 Esimerkkitapaus kolmiulotteisesta diffuusioyhtälöstä	19
6.1 Analyttinen ratkaisu	19
6.2 Analyttisen ja numeerisen ratkaisun vertailu	20
7 Menetelmän arviointi	25
8 Johtopäätökset	29
Kirjallisuutta	31

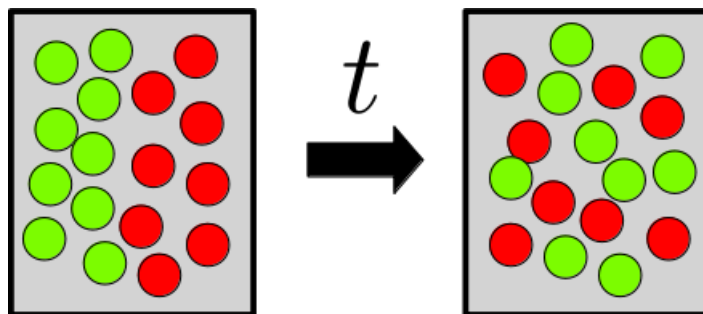
Symboliluettelo

C	Konsentraatio	mol/dm^3
c	Dimensioton konsentraatio	
\vec{r}	Paikkavektori	m
x, y, z	Paikkakoordinaatti	m
\vec{R}	Dimensioton paikkavektori	
X_i, X, Y, Z	Dimensioton paikkakoordinaatti	
t	Aika	s
T	Dimensioton aika	
D	Diffuusiokerroin	m/s^2
J_n	1. lajin Besselin funktio	
$J_{n,0}$	1. lajin Besselin funktion ensimmäinen nollakohta	

1. Johdanto

Diffuusio on fysikaalinen ilmiö, jossa ainetta siirtyy väkevämmästä pitoisuudesta laimeampaan siten, että systeemin sisäiset pitoisuuserot pyrkivät tasoittumaan. Diffuusiolla voidaan kuvata myös systeemin muiden suureiden epätasaisen jakauman tasoittumista, mistä esimerkkinä on lämpötilan tai energian diffuusio. Ilmiötä esiintyy eri luonnontieteissä erilaisissa yhteyksissä ja sillä on laajasti sovelluksia teollisuuden ja teknologian alalla. Diffuusiolla voidaan muun muassa mallintaa neutronien liikettä fysioreaktorissa [5], kaasunvaihtoa keuhkorakkuloissa [6] ja seosatomien lisäämistä piihin puolijohdeteollisuudessa [4].

Diffuusion aiheuttaa mikrotasolla rakenneosasten lämpöliike. Aineen rakenneosasilla on aina liike-energiaa, joka voidaan havaita rakenneosasten liikkeenä. Yhden hiukkasen liikkeen suuntaa voidaan pitää satunnaisena, sillä suunta muuttuu jatkuvasti hiukkasen törmätessä aineen toisiin hiukkasiin. Tällaista liikettä kutsutaan Brownin liikkeeksi. Kun tarkastellaan suurta joukkoa hiukkasia, saadaan tulos, että on todennäköisempää, että hiukkasia siirtyy lämpöliikkeen seurauksena väkevämmästä pitoisuudesta laimeampaan kuin toisin päin. Tämä havaitaan makrotasolla diffuusiona. Koska rakenneosasten lämpöliike ei vaadi ulkoista työtä tai energiaa, tapahtuu diffuusiota spontaanisti. Pitoisuuserojen tasoittuminen lisää makrotilaa vastaavien mikrotilojen lukumäärää eli kasvattaa entropiaa, minkä vuoksi prosessi myös toteuttaa termodynamiikan toisen pääsäännön. [3]



Kuva 1.1: Kaaviokuva Diffuusion aiheuttamasta erilaisten hiukkasten sekoittumisesta.

Diffuusiota voidaan kuvata matemaattisesti diffuusioyhtälön 2.4 avulla. Koska yhtälö on differentiaaliyhtälö, sen ratkaiseminen monimutkaisilla alku- ja reunaehdoil-

la voi olla hyvin hankalaa tai mahdotonta. Tämän vuoksi on tärkeää löytää keinoja ratkaista yhtälö numeerisesti. Tässä tutkielmassa keskitytään diffuusioyhtälön ratkaisuun eksplisiittisellä differenssimenetelmällä, jossa approksimoidaan diffuusioyhtälön derivaatat Taylorin sarjojen avulla [1]. Menetelmän avulla diffuusion aikakehitystä voidaan mallintaa vain systeemin alku- ja reunaehdot tuntemalla, mitkä ovat myös tarvittavat tiedot analyyttisen ratkaisun etsimiseen.

2. Diffuusioyhtälö

Diffuusioyhtälö on parabolinen osittaisdifferentiaalinen yhtälö, joka kuvaa makroskooppisella tasolla tilan hiukkas- tai lämpötilajakauman ajallista muutosta. Kun tarkastellaan konsentraatiota C paikassa \vec{r} ajan hetkellä t , diffuusioyhtälö saa yhtälön 2.1 esittämän muodon. Yhtälön parametri D on diffuusiokerroin, joka kuvaa diffuusion nopeutta ja riippuu tarkasteltavan systeemin ominaisuuksista. Diffuusioyhtälön ratkaisun määrää kussakin tilanteessa tarkasteltavan tilanteen alku- ja reunaehdot.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot [D(\vec{r}, C) \nabla C(\vec{r}, t)] \quad (2.1)$$

2.1 Diffuusioyhtälön johtaminen

Diffuusioyhtälö voidaan johtaa Fickin 1. lain (yhtälö 2.2) ja massan säilymislaista johtuvan jatkuvuusyhtälön (yhtälö 2.3) avulla. Fickin 1. laki kertoo aineen virtauksen voimakkuuden ja suunnan. Fickin 1. lain mukaan ainetta virtaa suuremmasta konsentraatiosta pienempään ja konsentraation virtauksen suuruuteen vaikuttaa aineen ominaisuuksista riippuva diffuusiokerroin D . Tällöin diffundoituvan aineen vuo saadaan diffuusio kertoimen $-D$ ja konsentraation C gradientin tulona. [1]

$$\vec{J} = -D \nabla C \quad (2.2)$$

Massan säilymistä kuvaa jatkuvuusyhtälö, jonka mukaan massan siirtyessä systeemin eri osien välillä, sen kokonaismäärän on pysyttävä suljetussa systeemissä vakiona. Tämä tarkoittaa sitä, että systeemin ainemäärä paikassa \vec{r} muuttuu ajassa saman verran kuin paikkaan virtaa ainetta sen lähistöltä. Tämä voidaan matemaattisesti ilmaista yhtälöllä 2.3. On kuitenkin huomattava, että kaikissa erikoistapauksissa, kuten neutronien diffuusiassa ydinreaktiossa massa ei tällaisenaan säily. Tällöin jatkuvuusyhtälöön on lisättävä termi, joka kertoo kuinka suuri massan lähde tai nielu pisteessä on [5].

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla \cdot (C \vec{v}) = -\nabla \cdot \vec{J} \quad (2.3)$$

Diffuusioyhtälö, joka myös Fickin 2. lakina tunnetaan, voidaan johtaa sijoittamalla Fickin 1. laki (yhtälö 2.2) aineen virtauksen jatkuvuusyhtälöön (yhtälö 2.3). Yleensä diffuusioyhtälö esitetään muodossa, jossa diffuusiokerroin D on vakio. Tällöin diffuusioyhtälö on

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot [D(\vec{r}, C) \nabla C(\vec{r}, t)] = D \nabla^2 C. \quad (2.4)$$

2.2 Dimensioton yhtälö

Diffuusioyhtälö voidaan muuttaa dimensiottomaan muotoon, jolloin kaikki samanlaiset alkuehdot täyttävät yhtälöt voidaan kuvata samalla yhtälöllä riippumatta tilanteen skaalauksesta.

Diffuusioyhtälö 2.4 kolmiulotteisessa koordinaatistossa voidaan esittää yhtälön 2.5 muodossa, jos aukaistaan Laplaceen operaattori $\Delta = \nabla^2$ komponenteittain ja oletetaan edelleen diffuusiokerroin D vakioksi.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \Delta C = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \quad (2.5)$$

Kun diffuusio tapahtuu tilassa, jossa pätevät ehdot $x \in [0, l]$, $y \in [0, l]$, $z \in [0, l]$, voidaan käyttää paikkakoordinaateille dimensiottomia suureita $X = \frac{x}{l}$, $Y = \frac{y}{l}$ ja $Z = \frac{z}{l}$. Konsentraation voidaan taas korvata suhteellisella konsentraatiolla $c = \frac{C}{C_0}$, jossa C_0 on mielivaltainen vakiokonsentraatio. Tulevissa esimerkeissä määritellään C_0 niin, että myös $c \in [0, 1]$. Aika korvataan dimensiottomalla suureella $T = \frac{Dt}{l^2}$. Tällöin diffuusioyhtälö voidaan esittää yhtälön 2.6 muodossa. [1]

$$\frac{\partial c}{\partial T} = \frac{\partial^2 c}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial Z^2} \quad (2.6)$$

Tutkielmassa käytetään tätä yhtälön 2.6 muotoa ratkaisuisissa, sillä numeerisen ratkaisun kannalta on helpompaa, että laskettavat suureet ovat aina tietyllä välillä. Käytännön sovelluksissa numeerisen ratkaisun arvot voidaan skaalata takaisin alkuperäiseen muotoon tekemällä käänteiset muuttujanvaihdot. Vaikka tutkielmassa käytetäänkin pääasiassa dimensiottomia suureita, niistä käytetään samoja termejä kuin tavallisista suureista.

3. Diffuusioyhtälön numeerinen ratkaiseminen

Diffuusioyhtälö voidaan ratkaista usealla tavalla numeerisesti, joista yleisimmät ovat eksplisiittinen ja implisiittinen menetelmä sekä Crank-Nicolsonin menetelmä. Tässä tutkielmassa keskitytään ainoastaan ekplisiittisen menetelmän tutkimiseen. Eksplisiittinen menetelmä eroaa kahdesta muusta mainitusta siten, että siinä aika-askeleen jälkeiset konsentraatiot lasketaan vain jo tunnettuja konsentraatioita hyödyntäen. Implisiittisessä menetelmässä ja Crank-Nicolsonin menetelmässä lasketaan aika-askeleen jälkeiset konsentraatiot ratkaisemalla yhtälöryhmiä. Koska eksplisiittisessä menetelmässä ei tarvita yhtälöryhmiä, on menetelmä laskennallisesti nopea, mutta vähemmän tarkka. [2]

3.1 Diffuusion aikakehitys eksplisiittisellä menetelmällä

Diffuusioyhtälön numeerinen ratkaisu perustuu differentiaaliyhtälöiden approksimointiin Taylorin sarjakehitelmien avulla. Kehittämällä paikassa \vec{R} konsentraatio ajan suhteen Taylorin sarjaksi (yhtälö 3.1) pisteen $T = T_0$ ympäristössä saadaan aikaderivaatalle approksimaatio ottamalla vain kaksi ensimmäistä termiä huomioon.

$$c(\vec{R}, T_0 + \Delta T) = c(\vec{R}, T_0) + \frac{\partial c(\vec{R}, T_0)}{\partial T} \Delta T + \mathcal{O}(\Delta T^2) \quad (3.1)$$

$$c(\vec{R}, T_0 + \Delta T) \approx c(\vec{R}, T_0) + \frac{\partial c(\vec{R}, T_0)}{\partial T} \Delta T \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial c(\vec{R}, T_0)}{\partial T} \approx \frac{c(\vec{R}, T_0 + \Delta T) - c(\vec{R}, T_0)}{\Delta T} \quad (3.3)$$

Myös paikan suhteen funktio voidaan kehittää Taylorin sarjaksi. Yhdessä ulottuvuudessa paikan $X = X_0$ läheisyydessä sarja on kehitettävä sekä pisteiden $X = X_0 + \Delta X$ että $X = X_0 - \Delta X$ suhteen, sillä toisen paikkaderivaatan approksimoimiseen tarvitaan

useampi termi.

$$c(X_0 + \Delta X, T) = c(X_0, T) + \frac{\partial c(X_0, T)}{\partial X} \Delta X + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c(X_0, T)}{\partial X^2} \Delta X^2 + \mathcal{O}(\Delta X^3) \quad (3.4)$$

$$c(X_0 + \Delta X, T) \approx c(X_0, T) + \frac{\partial c(X_0, T)}{\partial X} \Delta X + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c(X_0, T)}{\partial X^2} \Delta X^2 \quad (3.5)$$

$$c(X_0 - \Delta X, T) = c(X_0, T) + \frac{\partial c(X_0, T)}{\partial X} (-\Delta X) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c(X_0, T)}{\partial X^2} (-\Delta X^2) + \mathcal{O}(\Delta X^3) \quad (3.6)$$

$$c(X_0 - \Delta X, T) \approx c(X_0, T) - \frac{\partial c(X_0, T)}{\partial X} \Delta X + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 c(X_0, T)}{\partial X^2} \Delta X^2 \quad (3.7)$$

Kun summataan yhtälöt 3.5 ja 3.7, saadaan ratkaistua toiselle paikkaderivaatalle yhtälö

$$\frac{\partial^2 c}{\partial X^2} = \frac{c(X_0 + \Delta X, T) - 2c(X_0, T) + c(X_0 - \Delta X, T)}{\Delta X^2}. \quad (3.8)$$

Vastaavasti voidaan myös johtaa kaksi- tai kolmiulotteisissa tapauksissa tarvittavat toiset derivaatat Y - ja Z -koordinaattien suhteen.

$$\frac{\partial^2 c}{\partial Y^2} = \frac{c(Y_0 + \Delta Y, T) - 2c(Y_0, T) + c(Y_0 - \Delta Y, T)}{\Delta Y^2} \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial Z^2} = \frac{c(Z_0 + \Delta Z, T) - 2c(Z_0, T) + c(Z_0 - \Delta Z, T)}{\Delta Z^2} \quad (3.10)$$

Kun sijoitetaan yhtälöiden 3.3, 3.8, 3.9, 3.10 tulokset dimensiottomaan diffuusioyhtälöön 2.6, saadaan numeerisesti ratkaistua konsentraatio paikassa $\vec{R} = (X_0, Y_0, Z_0)$ ajanhetkellä $T_0 + \Delta T$, kun konsentraatiot paikan läheisyydessä ajanhetkellä T_0 tunnetaan.

Yksiulotteisessa tilanteessa:

$$c(X_0, T_0 + \Delta T) = c(X_0, T_0) \left[1 - \frac{2\Delta T}{\Delta X^2} \right] + \frac{\Delta T}{\Delta X^2} [c(X_0 + \Delta X, T_0) + c(X_0 - \Delta X, T_0)] \quad (3.11)$$

Kaksiulotteisessa tilanteessa:

$$\begin{aligned} c(X_0, Y_0, T_0 + \Delta T) = & c(X_0, Y_0, T_0) \left[1 - \frac{2\Delta T}{\Delta X^2} - \frac{2\Delta T}{\Delta Y^2} \right] \\ & + \frac{\Delta T}{\Delta X^2} [c(X_0 + \Delta X, Y_0, T_0) + c(X_0 - \Delta X, Y_0, T_0)] \\ & + \frac{\Delta T}{\Delta Y^2} [c(X_0, Y_0 + \Delta Y, T_0) + c(X_0, Y_0 - \Delta Y, T_0)] \end{aligned} \quad (3.12)$$

Kolmiulotteisessa tilanteessa:

$$\begin{aligned} c(X_0, Y_0, Z_0, T_0 + \Delta T) = & c(X_0, Y_0, Z_0, T_0) \left[1 - \frac{2\Delta T}{\Delta X^2} - \frac{2\Delta T}{\Delta Y^2} - \frac{2\Delta T}{\Delta Z^2} \right] \\ & + \frac{\Delta T}{\Delta X^2} [c(X_0 + \Delta X, Y_0, Z_0, T_0) + c(X_0 - \Delta X, Y_0, Z_0, T_0)] \\ & + \frac{\Delta T}{\Delta Y^2} [c(X_0, Y_0 + \Delta Y, Z_0, T_0) + c(X_0, Y_0 - \Delta Y, Z_0, T_0)] \\ & + \frac{\Delta T}{\Delta Z^2} [c(X_0, Y_0, Z_0 + \Delta Z, T_0) + c(X_0, Y_0, Z_0 - \Delta Z, T_0)] \end{aligned} \quad (3.13)$$

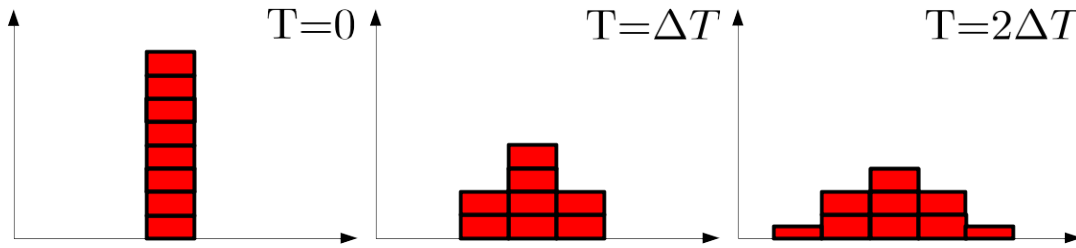
Kun tarkastellaan yksiulotteista yhtälöä 3.14 termeittäin tarkemmin, huomataan johdettujen yhtälöiden fysikaalinen merkitys: Yhtälön **ensimmäinen termi** kuvaa konsentraatiota, joka pysyy samassa paikassa aika-askeleen jälkeen. **Toinen termi** kuvaa konsentraatiota, joka virtaa paikasta pois. **Kolmas termi** kuvaa konsentraatiota, joka virtaa paikkaan pisteen negatiiviselta puolelta, ja **neljäs termi** konsentraatiota, joka virtaa paikkaan pisteen positiiviselta puolelta.

$$\begin{aligned} c(X_0, T_0 + \Delta T) = & c(X_0, T_0) - c(X_0, T_0) \frac{2\Delta T}{\Delta X^2} + c(X_0 + \Delta X, T_0) \frac{\Delta T}{\Delta X^2} \\ & + c(X_0 - \Delta X, T_0) \frac{\Delta T}{\Delta X^2} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Tilanteessa, jossa diffuusio tapahtuu d -ulotteisessa tilanteessa, täytyy olla aina voimassa ehto 3.15. Ehto kertoo, että aika-askeleen aikana pisteestä \vec{R}_0 ei voi virrata enempää ainetta pois kuin siellä alunperin oli.

$$c(\vec{R}_0, T_0) \left[1 - \sum_i^d \frac{2\Delta T}{\Delta X_i^2} \right] \geq 0, \text{ jossa } X_1 = X, X_2 = Y, X_3 = Z \quad (3.15)$$

Tämä epäyhtälö asettaa ehdon pienimmälle mahdolliselle aika-askeleelle, jolla numee-



Kuva 3.1: Kaaviokuva eksplisiittisestä menetelmästä.

rinen ratkaisu pysyy stabiilina.

$$\frac{1}{2\Delta T} \geq \sum_i^d \frac{1}{\Delta X_i^2} \quad (3.16)$$

Tämän tutkielman esimerkeissä käytetään aina erisuuntaisille paikka-askeleille samaa arvoa eli $\Delta X = \Delta Y = \Delta Z$.

3.2 Alkuarvojen ja reunaehtojen huomioiminen

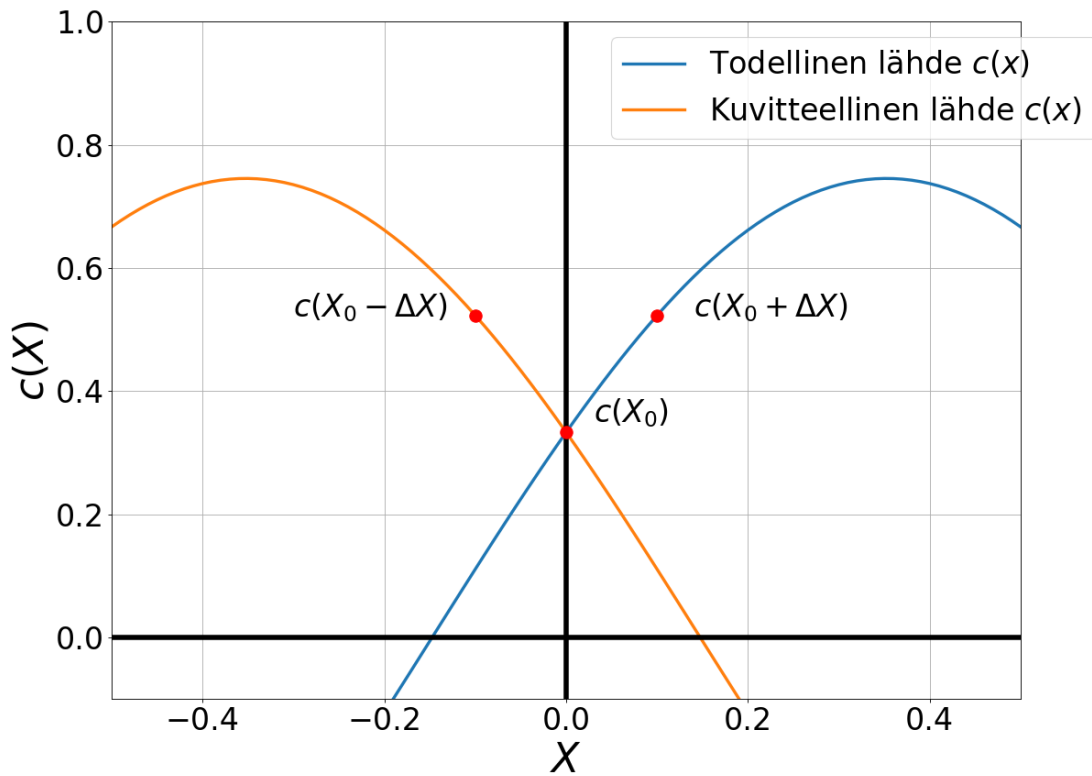
Numeerinen ratkaisu perustuu tietoon, että tarkastellun pisteen läheisyydessä konsentraatio tiedetään hetkeä aiemmin. Koska yhtälön alkuehdoissa ilmoitetaan usein suoraan c :n arvo ajanhetkellä $T = 0$, voidaan konsentraatio millä tahansa myöhäisemmällä ajanhetkellä T ratkaista käyttämällä kaavaa 3.13 $n = \frac{T}{\Delta T}$ kertaa. Diffuusioyhtälön ratkaisu riippuu myös tilanteen reunaehdoista. Yleisimmät reunaehdot diffuusioyhtälölle ovat Dirichlet'n reunaehto ja Neumannin reunaehto [8].

Näistä Dirichlet'n reunaehto voidaan esittää yksiulotteisessa tapauksessa kaavan 3.17 muodossa. Ehto määrää, että konsentraation on saatava tietty arvo tarkasteltavan alueen reunalla. Tämä voi tarkoittaa esimerkiksi sitä, että systeemin reunalla konsentraation pakotetaan olemaan vakio. Lukujen 5 ja 6 kaksi- ja kolmiulotteisissa esimerkeissä käytetään Dirichlet'n reunaehto siten, että konsentraation arvo reunalla on vakio. Numeerisessa ratkaisussa tämä reunaehto voidaan yksinkertaisesti toteuttaa sijoittamalla reunalla olevien pisteiden konsentraatioksi tietty arvo.

$$\text{Dirichlet'n reunaehto: } c(X_0, T) = f(X_0, T) \quad (3.17)$$

$$\text{Neumannin reunaehto: } \frac{\partial c(X_0, T)}{\partial X} = f(X_0, T), \text{ missä } X_0 \text{ on alueen reunalla.} \quad (3.18)$$

Neumannin reunaehto voidaan taas esittää yksiulotteisessa tapauksessa muodossa 3.18. Ehdon mukaan funktion ensimmäinen paikkaderivaatta saa ennalta määrätyn arvon reunalla. Esimerkiksi suljettua systeemiä, josta ainetta ei pääse virtaamaan pois,



Kuva 3.2: Neumannin reunaehdon käyttäminen eksplisiittisellä menetelmällä, kun $\frac{\partial c}{\partial X} = 0$ reunalla.

voidaan matemaattisesti kuvata asettamalla konsentraation paikkaderivaatta reunalla nolaksi. Luvun 4 yksiulotteisessa esimerkitapauksessa käytetään Neumannin reunaehto mallintamaan tällaista tilannetta. Eksplisiittistä menetelmää käytettäessä reunaehto voidaan toteuttaa käyttämällä kuvitteellista lähdettä, joka peilaa konsentraation reunan suhteen systeemin ulkopuolelle. Tällöin numeerisessa ratkaisussa tarvittava konsentraatio reunan ulkopuolisessa pisteessä $X_0 - \Delta X$ saadaan kuvan 3.2 esittämällä tavalla pisteen $X_0 + \Delta X$ konsentraatiosta.

4. Esimerkkitapaus yksiulotteisesta diffuusioyhtälöstä

Jos tarkastellaan diffuusioyhtälöä yhdessä ulottuvuudessa, diffuusioyhtälön 2.4 oikea puoli riippuu vain x -koordinaatista. Tällöin diffuusioyhtälö voidaan dimensiottomilla koordinaateilla kirjoittaa muotoon

$$\frac{\partial c}{\partial T} = \frac{\partial^2 c}{\partial X^2}. \quad (4.1)$$

Käydään seuraavaksi läpi esimerkkitilanne, joka voidaan ratkaista sekä numeerisesti että analyyttisesti. Käsiteltävän tilanteen voidaan fysikaalisesti ajatella mallintavan aineen jakautumista suljetussa systeemissä. Tällöin voidaan soveltaa Neumannin reunaehto 3.18 asettamalla konsentraation paikkaderivaatta reunalla nolaksi. Kun käytetään alkuehtoa 4.3, jonka mukaan alussa konsentraation jakauma on kosinifunktion muotoinen, on tiedossa kaikki tarvittavat tiedot sekä numeerisen että analyyttisen ratkaisun etsimiseen.

Esimerkin alku- ja reunaehdot:

$$\frac{\partial C(x=0)}{\partial x} = \frac{\partial C(x=l)}{\partial x} = 0, \quad C(t=0) = \frac{C_0}{2} - \frac{C_0}{2} \cos\left(2\pi \frac{x}{l}\right) \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial c(X=0)}{\partial X} = \frac{\partial c(X=1)}{\partial X} = 0, \quad c(t=0) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos(2\pi X) \quad (4.3)$$

4.1 Analyyttinen ratkaisu

Yksiulotteinen diffuusioyhtälö voidaan ratkaista separointimenetelmällä. Menetelmällä konsentraation voidaan sanoa riippuvan kahdesta erillisestä funktiosta, joista toinen riippuu paikasta ja toinen ajasta $c(X, T) = f(X)g(T)$ [8]. Alkuehdot toteuttava analyyttinen ratkaisu on tällöin sarja Fourierin sini- ja kosinitermejä kerrottuna vaimenemista kuvaavalla eksponenttifunktiolla.

$$c(X, T) = A_0 + \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n^2 \pi^2 T} (A_n \cos(n\pi X) + B_n \sin(n\pi X)), \quad (4.4)$$

jossa B_n ja A_n ovat Fourierin kertoimia.

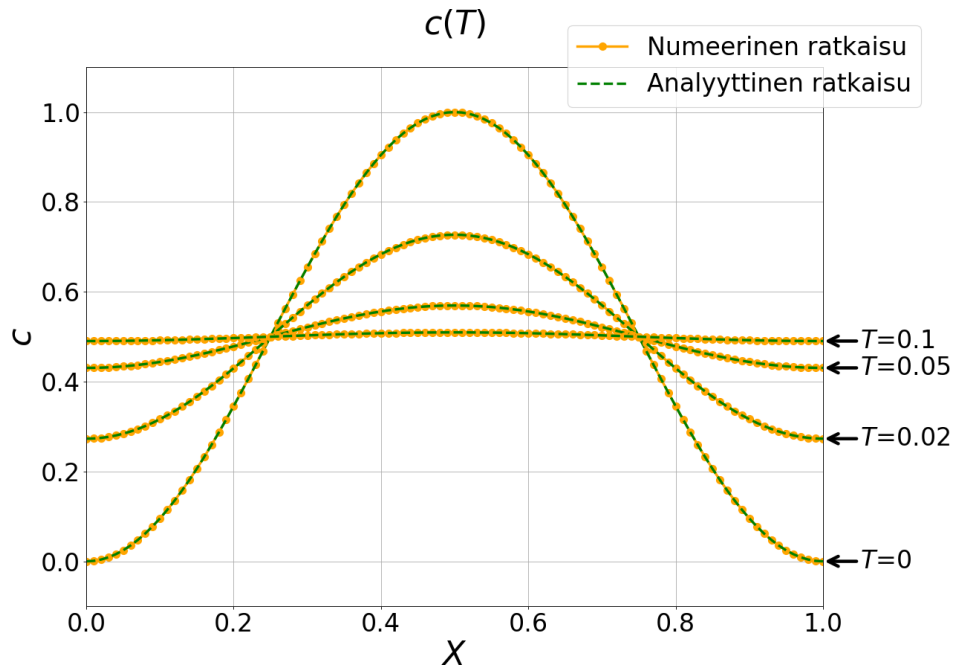
Käyttämällä Neumannin alkuehtoa, voidaan todeta kaikkien sinitermien kertoimien toteuttavan $B_n = 0$, sillä sinifunktion derivaatta pisteessä $X = 0$ ei ole muuten aina nolla. Jotta funktio toteuttaa kaikilla X :n arvoilla myös alkutilanteen kosinifunktion, on oltava $A_0 = \frac{1}{2}, A_1 = -\frac{1}{2}$ ja muulloin $A_n = 0$. Tällöin analyttiseksi ratkaisuksi konsentraatiolle saadaan funktio

$$c(X, T) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} e^{-4\pi^2 T} \cos(2\pi X). \quad (4.5)$$

4.2 Analyttisen ja numeerisen ratkaisun vertailu

Yksiulotteisen diffusioyhtälön numeerinen ratkaisu saadaan käyttämällä alkutilanteeseen 4.3 eksplisiittisen menetelmän kaavaa 3.11 ja kappaleessa 3.2 esitettyä tapaa Neumannin reunaehdolle. Käytetään tässä esimerkkitapauksessa paikka-askelelle arvoa $\Delta X = 0.01$ ja aika-askelelle epäyhtälön 3.16 antamaa suurinta mahdollista arvoa $\Delta T = 5 \times 10^{-5}$.

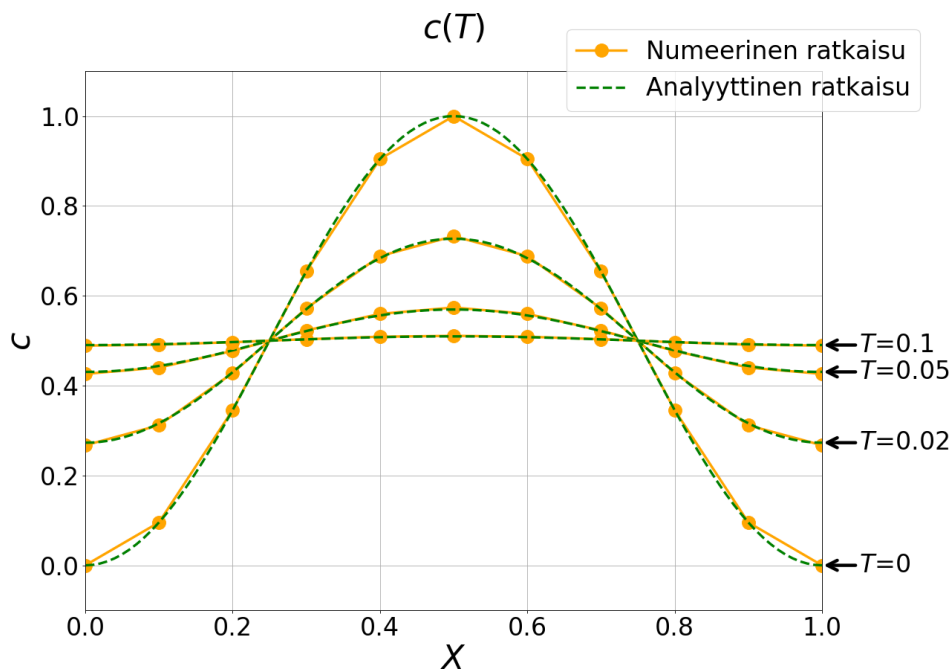
Kun seurataan konsentraation ajallista kehitystä, huomataan, että numeerinen ja analyttinen ratkaisu antavat lähes identtiset tulokset. Tämä on esitetty kuvaajassa 4.1, jossa verrataan numeerisen ja analyttisen ratkaisun antamia konsentraatiota eri ajanhetkinä.



Kuva 4.1: Numeerisen ja analyttisen ratkaisun vertailu, kun numeerisen ratkaisun paikka-askel on $\Delta X = 0.01$ ja aika-askel $\Delta T = 5 \times 10^{-5}$.

Toisessa eksplisiittisen menetelmän tuottamassa esimerkkiratkaisussa on tällä kertaa käytetty suurempaa paikka-askelta $\Delta X = 0.1$ ja samaa aika-askelta $\Delta T =$

5×10^{-5} . Kun tarkastellaan kuvaajaa 4.2 huomataan, että numeerinen ratkaisu tuottaa edelleen analyyttistä ratkaisua hyvin lähellä olevan tuloksen, vaikka tarkasteltavia pisteitä on vain 11. Tarkkaa tulosta selittää se, että funktio on hyvin yksinkertainen, jolloin funktion uuden paikan approksimoiminen Taylorin ensimmäisten termien avulla kaavalla 3.5 on hyvin lähellä todellista arvoa. Tuloksen tarkkuutta arvioidaan tarkemmin luvussa 7.



Kuva 4.2: Numeerisen ja analyyttisen ratkaisun vertailu, kun numeerisen ratkaisun paikka-askel on $\Delta X = 0.01$ ja aika-askel $\Delta T = 5 \times 10^{-5}$.

5. Esimerkkitapaus kaksiulotteisesta diffuusioyhtälöstä

Tarkastellaan seuraavaksi diffuusiota r -säteisessä kaksiulotteisessa kiekossa. Tällöin diffuusioyhtälö voidaan kirjoittaa yhtälön dimensiottomassa muodossa X - ja Y -koordinaateilla seuraavasti:

$$\frac{\partial c}{\partial T} = \frac{\partial^2 c}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial Y^2}. \quad (5.1)$$

Koska tilanteessa on kiekko, on hyödyllistä käyttää polaarikoordinaatistoa, jonka säde R toteuttaa ehdon $R^2 = X^2 + Y^2$ ja kiertokulma $\tan \phi = \frac{Y}{X}$. Tällöin diffuusioyhtälö voidaan esittää polaarikoordinaatiston Laplacen operaattorin avulla yhtälön 5.2 muodossa [8].

$$\frac{\partial c}{\partial T} = \nabla^2 c = \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left(R \frac{\partial c}{\partial R} \right) + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2 c}{\partial \phi^2} \quad (5.2)$$

Käsitellään seuraavaksi esimerkkitapausta, jossa kiekon keskipiste on $\vec{r} = \left(\frac{l}{2}, \frac{l}{2}\right)$ eli dimensiottomissa koordinaateissa $\vec{R} = (0.5, 0.5)$. Koska kiekko on symmetrinen keskipisteensä suhteen kulmariippuvuus yhtälöstä 5.2 häviää. Käytetään lisäksi esimerkkitilanteessa reunaehtoja, joiden mukaan reunalla ($|R| = 0.5$) konsentraatio on vakio. Tämän voidaan ajatella fysikaalisesti vastaavan tilannetta, jossa ohut kiekko on paljon itseään suuremmassa hiukkaskylvyssä. Jotta kyseinen tilanne voidaan ratkaista, on lisäksi tiedettävä systeemin konsentraatiojakauma alkutilanteessa. Tässä esimerkkitilanteessa alkutilanne on määritelty seuraavasti:

$$c \left(|r| = \frac{l}{2}, T \right) = C_0, \quad C(r, t = 0) = C_0 \left(1 - J_0 \left(2 \frac{r}{l} J_{0,1} \right) \right) \quad (5.3)$$

$$c(|R| = 0.5, T) = 1, \quad c(R, T = 0) = 1 - J_0(2RJ_{0,1}) \quad (5.4)$$

Alkuehdoissa J_0 on 1. lajin nollas Besselin funktio ja $J_{0,1}$ tämän ensimmäinen nollakohta.

5.1 Analyttinen ratkaisu

Esimerkkitilanteen differentiaaliyhtälö voidaan jälleen ratkaista separoimalla yhtälö säteestä ja ajasta riippuvien funktioiden suhteen. Kun käytetään annettuja alkuehtoja saadaan ratkaistua konsentraatiolle kaava

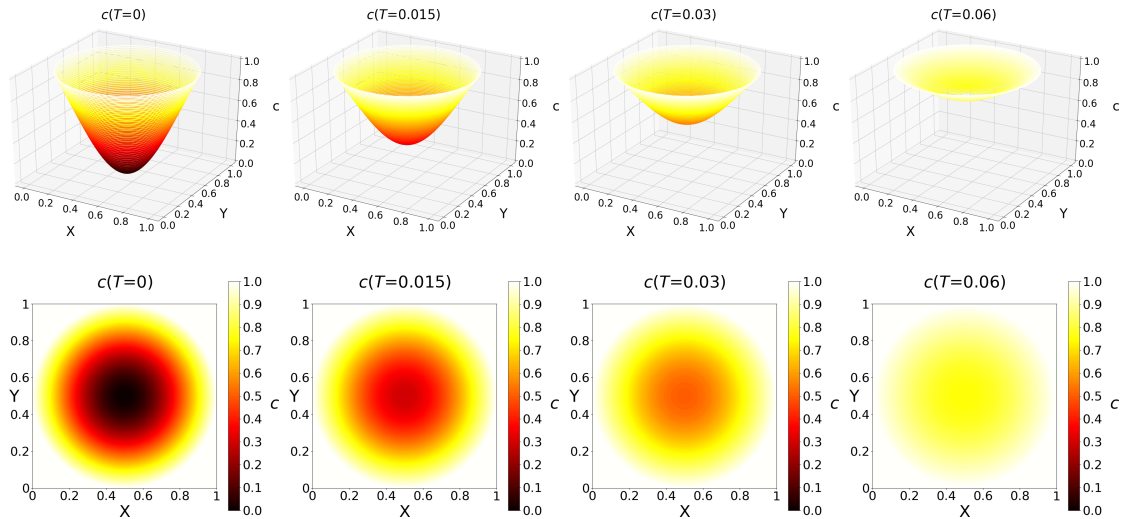
$$c(R, T = 0) = 1 - e^{-4J_{0,1}^2 T} J_0(2J_{0,1}R) \quad (5.5)$$

$$c(R, T = 0) = 1 - e^{-4J_{0,1}^2 T} J_0\left(2J_{0,1}\sqrt{(X - 0.5)^2 + (Y - 0.5)^2}\right) \cdot [1] \quad (5.6)$$

5.2 Analyttisen ja numeerisen ratkaisun vertailu

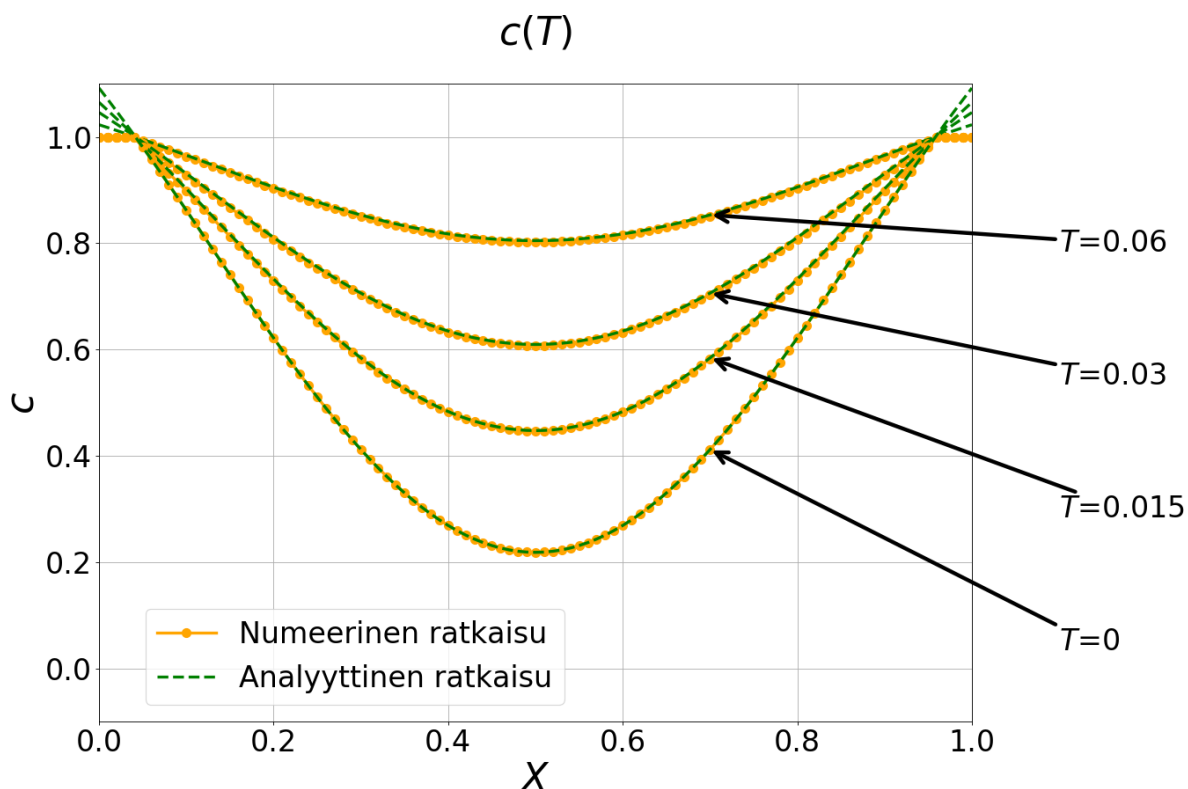
Esimerkkitapauksen numeerinen ratkaisu voidaan ratkaista joko polaarikoordinaatistossa tai karteesisissa koordinaatistossa. Tässä tilanteessa on käytetty karteesisista koordinaatistoa, jolloin numeerinen ratkaisu saadaan suoraan kaavalla 3.12, kun määritellään lisäksi ehto $c = 1$, jos $R \geq 0.5$.

Esimerkkitilanteessa käytetään numeerisen ratkaisun paikka-askelelle arvoa $\Delta X = 0.01$ ja aika-askelelle arvoa $\Delta T = 1.25 \times 10^{-5}$. Numeerisen ratkaisun kaksikulotteisen tilanteen ajallinen kehitys esitetään kuvan 5.1 kuvasarjassa. Kuvista huomataan, että tilanteessa kiekon konsentraatio tasoittuu ajan kuluessa ympäröivän konsentraation kanssa samaan arvoon.



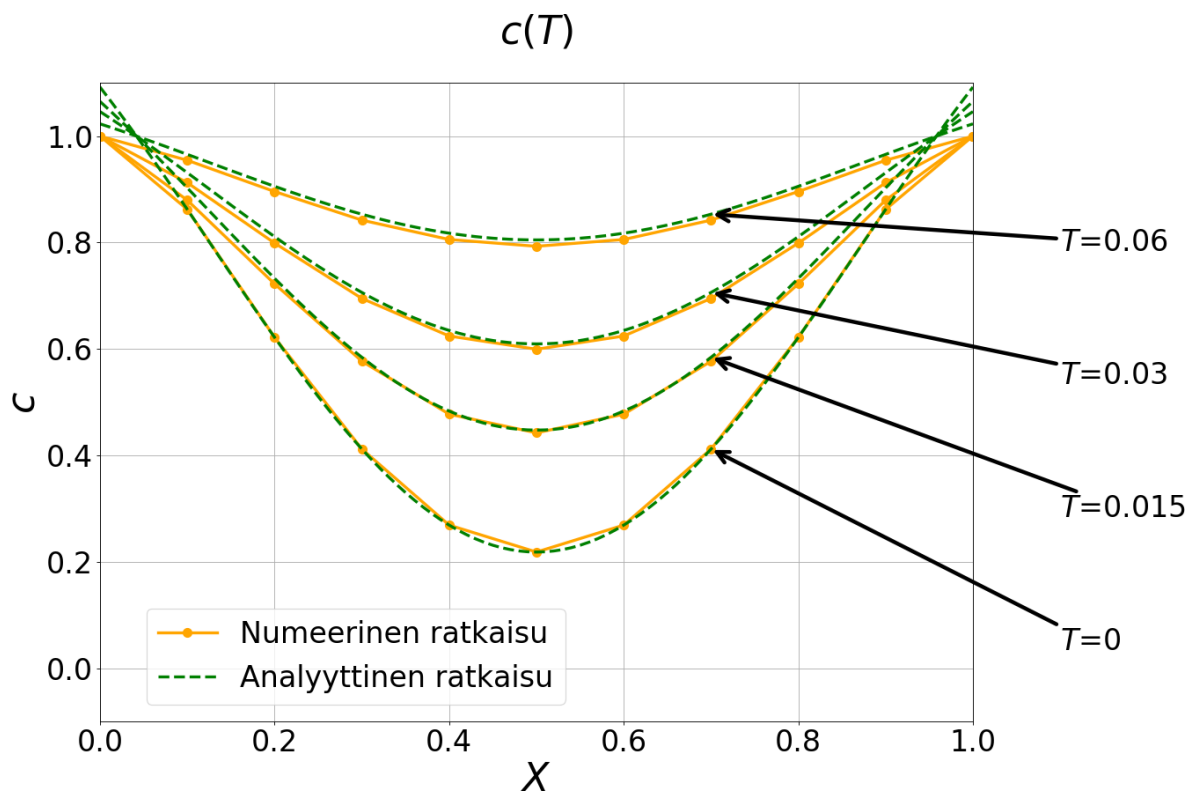
Kuva 5.1: Kuvasarja esimerkkitilanteesta, jossa diffuusio tapahtuu symmetrisissä kiekossa

Kuvassa 5.2 on esitetty numeerisen ja analyttisen ratkaisun vertailu kohdassa $Y = 0.3$. Kuvaajasta huomataan, että arvot vastaavat suhteellisen tarkasti jälleen toisiinsa. Numeerisen ja analyttisen ratkaisun käyrät eroavat merkittävästi toisistaan vain tilanteen reunoilla ($R \geq 0.5$), jossa numeerinen ratkaisu on määrätty analyttisestä ratkaisusta poiketen vakioksi.



Kuva 5.2: Numeerisen ja analyyttisen ratkaisun vertailu kaksiulotteisessa tilanteessa kohdassa $Y = 0.3$, kun numeerisen ratkaisun paikka-askel on $\Delta X = 0.01$ ja aika-askel $\Delta T = 1.25 \times 10^{-5}$.

Jos suurennetaan paikka-askelta, numeerisen ratkaisun laatu alkaa kuitenkin heikentyä. Kuvaajassa 5.3 on esitettyä sama tilanne, mutta käyttämällä paikka-askeleelle kokoa $\Delta X = 0.1$. Verrattaessa kuvaajan analyyttisen ja numeerisen ratkaisun arvoja eri ajanhetkillä huomataan, että numeeristen tuloksien tarkkuudet varsinkin lähellä reunaa huononevat. Tämän selittää se, että numeerisen ratkaisun reunimmainen piste ei ole aivan systeemin reunalla vaan hieman vielä kauempana. Tämän vuoksi kahden reunimmaisen pisteen välillä funktio ei ole sileä. Tämä ongelma voitaisiin korjata käyttämällä myös numeerisessa ratkaisussa polaarikoordinaatistoa.



Kuva 5.3: Numeerisen ja analyttisen ratkaisun vertailu kaksiulotteisessa tilanteessa kohdassa $Y = 0.3$, kun numeerisen ratkaisun paikka-askel on $\Delta X = 0.1$ ja aika-askel $\Delta T = 1.25 \times 10^{-5}$.

6. Esimerkkitapaus kolmiulotteisesta diffuusioyhtälöstä

Tutkitaan seuraavaksi esimerkkitapausta diffuusiosta kolmessa ulottuvuudessa, jossa $x \in [0, l]$, $y \in [0, l]$, $z \in [0, l]$. Tällöin voidaan soveltaa diffuusioyhtälölle suoraan kaavaa 2.6. Käytetään esimerkkitilanteessa pallomaista r -säteistä kappaletta, joka on keskipisteensä $(\frac{l}{2}, \frac{l}{2}, \frac{l}{2})$ suhteen symmetrinen. Laplacen operaattorille ∇^2 pätee pallokoordinaatistossa kaava [8]

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \quad (6.1)$$

Koska käsitelty tilanne on symmetrinen, sekä θ - että ϕ -riippuvuus kaavasta häviävät, minkä jälkeen se voidaan esittää muodossa

$$\nabla^2 = \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2}. \quad (6.2)$$

Tällöin diffuusioyhtälö dimensiottomissa koordinaateissa on

$$\frac{\partial c}{\partial T} = \frac{2}{R} \frac{\partial c}{\partial R} + \frac{\partial^2 c}{\partial R^2}. \quad (6.3)$$

Käytetään tarkastellulle tilanteelle jälleen Dirichlet'n alkuehtoa, mutta tällä kertaa siten, että $c = 0$, kun $R \geq 0.5$. Lisäksi oletetaan alkutilanne tunnetuksi, jolloin yhtälön reuna- ja alkuehdot voidaan esittää seuraavasti:

$$c(|R| = 0.5, T) = 0 \quad (6.4)$$

$$c(R, T = 0) = \frac{1}{3} \left(\frac{\sin(2\pi R)}{2\pi R} + \frac{\sin(8\pi R)}{8\pi R} + \frac{\sin(18\pi R)}{18\pi R} \right), \quad (6.5)$$

$$\text{jossa } R = \sqrt{(X - 0.5)^2 + (Y - 0.5)^2 + (Z - 0.5)^2}. \quad (6.6)$$

6.1 Analyyttinen ratkaisu

Esimerkkitapauksen differentiaaliyhtälö 6.3 voidaan ratkaista muuttujanvaihdolla $c(R, T) = Rf(R, T)$, jolloin differentiaaliyhtälö yksinkertaistuu yksiulotteiseksi dif-

fuusioyhtälöksi.

$$\frac{\partial f}{\partial T} = \frac{\partial^2 f}{\partial R^2} \quad (6.7)$$

Tämä voidaan ratkaista, kuten luvun 4 esimerkin yhtälö, jolloin yleiseksi ratkaisuksi uudelle muuttujalle saadaan

$$f(X, T) = A_0 + \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n^2 \pi^2 T} (A_n \cos(n\pi X) + B_n \sin(n\pi X)), \quad (6.8)$$

jossa B_n ja A_n ovat Fourierin kertoimia.

Kun lisätään tähän differentiaaliyhtälön triviaaliratkaisu $f = c_0 r$, saadaan ongelman diffuusioyhtälölle yleinen ratkaisu

$$c(X, T) = c_0 + \frac{A_0}{R} + \frac{1}{R} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n^2 \pi^2 T} (A_n \cos(n\pi X) + B_n \sin(n\pi X)), \quad (6.9)$$

jossa B_n ja A_n ovat Fourierin kertoimia.

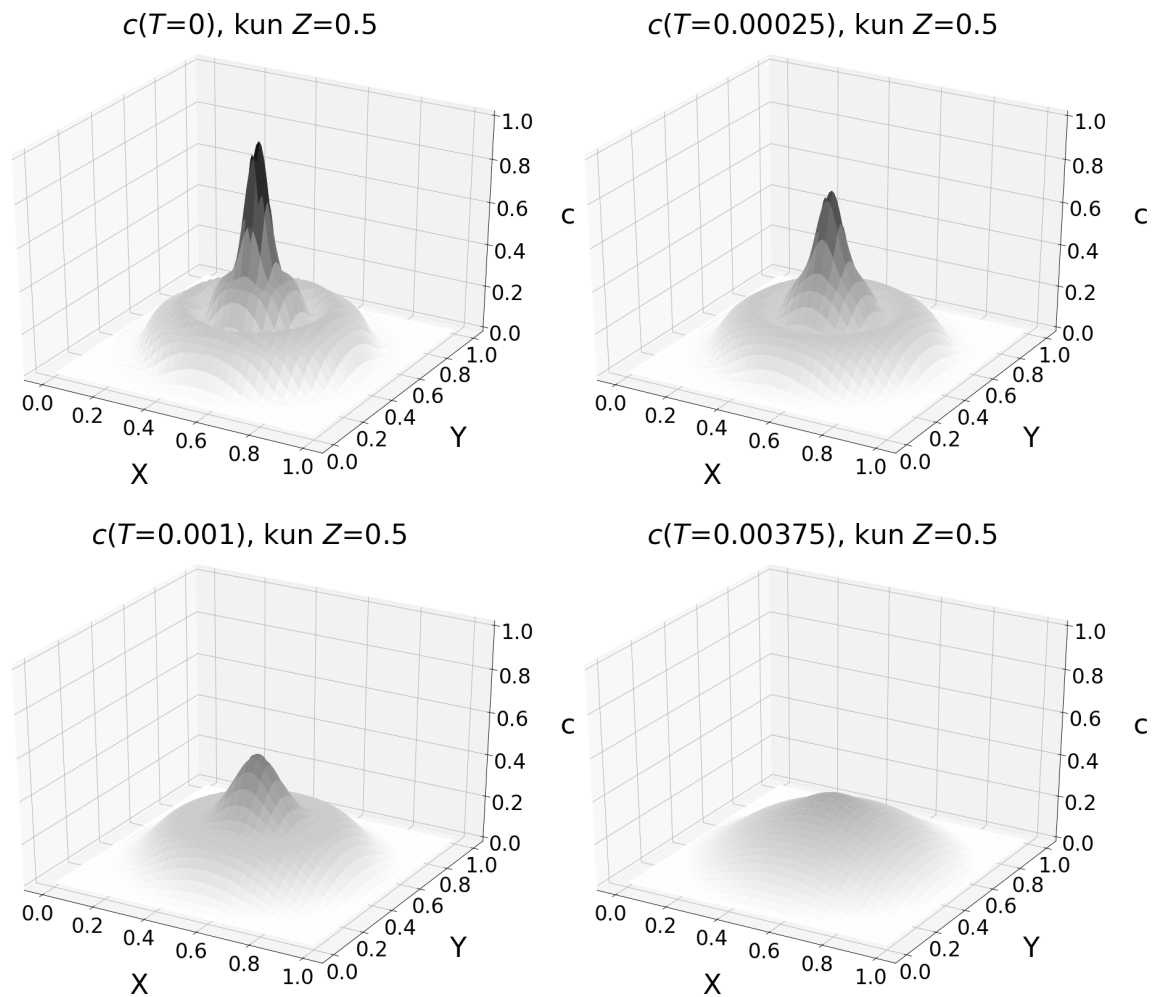
Otettaessa huomioon tilanteen alku- ja reunaehdot, voidaan Fourierin kertoimet jälleen ratkaista. Tällöin konsentraatioksi c saadaan

$$c(R, T) = \frac{1}{3} \left(\frac{e^{-4\pi^2 T} \sin(2\pi R)}{2\pi R} + \frac{e^{-64\pi^2 T} \sin(8\pi R)}{8\pi R} + \frac{e^{-324\pi^2 T} \sin(18\pi R)}{18\pi R} \right). \quad (6.10)$$

6.2 Analyttisen ja numeerisen ratkaisun vertailu

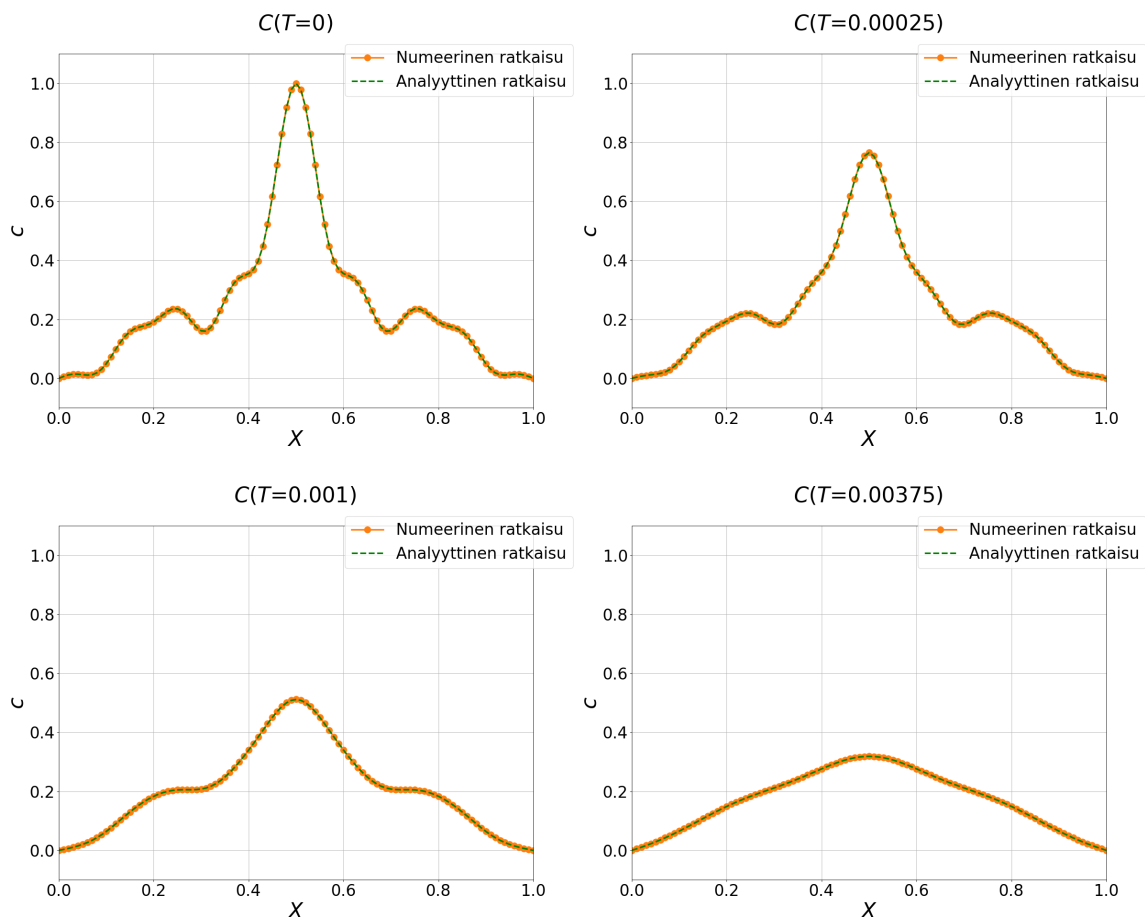
Numeerinen ratkaisu voitaisiin jälleen suorittaa joko karteesisissa tai radiaalisissa komponenteissa, mutta tässä esimerkissä on käytetty karteesta koordinaatistoa osoittamaan, että sekin tuottaa tarkan tuloksen. Yhtälön reunaehto on toteutettu kuten luvussa 5 asettamalla konsentraatio nolaksi, jos $R \geq 0$. Tarkastellun esimerkkitalanteen tulokset on esitetty kuvasarjassa 6.2. Kuvassa konsentraatio on esitetty XY -tason poikkileikkauksessa kohdassa $Z = 0.5$. Kuvasarjan datapisteet on luotu eksplisiittisellä menetelmällä käyttämällä paikka-askelelle arvoa $\Delta X = 0.01$ ja aika-askelelle arvoa $\Delta T = 1.25 \times 10^{-5}$.

Numeerisen ratkaisun tulosta voidaan jälleen verrata kappaleessa 6.1 johdettuun analyttiseen ratkaisuun. Kuvasarjoissa 6.2 ja 6.3 on vertailtu numeerisia ja analyttisiä tuloksia kohdassa $Y = 0.5$, $Z = 0.5$, eli X -akselin suuntaisella suoralla, joka kulkee ympyrän keskipisteen kautta. Ensimmäisessä kuvasarjassa on käytetty paikka-askelelle arvoa $\Delta X = 0.01$ ja jälkimmäisessä $\Delta X = 0.1$. Molemmissa tilanteissa käytetty aika-askel on $\Delta T = 1.25 \times 10^{-5}$. Kuvaaajista huomataan, että käyttämällä pientä paikka-askelta saadaan jälleen hyvinkin tarkka tulos, vaikka funktio ei olekaan kovin tasainen. Jälkimmäisessä tapauksessa jaetaan systeemin x -akselilla vain 11:een

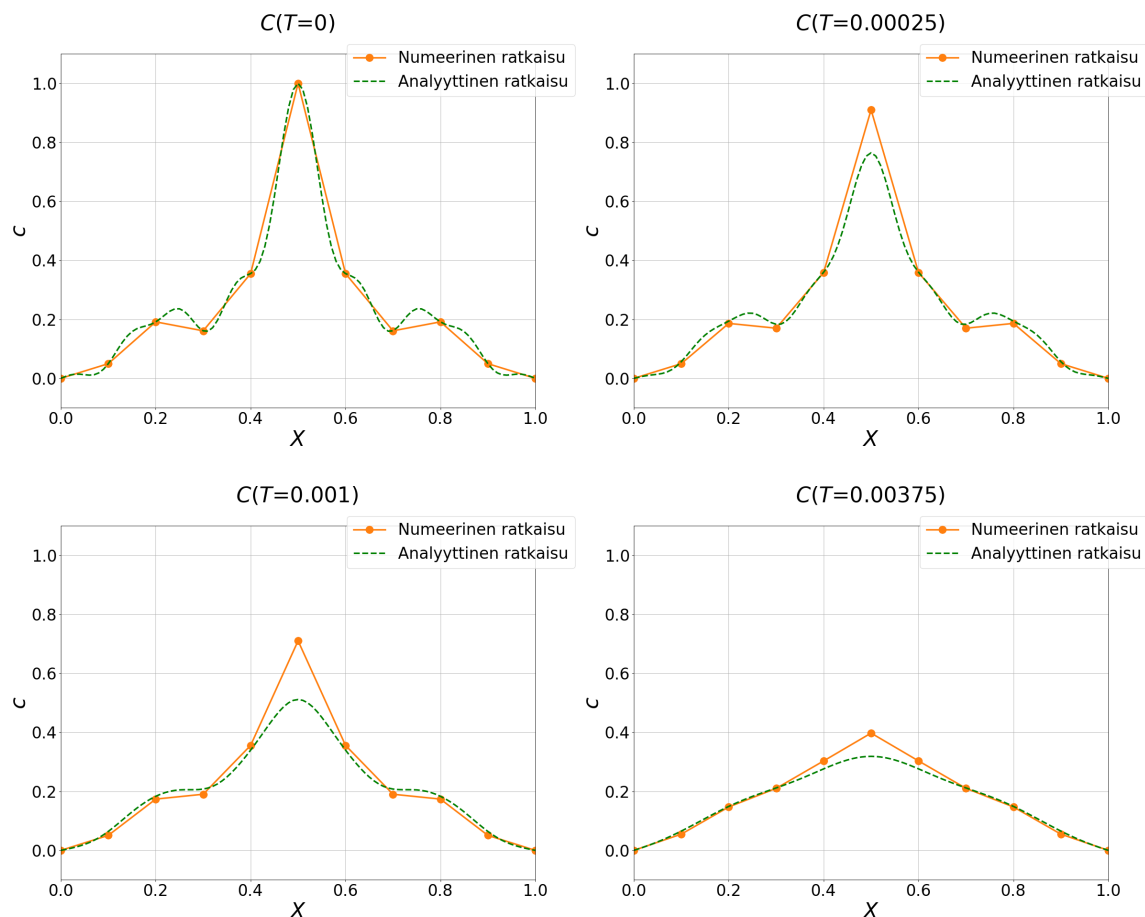


Kuva 6.1: Kuvasarja esimerkkitalanteen numeerisen ratkaisun tuloksien poikkileikkauksesta.

pisteeseen, jolloin tuloksen tarkkuus varsinkin funktion maksimin kohdalla huononee merkittävästi. Tämä johtuu siitä, että $c(X + \Delta X)$:n approksimaatio kaavalla 3.5 ei enää ole tarkka.



Kuva 6.2: Kuvasarja, jossa verrataan numeerisen ja analyyttisen ratkaisun tuloksia X -akselin suunnaisella suoralla, jossa $Y = 0.5$ ja $Z = 0.5$, kun numeerisen ratkaisun paikka-askel $\Delta X = 0.01$ ja aika-askel $\Delta T = 1.25 \times 10^{-5}$.



Kuva 6.3: Kuvasarja, jossa verrataan numeerisen ja analyyttisen ratkaisun tuloksia X -akselin suunnaisella suoralla, jossa $Y = 0.5$ ja $Z = 0.5$, kun numeerisen ratkaisun paikka-askel $\Delta X = 0.1$ ja aika-askel $\Delta T = 1.25 \times 10^{-5}$.

7. Menetelmän arviointi

Kuten luvuissa 4, 5 ja 6 esitetyt esimerkit osoittavat, eksplisiittinen menetelmä tuottaa tarkan approksimaation diffuusion aikakehitykselle yksi-, kaksi- ja kolmiulotteisissa tilanteissa. Kuitenkin huomataan, että tuloksien tarkkuus heikkenee sitä mukaan, mitä monimutkaisempi funktio on, ja mitä suurempiin osiin tarkasteltu systeemi on jaettu. Yhden aika-askeleen aikana syntyneen virheen suuruutta voidaan arvioida tarkemmin tutkimalla luvussa 3 suoritettuja approksimaatiota. Kun otetaan approksimaatioiden virhetermit huomioon, saadaan diskretointivirheen suuruus ϵ yksiulotteisessa tilanteessa kaavasta

$$\epsilon = \frac{\partial^4 c}{\partial X^4} \left[\frac{\Delta T}{2} - \frac{1}{12} \Delta X^2 \right] + \mathcal{O}(\Delta T^2) + \mathcal{O}(\Delta X^4) \quad (7.1)$$

$$\epsilon \approx \mathcal{O}(\Delta T) + \mathcal{O}(\Delta X^2). \quad [7] \quad (7.2)$$

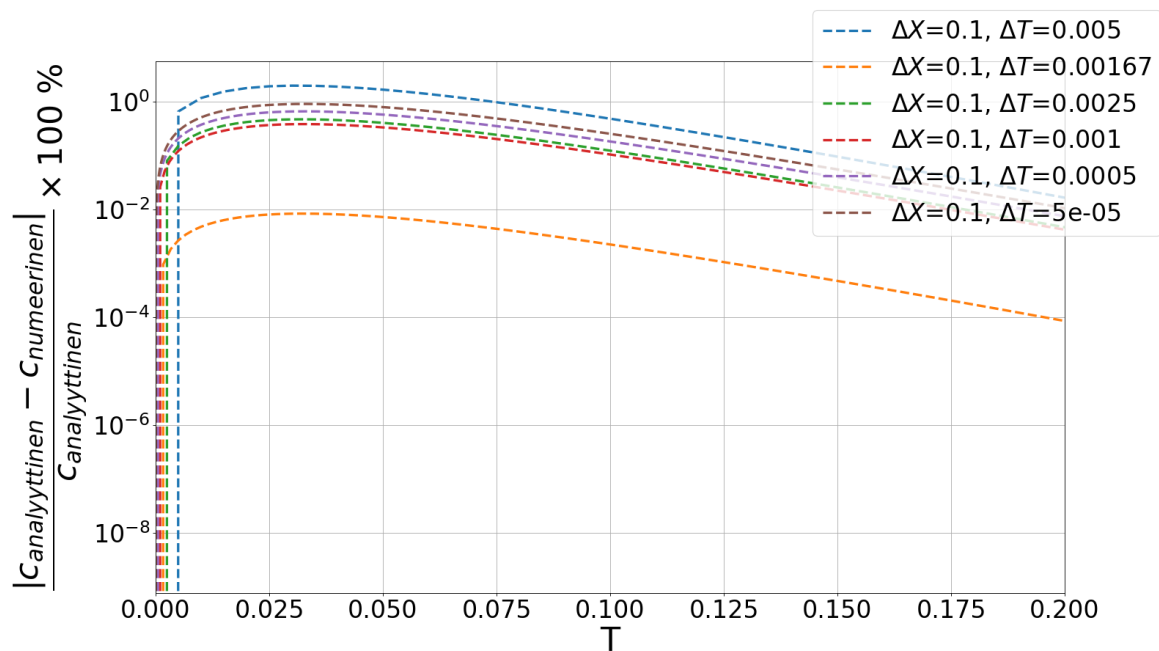
On kuitenkin mahdollista, että yhtälön ensimmäinen termi häviää, jos $\frac{\Delta T}{2} - \frac{1}{12} = 0$. Tällöin diskretointivirheen suuruus on

$$\epsilon \approx \mathcal{O}(\Delta T^2) + \mathcal{O}(\Delta X^4), \text{ kun } \frac{\Delta T}{\Delta X^2} = \frac{1}{6}. \quad (7.3)$$

Kuvaajassa 7.1 on tutkittu eri aika-askeleilla virheen suuruutta luvun 4 yksiulotteisen esimerkkitapauksen pisteessä $X = 0.5$, kun $\Delta X = 0.1$. Kuvaajasta nähdään selvästi erikoistapauksen 7.3 vaikutus. Eri aika-askelien virheitä tarkastelemalla myös huomataan, että muissa kuin erikoistapauksessa aika-askeleen koko ei vaikuta suuresti virheen kokoon. Tämä johtuu osittain siitä, että aika-askeleen kokoa rajoittava ehto 3.16 määrää aika-askeleen koon jo hyvin pieneksi.

Tutkittaessa luvun 6 kolmiulotteista esimerkkitapausta tarkemmin yksittäisessä pisteessä $\vec{R} = (0.5, 0.5, 0, 5)$ huomataan paikka-askeleen koon vaikutus käytännössä. Tämä on esitetty suhteellisenä virheenä kuvaajassa 7.2. Kuvaajasta nähdään, että pienentämällä paikka-askeleen kokoa saadaan tarkempia tuloksia.

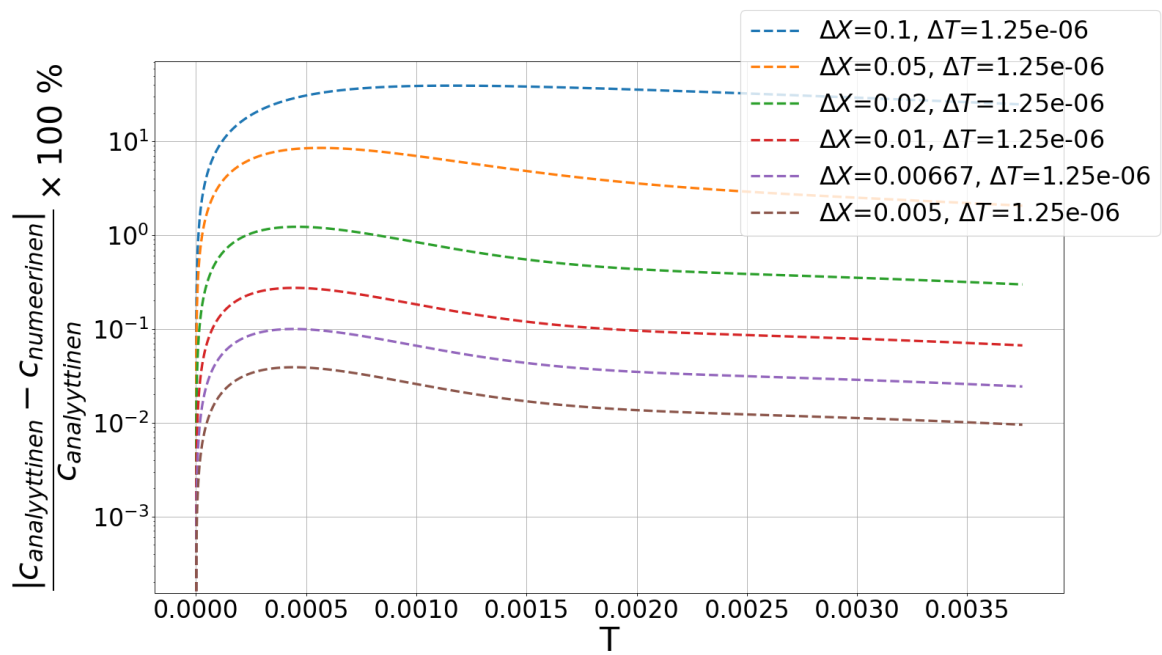
Vaikka pienemmän paikka-askeleen käyttäminen parantaa tulokseen tarkkuutta, käytännön kannalta liian pieni paikka- tai aika-askel voi hidastaa simulaatiota liikaa. Aika-askeleen puolittaminen kaksinkertaistaa laskentaan käytetyn ajan, jos tulokset halutaan saada yhtä pitkältä aikaväliltä.



Kuva 7.1: Suhteellinen virhe eri aika-askeleen kokoja käytettäessä yksiulotteisen esimerkitapauksen pisteessä $X = 0.5$.

Paikka-askeleen koon vaikuttaminen laskenta-aikaan taas riippuu tilanteen dimensiosta. Jos laskenta suoritetaan yksiulotteisessa tilanteessa, paikka-askeleen puolittaminen kaksinkertaistaa laskenta-ajan, sillä laskettavien pisteiden määrä yhtä aika-askelta kohden kaksinkertaistuu. Kaksiulotteisessa tilanteessa paikka-askeleen puolittaminen taas nelinkertaistaa laskettavien pisteiden määrän, jolloin myös laskenta-aika nelinkertaistuu. Kolmiulotteisessa tapauksessa laskenta-aika taas vastaavasti kahdeksankertaistuu, kun paikka-askeleen koko puolitetaan. Menetelmän heikkona puolena on myös aika-askeleen kokoa rajoittava ehto 3.16, jonka vuoksi aika-askeleella on suurin mahdollinen koko, jolla menetelmä on stabiili. Tämä ei kuitenkaan estä käyttämään niin pientä aika-askelta kuin halutaan.

Menetelmästä johtuvien virheiden lisäksi numeerisessa ratkaisussa vaikuttaa liukulukujen pyöristysvirheet. Näiden vaikutus on kuitenkin pieni esimerkeissä käytetyillä suuruusluokilla.



Kuva 7.2: Suhteellinen virhe eri paikka-askeleen kokoja käytettäessä kolmiulotteisessa esimerkkitapauksessa pisteessä $\vec{R} = (0.5, 0, 5, 0.5)$.

8. Johtopäätökset

Tutkielmassa saatiin selville, että diffuusioyhtälö voidaan ratkaista tehokkaasti eksplisiittisellä menetelmällä yksi-, kaksi- tai kolmeulotteisessa tilanteessa Dirichlet'n ja Neumannin reunaehdoilla. Tuloksien tarkkuuden todettiin vaihtelevan riippuen tilanteesta ja eksplisiittisessä menetelmässä käytetyistä parametreista. Paikka-askeleen koon huomattiin vaikuttavan voimakkaasti numeerisen ratkaisun tarkkuuteen varsinkin lähellä kohtia, joissa funktio muuttuu paikan suhteen voimakkaasti tai on epäjatkuva. Tämän todettiin johtuvan siitä, että menetelmä perustuu osittaisderivaattojen approksimoimiseen Taylorin polynomien avulla. Jos Taylorin polynomi kuvaa huonosti tarkasteltua funktiota, numeerinen ratkaisu ei ole tarkka. Menetelmän toisen parametrin, aika-askeleen koon, todettiin vaikuttavan ratkaisun laatuun vähemmän. Tämä on seurausta siitä, että eksplisiittistä menetelmää sitoo ehto 3.16, jonka mukaan aika-askeleen täytyy olla aina pieni suhteessa paikka-askeleeseen. Tutkielmassa kuitenkin huomattiin, että yksiulotteisessa tapauksessa voidaan valita juuri sopivat arvot aika- ja paikka-askeleelle, jolloin numeerisen menetelmän virhe pienenee huomattavasti.

Aiheen tutkimusta voisi jatkaa tutkimalla numeerisen ratkaisun antamia tuloksia monimutkaisemmissa esimerkkitalanteissa, joissa esimerkiksi diffuusiokerroin D ei olisi vakio tai reunaehdot muuttuisivat diffuusion edetessä. Työn merkitys korostuisi myös, jos numeerista ratkaisua hyödyntäisi johonkin tosielämän ongelmaan tai sovellukseen. Toinen vaihtoehto työn jatkamiselle olisi verrata eksplisiittistä metodia muihin numeerisiin menetelmiin, joilla diffuusioyhtälö voitaisiin ratkaista. Näistä esimerkkeinä Crank-Nicolsonin menetelmä ja implisiittinen menetelmä.

Kirjallisuutta

- [1] J. Crank. *The Mathematics of Diffusion*. Oxford university press, 1979.
- [2] J. Crank and P. Nicolson. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. 43(1):50–67, 1947.
- [3] A. Einstein. On the movement of small particles suspended in a stationary liquid demanded by the molecular-kinetic theory of heat. *Ann. d. Phys*, 17(549-560), 1905.
- [4] S. W. Jones. Diffusion in silicon. *IC Knowledge LLC*, pages 23–61, 2008.
- [5] J. R. Lamarsh, A. J. Baratta, et al. *Introduction to Nuclear Engineering*, volume 3. Prentice hall Upper Saddle River, NJ, 2001.
- [6] J. Piiper. Respiratory gas exchange at lungs, gills and tissues: mechanisms and adjustments. *The Journal of Experimental Biology*, 100(1):5–22, 1982.
- [7] R. D. Richtmyer and K. W. Morton. Difference methods for initial-value problems. *Malabar*, 1994.
- [8] H. J. Weber and G. B. Arfken. *Essential Mathematical Methods for Physicists, ISE*. Elsevier, 2003.