

M.Soida

## Symulacje komputerowe

astronomia: II stopień, 1. rok

<http://www.oa.uj.edu.pl/~soida/wyklady/SymKom/SK.pdf>

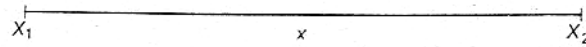
## Literatura

- David Potter „Metody fizyki obliczeniowej”, PWN 1982 (wyd. II)
- Hy Trac, Ue-Li Pen „A Primer on Eulerian Computational Fluid Dynamics for Astrophysics”, 2003, PASP 115, 303
- R.J. LeVeque, D.Michalas, E.A.Dorfi, E.Müller „Computational Methods for Astrophysical Fluid Flow”, Saas-Fee Advanced Course 27, Springer 1998
- Janina i Michał Jankowscy „Przegląd metod i algorytmów numerycznych” Część I, WNT 1981
- Maksymilian Dryja, Janina i Michał Jankowscy „Przegląd metod i algorytmów numerycznych” Część II, WNT 1982
- W.H. Press, S.A. Teukolski, W.T. Vetterling, B.P. Flannery „Numerical Recipes in C – The Art of Scientific Computing” Cambridge University Press 1992 (wyd.2)
- Ue-Li Pen, Phil Arras, Shing Kwong Wong „A Free, Fast, Simple, and Efficient Total Variation Diminishing Magnetohydrodynamic Code”, 2003, ApJSS 149,447
- inne . . .

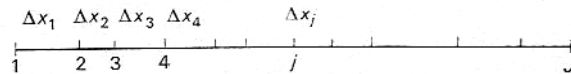
**Reprezentacja dyskretna zmiennej ciągłej**  
 ciągłą zmienną  $x$  określoną w obszarze  $X$

$$X = [X_1, X_2]$$

$$X_1 \leq x \leq X_2$$



zastępujemy *siatką* punktów, dzieląc  $X$  na  $J - 1$  elementów  $\Delta x_j$ .



i definiujemy wektor  $\{x_j\}$

$$x_j = X_1 + \sum_{\nu=1}^{j-1} \Delta x_{\nu} \quad (1)$$

definiując ciągłą zmienną  $x$  jedynie w *węzłach siatki*  $j$   
 funkcję ciągłą  $f(x)$  przybliżamy wektorem  $\{f_j\}$  na siatce punktów  $\{x_j\}$

$$f_j = f(x_j) \quad (2)$$

funkcję  $f$  możemy przybliżyć za pomocą reprezentacji  $\{f_j\}$  w dowolnym punkcie  $x_j \leq x' \leq x_{j+1}$

$$f^* = \varepsilon f_{j+1} + (1 - \varepsilon) f_j \quad (3)$$

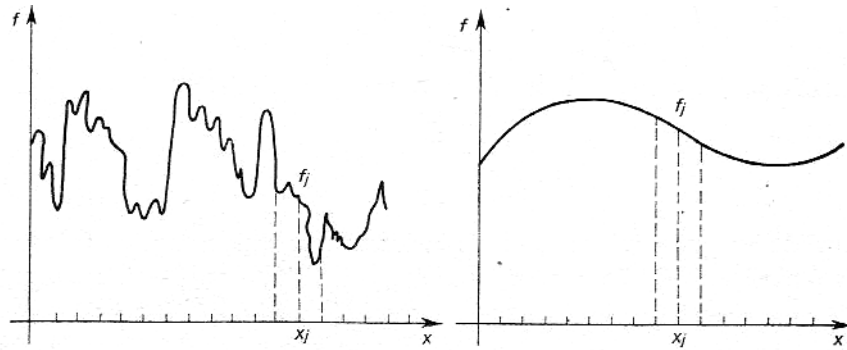
gdzie

$$\varepsilon = \frac{x' - x_j}{x_{j+1} - x_j} \quad (4)$$

w pierwszym rzędzie interpolacji.

Uwagi:

- aproksymacja  $f^*$  opisuje jedynie „długofalowe” własności funkcji  $f$
- im więcej punktów siatki tym lepsza ta aproksymacja



Ilościowo pojęcie „dobroci” aproksymacji określa się stosując technikę analizy fourierowskiej  
 ciągłą funkcję  $f(x)$  można rozłożyć na szereg Fouriera

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \hat{g}_k e^{i2\pi kx/X} \quad (5)$$

gdzie

$$\hat{g}_k = \frac{1}{X} \int_X f(x) e^{-i2\pi kx/X} dx \quad (6)$$

$\hat{g}_k$  to tzw. amplituda modu Fouriera o długości fali  $X/k$   
 dla reprezentacji dyskretnej

$$f_j = \sum_{k=1}^J \hat{g}_k e^{i2\pi kj/J} \quad (7)$$

gdzie amplitudy składowych

$$\hat{g}_k = \frac{1}{J} \sum_{j=1}^J f_j e^{-i2\pi kj/J} \quad (8)$$

bo mody Fouriera tworzą układ ortogonalny

$$\sum_{j=1}^J e^{i2\pi kj/J} \times e^{-i2\pi k'j/J} = J\delta_{kk'} \quad (9)$$

- reprezentacja  $\{f_j\}$  opisuje jedynie skończony zbiór długości fal

- istnieje graniczna długość fali ( $\Delta$ ) poniżej której żadne efekty nie dają się opisać
- reprezentacja  $\{f_j\}$  stanowi „długofalowe” przybliżenie funkcji  $f(x)$

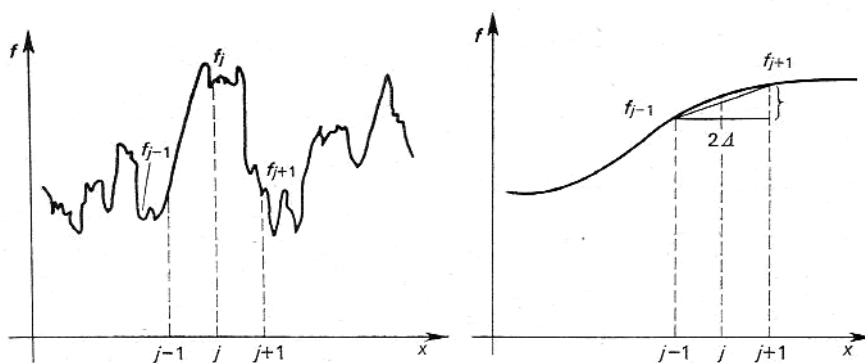
### Pochodne różnicowe w przestrzeni

Pochodna  $df/dx$  informuje o zmienności funkcji w punkcie, pochodna różnicowa musi więc wiązać ze sobą sąsiednie węzły siatki.

Niech aproksymacją pierwszej pochodnej w węźle  $j$  siatki będzie

$$\Delta'_x f_j = \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2\Delta} \quad (10)$$

oczacujemy jakość tej aproksymacji.



Dla modu fourierowskiego

$$u = ge^{ikx} \quad (11)$$

pochodna ma postać

$$\frac{du}{dx} = ikge^{ikx} = iku \quad (12)$$

zaś pochodna różnicowa

$$\Delta'_x u = \frac{ge^{ikx_{j+1}} - ge^{ikx_{j-1}}}{2\Delta} \quad (13)$$

ale  $x_{j+1} = x_j + \Delta$  i  $x_{j-1} = x_j - \Delta$

więc

$$\Delta'_x u = \frac{g}{2\Delta} (e^{ik(x_j+\Delta)} - e^{ik(x_j-\Delta)}) = \frac{g}{\Delta} e^{ikx_j} \frac{1}{2} (e^{ik\Delta} - e^{-ik\Delta}) \quad (14)$$

a zatem

$$\Delta'_x u = \frac{i u}{\Delta} \sin k \Delta \quad (15)$$

dalej małych  $k\Delta$  jest to dobre przybliżenie, ponieważ

$$\lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{\sin k \Delta}{\Delta} = k \quad (16)$$

jeśli rozwiniemy ten wynik dla małych  $k\Delta$

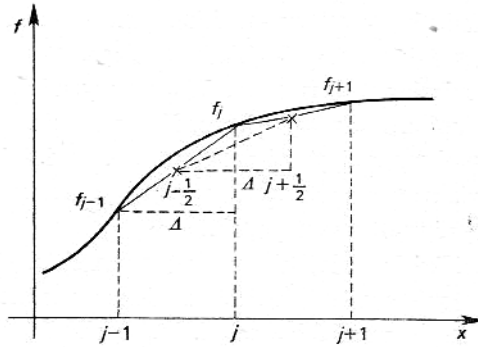
$$\Delta'_x u = \frac{i u}{\Delta} \left( k \Delta - \frac{(k \Delta)^3}{6} + O(k^5 \Delta^5) \right) = i u k \left( 1 - \frac{k^2 \Delta^2}{6} + O(k^4 \Delta^4) \right) \quad (17)$$

i ostatecznie

$$\Delta'_x = \left( 1 - \frac{k^2 \Delta^2}{6} + O(k^4 \Delta^4) \right) \frac{d}{dx} \quad (18)$$

- operator różnicowy działa z dokładnością do wyrazów drugiego rzędu względem  $k\Delta$

Dla drugiej pochodnej prostą aproksymacją może być



$$\Delta''_x f_j = \frac{f_{i+1} - 2f_j + f_{i-1}}{\Delta^2} \quad (19)$$

i analogicznie dla modu Fouriera  $ge^{ikx}$

$$\frac{d^2 u}{dx^2} = \frac{d^2}{dx^2} (ge^{ikx}) = -gk^2 e^{ikx} = -k^2 u \quad (20)$$

i dla operatora różnicowego drugiego rzędu

$$\Delta_x'' u = \frac{g}{\Delta^2} \left( e^{ik(x_j+\Delta)} - 2e^{ikx_j} + e^{ik(x_j-\Delta)} \right) \quad (21)$$

$$\Delta_x'' u = \frac{2ge^{ikx_j}}{\Delta^2} \left( \frac{1}{2}e^{ik\Delta} + \frac{1}{2}e^{-ik\Delta} - 1 \right) = \frac{2u}{\Delta^2} (\cos k\Delta - 1) \quad (22)$$

i rozwijając dla małych  $k\Delta$

$$\Delta_x'' u = \frac{2u}{\Delta^2} \left( 1 - \frac{k^2\Delta^2}{2} + \frac{k^4\Delta^4}{24} - 1 + O(k^6\Delta^6) \right) \quad (23)$$

$$\Delta_x'' u = -k^2u \left( 1 - \frac{k^2\Delta^2}{12} + O(k^4\Delta^4) \right) \quad (24)$$

i ostatecznie

$$\Delta_x'' = \left( 1 - \frac{k^2\Delta^2}{12} + O(k^4\Delta^4) \right) \frac{d^2}{dx^2} \quad (25)$$

- operator drugich różnic jest dokładny do drugiego rzędu względem  $k\Delta$



### Ogólne sformułowanie zagadnienia początkowego

Z zagadnieniem początkowym mamy do czynienia tam, gdzie układ określony przez wektor stanu  $u(r, t)$  w obszarze przestrzeni  $R = R(r)$  i znamy *warunki początkowe*  $u = u^0$  w chwili  $t = 0$  i  $u$  jest określone na powierzchni  $S$  w  $R$  dla wszystkich czasów  $t$

Stan układu dla wszystkich czasów  $t$  możemy otrzymać w postaci rozwiązania zagadnienia początkowego

$$\frac{du}{dt} = Lu \quad (26)$$

$L$  jest nieliniowym operatorem

- algebraicznym – dla równań różniczkowych zwyczajnych
- przestrzennym – dla równań różniczkowych cząstkowych

Przykłady:

a) jednowymiarowy oscylator harmoniczny

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{k}{m}x \quad (27)$$

możemy zapisać jako układ równań pierwszego rzędu

$$\frac{dx}{dt} = v \quad (28)$$

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{k}{m}x \quad (29)$$

w naszej notacji zapiszemy to tak

$$u(t) = (x, v) \quad (30)$$

oraz

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{k}{m} & 0 \end{pmatrix} \quad (31)$$

warunek brzegowy (początkowy) domyka problem

$$u(t = 0) = (x_0, v_0) \quad (32)$$

b) przewodnictwo ciepła w jednowymiarowym pręcie

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \kappa \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad (33)$$

i po „naszemu”

$$u(x, t) = T \quad (34)$$

oraz

$$L = \frac{\partial}{\partial x} \kappa \frac{\partial}{\partial x} \quad (35)$$

i warunki brzegowe i początkowe

$$u(x = x_L, t) = T_L(t) \quad (36)$$

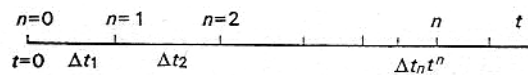
$$u(x = x_R, t) = T_R(t) \quad (37)$$

$$u(x, t = 0) = T_0(x) \quad (38)$$

Wróćmy do ogólnego zagadnienia

$$\frac{du}{dt} = Lu \quad (39)$$

Całkujemy je krok po kroku w czasie (na siatce czasowej)



$$t^n = \sum_{\nu=0}^n \Delta t_\nu \quad (40)$$

całkując wiążemy wartości wektora  $u$  w kolejnych krokach czasowych

$$u^{n+1} = u^n + \int_{t^n}^{t^{n+1}} Lu dt' \quad (41)$$

wyrażenie pod całką z prawej strony możemy rozwinąć

$$u^{n+1} = u^n + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left\{ \sum_{r=0}^{p-1} \left[ \frac{d^r}{dt^r}(Lu) \right]_{t^n} \frac{t'^r}{r!} + O(t'^p) \right\} dt' \quad (42)$$

i scałkować wyraz po wyrazie

$$u^{n+1} = u^n + \sum_{r=1}^p \left[ \frac{d^{r-1}}{dt^{r-1}}(Lu) \right]_{t^n} \frac{(\Delta t)^r}{r!} + O((\Delta t)^{p+1}) \quad (43)$$

ograniczmy się do wyrazów drugiego rzędu

$$u^{n+1} = u^n + Lu^n \Delta t + \left[ \frac{d}{dt}(Lu) \right]_{t^n} \frac{(\Delta t)^2}{2} \quad (44)$$

pozostaje obliczyć pochodną po prawej stronie

$$u^{n+1} = u^n + Lu^n(1 - \varepsilon)\Delta t + Lu^{n+1}\varepsilon\Delta t \quad (45)$$

ogólnie  $0 \leq \varepsilon \leq 1$  a dokładność drugiego rzędu utrzymujemy gdy  $\varepsilon = \frac{1}{2}$   
dla  $\varepsilon = 0$  mówimy o metodzie *jawnej*

$$u^{n+1} = (I + \Delta t L)u^n \quad (46)$$

oraz dla  $\varepsilon \neq 0$  o metodzie *niejawnej*

$$(I - \varepsilon \Delta t L)u^{n+1} = (I + (1 - \varepsilon)\Delta t L)u^n \quad (47)$$

i w końcu

$$u^{n+1} = (I - \varepsilon \Delta t L)^{-1}(I + (1 - \varepsilon)\Delta t L)u^n \quad (48)$$

lub

$$u^{n+1} = T(\Delta t, \Delta)u^n \quad (49)$$

**Wymagania stawiane różnicowemu rozwiązaniu zagadnienia początkowego**

1) *Zgodność* aproksymacji różnicowej

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{T(\Delta t, \Delta) - I}{\Delta t} = L \quad (50)$$

przy zachowanym skończonym  $\Delta t/\Delta$

2) *Dokładność* aproksymacji różnicowej

- błąd obcięcia
- błąd reprezentacji (zaokrąglenia)

3) *Stabilność* schematu różnicowego

w najprostszym przypadku gdy  $u$  jest wielkością skalarną, błąd na kroku  $n$  niech wynosi  $\epsilon^n$ , w kolejnym kroku

$$\epsilon^{n+1} = g\epsilon^n \quad (51)$$

warunek stabilności wymaga, żeby  $|\epsilon^{n+1}| \leq |\epsilon^n|$  czyli

$$|g| \leq 1 \quad (52)$$

Uwaga:

w niektórych sytuacjach (rozwiązania szybko rosnące) można dopuścić złamania tego warunku

Dla układu  $N$  równań różniczkowych należy zdefiniować wektor błędu  $\epsilon^n$  i macierz wzmocnienia  $G$

$$\epsilon^{n+1} = G\epsilon^n \quad (53)$$

związaną z operatorem całkowym  $T(\Delta t, \Delta)$

$$u^{n+1} + \epsilon^{n+1} = T(u^n + \epsilon^n) \quad (54)$$

gdy  $T$  jest operatorem liniowym to  $T = G$ , ogólnie (dla małych błędów) możemy zlinearyzować

$$T(u^n + \epsilon^n) = Tu^n + \left\{ \frac{\partial}{\partial u}(Tu) \right\}_n \epsilon^n \quad (55)$$

odejmując rozwiązanie „dokładne”  $u^{n+1} = Tu^n$

$$\epsilon^{n+1} = \left\{ \frac{\partial}{\partial u}(Tu) \right\}_n \epsilon^n \quad (56)$$

i macierz wzmocnienia

$$G_{\mu\nu} = \frac{\partial u_\mu^{n+1}}{\partial u_\nu^n} \quad (57)$$

warunek stabilności sprowadza się do żądania

$$|\epsilon_\mu^{n+1}| \leq |\epsilon_\mu^n| \quad (58)$$

czyli aby wartości własne macierzy wzmocnienia  $|g_\mu| \leq 1$

4) *Efektywność* schematu różnicowego



## Całkowanie równań różniczkowych zwyczajnych

Rozważmy równanie różniczkowe zwyczajne

$$\frac{du}{dt} + f(u, t) = 0 \quad (59)$$

gdzie  $u = u(t)$ , oraz warunki początkowe

$$u(t^0) = u^0 \quad (60)$$

równanie to można scałkować na siatce czasowej

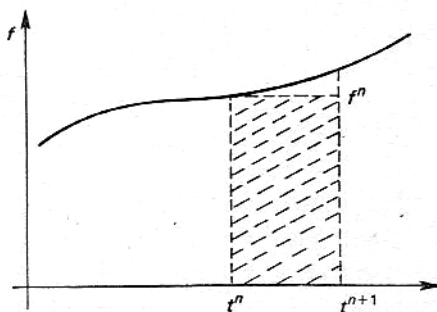
$$u^{n+1} = u^n - \int_{t^n}^{t^{n+1}} f(u, t) dt \quad (61)$$

w przedziale czasu  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$

a) *Metoda Eulera pierwszego rzędu*

metoda jawna, pierwszego rzędu, prosta i efektywna

$$u^{n+1} = u^n - f(u^n, t^n) \Delta t \quad (62)$$



co ze stabilnością – zakładamy, że  $u^n$  jest obarczone błędem  $\varepsilon^n$  i liczymy błąd  $u^{n+1}$

$$u^{n+1} + \varepsilon^{n+1} = u^n + \varepsilon^n - f((u^n + \varepsilon^n), t^n) \Delta t \quad (63)$$

dla małego  $\varepsilon^n$  rozwijamy funkcję  $f$  wokół  $u^n$

$$f(u^n + \varepsilon^n, t^n) = f(u^n, t^n) + \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n \varepsilon^n + O(\varepsilon^n) \quad (64)$$

stąd

$$\varepsilon^{n+1} = \varepsilon^n - \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n \Delta t \varepsilon^n + O(\varepsilon^n) \quad (65)$$

i współczynnik wzmocnienia dla schematu Eulera

$$g = 1 - \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n \Delta t \quad (66)$$

i pamiętamy warunek stabilności  $|g| \leq 1$

Przypadek I: równanie typu rozpadu  $-\partial f/\partial u > 0$

$$\frac{du}{dt} + \frac{u}{\tau} = 0 \quad (67)$$

gdzie  $\tau > 0$  i warunek początkowy  $u(0) = 1$

rozwiązanie analityczne znamy

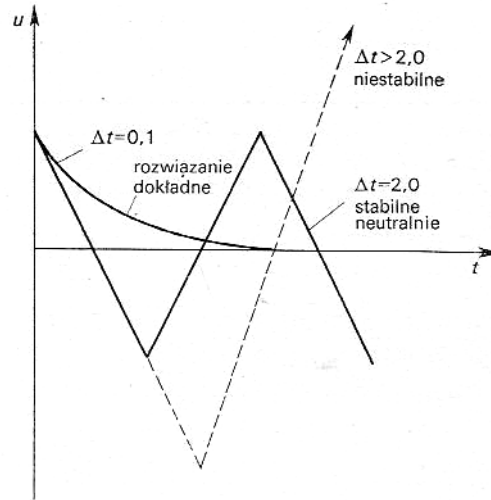
$$u = e^{-t/\tau} \quad (68)$$

ponieważ  $\partial f/\partial u = 1/\tau$  to warunek stabilności

$$|g| = \left| 1 - \frac{\partial f}{\partial u} \Delta t \right| \leq 1 \quad (69)$$

$$\Delta t \leq 2\tau \quad (70)$$

wyniki dla różnych  $\Delta t$



Przypadek II: równanie typu oscylacyjnego ( $\partial f/\partial u$  jest urojone)  
równanie

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2x = 0 \quad (71)$$

można rozpisać

$$\frac{dx}{dt} - \omega v = 0 \quad (72)$$

$$\frac{dv}{dt} + \omega x = 0 \quad (73)$$

lub oznaczając  $u = x + iv$

$$\frac{du}{dt} + i\omega u = 0 \quad (74)$$

współczynnik wzmocnienia  $g = 1 - i\omega\Delta t$

i warunek stabilności

$$|g|^2 = 1 + \left| \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n^2 (\Delta t)^2 \leq 1 \quad (75)$$

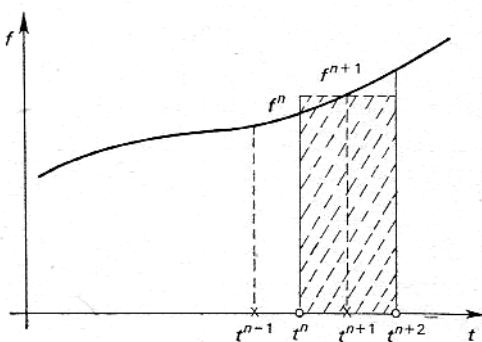


dla każdego  $\Delta t$  NIE JEST spełniony!

Uwaga: zwykle (gdy  $\partial f/\partial u$  zależy od  $u$ ) krok  $\Delta t$  dobiera się na każdym kroku, żeby spełnić warunek stabilności.

b) *Metoda skokowa*

metoda „centruje” w czasie całkowanie, uzyskując dokładność drugiego rzędu



$$u^{n+1} = u^{n-1} - f(u^n, t^n) 2\Delta t \quad (76)$$

$$u^{n+2} = u^n - f(u^{n+1}, t^{n+1}) 2\Delta t \quad (77)$$

ale

- potrzebne są warunki początkowe  $u^0 = u(0)$  oraz  $u^1 = u(\Delta t)$
- problemy w przypadkach nieliniowych (ze zmiennym krokiem całkowania)

stabilność liczymy analogicznie (powiązane są ze sobą błędy na trzech kolejnych krokach)

$$\varepsilon^{n+1} = \varepsilon^{n-1} - \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n 2\Delta t \varepsilon^n \quad (78)$$

a stąd

$$g^2 = 1 - \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_n 2\Delta t g \quad (79)$$

i podstawiając  $\alpha = \partial f / \partial u|_n \Delta t$

$$g = -\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 1} \quad (80)$$

i warunek stabilności jest spełniony (marginalnie –  $|g| = 1$ ) tylko dla urojonego  $\alpha = i\beta$  gdy  $\beta \leq 1$

dla równania oscylatora  $\beta = \omega \Delta t \leq 1$  czyli

$$\Delta t \leq \frac{1}{\omega} \quad (81)$$

Warto przeanalizować zachowanie się schematu skokowego na przykładzie równania typu rozpadu  $du/dt + u/\tau = 0$

oznaczając zmienną  $u$  w parzystych punktach siatki czasowej jako  $\xi$ , a w nieparzystych jako  $\zeta$ , wtedy

$$\xi^{2n} = \xi^{2n-2} - \zeta^{2n-1} \frac{2\Delta t}{\tau} \quad (82)$$

$$\zeta^{2n+1} = \zeta^{2n-1} - \xi^{2n} \frac{2\Delta t}{\tau} \quad (83)$$

równania te odpowiadają równaniom różniczkowym

$$\frac{d\xi}{dt} + \frac{\zeta}{\tau} = 0 \quad (84)$$

$$\frac{d\zeta}{dt} + \frac{\xi}{\tau} = 0 \quad (85)$$

odejmując i dodając te równania stronami, otrzymujemy

$$\frac{d(\xi + \zeta)}{dt} + \frac{(\xi + \zeta)}{\tau} = 0 \quad (86)$$

$$\frac{d(\xi - \zeta)}{dt} - \frac{(\xi - \zeta)}{\tau} = 0 \quad (87)$$

pierwsze z rozwiązań to to o co nam chodzi, a to drugie – to rozwiązanie „numeryczne” (ekspandujące od wartości  $u^0 - u^1$ )

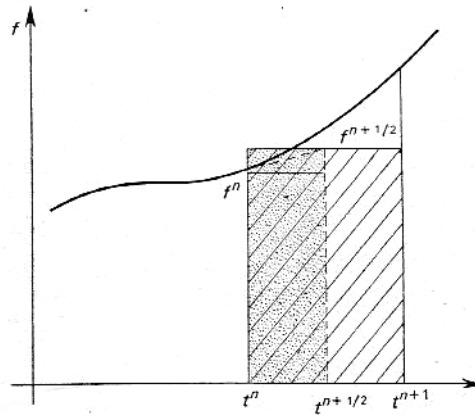
c) *Jawna metoda dwustopniowa*

wstępny etap wylicza wartość  $u$  w pośrednim czasie  $t^{n+1/2}$

$$u^{n+1/2} = u^n - f(u^n, t^n) \frac{\Delta t}{2} \quad (88)$$

etap główny

$$u^{n+1} = u^n - f(u^{n+1/2}, t^{n+1/2}) \Delta t \quad (89)$$



analiza stabilności daje

$$\varepsilon^{n+1} = \varepsilon^n - \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_n \Delta t \left\{ 1 - \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_n \frac{\Delta t}{2} \right\} \varepsilon^n \quad (90)$$

i współczynnik wzmocnienia

$$g = 1 - \alpha + \frac{1}{2}\alpha^2 \quad (91)$$

gdzie (jak zwykle)  $\alpha = \partial f / \partial u|_n \Delta t$

dla  $\partial f / \partial u > 0$  stabilna dla małych kroków czasowych

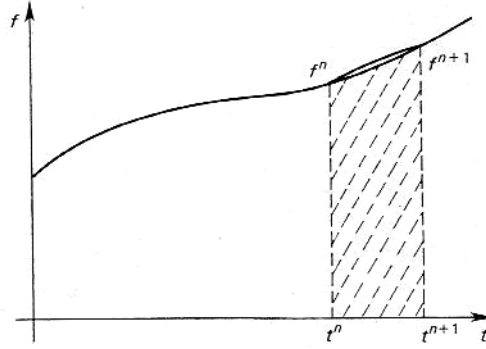
$$\Delta t \leq \frac{2}{\partial f / \partial u|_n} \quad (92)$$

i marginalnie niestabilna dla  $\alpha$  urojonego

d) *Metoda niejawną drugiego rzędu*

całkę z prawej strony (57) liczy się jako średnią (w czasie) funkcji  $f$  pomiędzy  $t^n$  a  $t^{n+1}$

$$u^{n+1} = u^n - \left[ f(u^n, t^n) + f(u^{n+1}, t^{n+1}) \right] \frac{\Delta t}{2} \quad (93)$$



i współczynnik wzmocnienia

$$g = 1 - \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_n \frac{\Delta t}{2} - \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_{n+1} \frac{\Delta t}{2} g \quad (94)$$

czyli

$$g = \frac{1 - \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_n \frac{\Delta t}{2}}{1 + \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_{n+1} \frac{\Delta t}{2}} \quad (95)$$

lub jak zwykle podstawiając  $\alpha = \partial f / \partial u|_n \Delta t$

$$g = \frac{1 - \alpha/2}{1 + \alpha/2} \quad (96)$$

stabilna dla dowolnego  $\alpha \geq 0$  lub urojonego

e) *Metoda Adamsa-Bashfortha*

$$u^{n+1} = u^n - \frac{1}{2} [3f(u^n, t^n) - f(u^{n-1}, t^{n-1})] \Delta t \quad (97)$$

jej współczynnik wzmocnienia

$$g = \frac{1}{2} - \frac{3}{4}\alpha \pm \frac{1}{2}\sqrt{\frac{9}{4}\alpha^2 - \alpha + 1} \quad (98)$$

stabilna dla  $\Delta t \leq 1/(\partial f/\partial u)|_n$  marginalnie niestabilna dla  $\alpha$  urojonego

## Metody Rungego-Kutty

ogólnie, to rodzina schematów całkowania

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \sum_{i=1}^r c_i k_i(u^n, t^n, \Delta t) \quad (99)$$

$$k_i = f \left( u^n + \Delta t \sum_{j=1}^r b_{ij} k_j, t^n + \Delta t \sum_{j=1}^r b_{ij} \right) \quad (100)$$

jeśli  $b_{ij} = 0$  dla  $j \geq i$  to nazywa się metodą *otwartą* i jej rząd wynosi maksymalnie  $r$

w przypadku przeciwnym – metoda *zamknięta* – rząd maksymalnie  $2r$   
najczęściej używana jest RK4 (czwartego rzędu)

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (101)$$

$$k_1 = f(u^n, t^n) \quad (102)$$

$$k_2 = f \left( u^n + \frac{1}{2} k_1 \Delta t, t^n + \frac{1}{2} \Delta t \right) \quad (103)$$

$$k_3 = f \left( u^n + \frac{1}{2} k_2 \Delta t, t^n + \frac{1}{2} \Delta t \right) \quad (104)$$

$$k_4 = f(u^n + k_3 \Delta t, t^n + \Delta t) \quad (105)$$

współczynnik wzmocnienia  $g = 1 - \alpha + \frac{1}{2}\alpha^2 - \frac{1}{6}\alpha^3 + \frac{1}{24}\alpha^4$   
stabilna dla  $\Delta t \leq 2.8/(\partial f/\partial u)|_n$  dla obu typów równań



## Równania zachowawcze w fizyce ośrodków ciągłych

- *zachowanie energii*

energia w objętości  $V$

$$\iiint_V \varepsilon(x, t) dV \quad (106)$$

strumień przez powierzchnię  $S$

$$\oiint_S q \cdot dS \quad (107)$$

zmiana energii w objętości  $V$  równa jest strumieniowi energii wpływającej do tej objętości (przepływającemu przez  $S$ )

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \varepsilon(x, t) dV = - \oiint_S q \cdot dS \quad (108)$$

czyli

$$\iiint_V \left( \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot q \right) dV = 0 \quad (109)$$

jeśli  $\varepsilon \propto T$  i  $q \propto \nabla T$  to mamy

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot \kappa \nabla T = 0 \quad (110)$$

- *zachowanie masy*

strumień masy przez element  $dS$  to  $\rho v \cdot dS$

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho dV = - \oiint_S \rho v \cdot dS \quad (111)$$

co daje równanie zachowania masy (w postaci zachowawczej)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho v = 0 \quad (112)$$

- *zachowanie pędu*

całkowity pęd w kierunku  $X$

$$\iiint_V \rho v_x dV \quad (113)$$

składowa  $v_x$  rośnie dzięki konwekcji pędu i działaniu ciśnienia

$$\oiint_S (\rho v_x v + p \hat{e}_x) \cdot dS \quad (114)$$

czyli zachowanie pędu w kierunku  $X$  daje

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho v_x dV = - \iiint_V \nabla \cdot (\rho v_x v + p \hat{e}_x) dV \quad (115)$$

czyli

$$\frac{\partial \rho v_x}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v_x v + p \hat{e}_x) = 0 \quad (116)$$

i łącznie z równaniami dla pozostałych kierunków

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v v + p I) = 0 \quad (117)$$

- *zachowanie ładunku elektrycznego*

strumień to gęstość prądu przez powierzchnię

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho dV = - \oiint_S j \cdot dS \quad (118)$$

czyli

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot j = 0 \quad (119)$$

ale z prawa Gaussa  $\nabla \cdot E = 4\pi\rho/\varepsilon$



$$\nabla \cdot \left( \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{4\pi j}{\varepsilon} \right) = 0 \quad (120)$$

czyli to co w nawiasie jest rotacją pewnej wielkości

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{4\pi j}{\varepsilon} = \nabla \times B \quad (121)$$

- *zachowanie strumienia magnetycznego*

z prawa Faradaya strumień magnetyczny przez powierzchnię  $S$  jest całką pola elektrycznego po jej obwodzie

$$\frac{\partial}{\partial t} \iint_S B \cdot dS = - \oint_L E \cdot dl \quad (122)$$

i z twierdzenia Stokesa

$$\frac{\partial B}{\partial t} + \nabla \times E = 0 \quad (123)$$

jak widać wszystkie z w/w zasad zachowania można przedstawić w tzw. postaci zachowawczej

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot f = 0 \quad (124)$$

gdzie „strumień”  $f = f(u)$  (oczywiście  $u = u(x, t)$ )

### Związek dyspersyjny dla zjawisk fizycznych

Równania różniczkowe cząstkowe wiążą punkty w czasie i przestrzeni. Proste, liniowe własności tych równań można opisać przez zachowanie się fali w czasie i przestrzeni, rozważając pojedynczą falę (mod Fouriera)

$$u(x, t) = \hat{u}e^{i(\omega t - kx)} \quad (125)$$

po podstawieniu do równania opisującego zjawisko otrzymujemy tzw. związek dyspersyjny

$$\omega = \omega(k) \quad (126)$$

czyli związek pomiędzy charakterystyczną skalą czasową a długością fali zjawiska opisywanego przez równanie

- *równanie falowe*

równanie falowe

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} - V_s^2 \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} = 0 \quad (127)$$

po podstawieniu  $\xi(x, t) = \hat{\xi}e^{i(\omega t - kx)}$  otrzymamy związek dyspersyjny

$$-\omega^2 + k^2 V_s^2 = 0 \quad (128)$$

lub

$$\tau = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi}{V_s k} = \frac{\lambda}{V_s} \quad (129)$$

- *równanie adwekcji*

opisuje sytuację, gdy własności np. cieczy są unoszone przez ciecż – np. unoszenie masy

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho v = 0 \quad (130)$$

rozpisując iloczyn pod pochodną

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + v \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot v = 0 \quad (131)$$

lub

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot v = 0 \quad (132)$$

gdzie

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + v \cdot \nabla \quad (133)$$

to tzw. pochodna substancjalna (Lagrange'a)

dla cieczy nieściśliwej ( $\nabla \cdot v = 0$ ) mamy postać równania adwekcji

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + v \cdot \nabla \rho = 0 \quad (134)$$

podstawiając mod Fouriera  $\rho = \hat{\rho}e^{i(\omega t - kx)}$  otrzymamy

$$\omega = kv \quad (135)$$

lub

$$\tau = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi}{vk} = \frac{\lambda}{v} \quad (136)$$

- *równanie dyfuzji*

w najprostszym (jednowymiarowym) przypadku

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \kappa \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (137)$$

podstawiając  $u = \hat{u}e^{i(\omega t - kx)}$  otrzymamy

$$i\omega + \kappa k^2 = 0 \quad (138)$$

czyli

$$\omega = i\kappa k^2 \quad (139)$$

częstość jest urojona, czyli mod zanika w skali czasowej

$$\tau = \frac{2\pi}{i\omega} = \frac{2\pi}{\kappa k^2} = \frac{\lambda^2}{2\pi\kappa} \quad (140)$$

- *równanie eliptyczne*

równania typu Laplace'a i Poissona

$$\nabla^2 \Phi = -\rho \quad (141)$$

opisują układy statyczne, lub zakładające natychmiastowe rozchodzenie się informacji

$$\omega \rightarrow \infty \quad (142)$$

lub

$$\tau \rightarrow 0 \quad (143)$$

ogólnie równanie drugiego stopnia możemy zapisać

$$a \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + d \frac{\partial \Phi}{\partial x} + e \frac{\partial \Phi}{\partial y} + f \Phi + g = 0 \quad (144)$$

i klasyfikuje się je na

hiperboliczne	gdy	$b^2 - 4ac > 0$
paraboliczne	gdy	$b^2 - 4ac = 0$
eliptyczne	gdy	$b^2 - 4ac < 0$

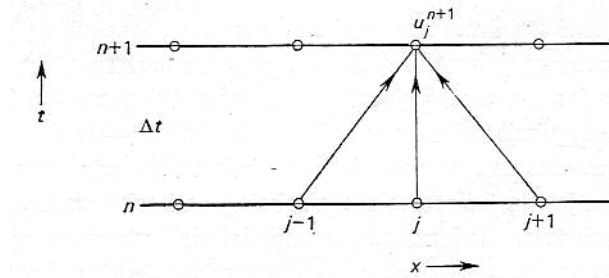
## Całkowanie jawne pierwszego rzędu równania dyfuzji

chcemy scałkować równanie

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad (145)$$

używając schematu Eulera mamy

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2} (u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n) \quad (146)$$



wyliczmy współczynnik wzmocnienia dla przestrzennego modu Fouriera

$$u = \hat{u}(t)e^{ikx} \quad (147)$$

podstawiając mamy

$$\hat{u}^{n+1} e^{ikx_j} = \hat{u}^n e^{ikx_j} + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2} \hat{u}^n (e^{ikx_{j-1}} - 2e^{ikx_j} + e^{ikx_{j+1}}) \quad (148)$$

czyli

$$\hat{u}^{n+1} = \hat{u}^n \left\{ 1 + \frac{2\kappa \Delta t}{\Delta^2} \left( \frac{1}{2} e^{ik\Delta} + \frac{1}{2} e^{-ik\Delta} - 1 \right) \right\} \quad (149)$$

i współczynnik wzmocnienia

$$g(\Delta t, \Delta, k) = 1 + 2 \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2} [\cos(k\Delta) - 1] \quad (150)$$

lub

$$g(\Delta t, \Delta, k) = 1 - \frac{4\kappa \Delta t}{\Delta^2} \sin^2 \left( \frac{k\Delta}{2} \right) \quad (151)$$

żeby spełnić  $|g| \leq 1$  dla każdego  $k$  musi zachodzić

$$-4 \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2} \geq -2 \quad (152)$$

czyli

$$\Delta t \leq 0.5 \frac{\Delta^2}{\kappa} \tag{153}$$

dokładność metody Eulera jest  $O(\Delta t) + O(\Delta^2)$

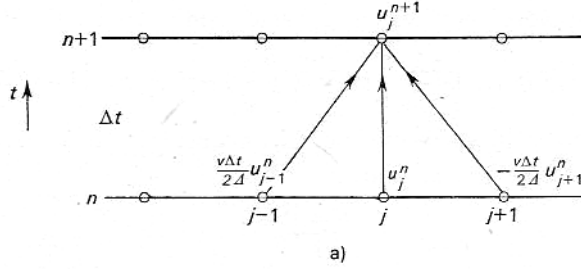
## Całkowanie jawne pierwszego rzędu równania adwekcji

zróbmy to samo dla równania adwekcji

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (154)$$

na dyskretnej siatce w pierwszym rzędzie mamy

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{v\Delta t}{2\Delta} (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) \quad (155)$$



podstawiając przestrzenny mod Fouriera

$$\hat{u}^{n+1} e^{ikx_j} = \hat{u}^n e^{ikx_j} - \frac{v\Delta t}{2\Delta} \hat{u}^n (e^{ikx_{j+1}} - e^{ikx_{j-1}}) \quad (156)$$

lub

$$\hat{u}^{n+1} = \hat{u}^n \left\{ 1 - i \frac{v\Delta t}{\Delta} \sin(k\Delta) \right\} \quad (157)$$

jeśli  $\alpha = (v\Delta t/\Delta) \sin(k\Delta)$  to współczynnik wzmocnienia

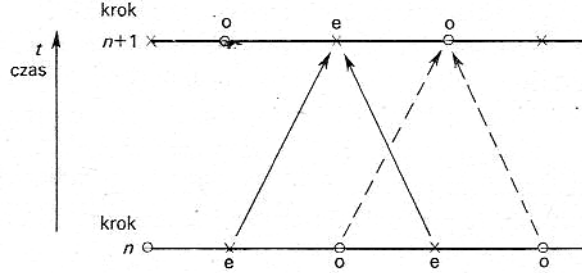
$$|g|^2 = 1 + \alpha^2 \quad (158)$$

i schemat jest niestabilny

spróbujmy zastąpić  $u_j^n$  przez średnią z sąsiednich punktów w przestrzeni

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) - \frac{v\Delta t}{2\Delta} (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) \quad (159)$$

taki schemat nazywa się schematem Laxa



dla przestrzennego modu Fouriera

$$\hat{u}^{n+1} = \hat{u}^n \left\{ \cos(k\Delta) - i \frac{v\Delta t}{\Delta} \sin(k\Delta) \right\} \quad (160)$$

i amplituda współczynnika wzmocnienia

$$|g|^2 = \cos^2(k\Delta) + \left( \frac{v\Delta t}{\Delta} \right)^2 \sin^2(k\Delta) \quad (161)$$

lub

$$|g|^2 = 1 - \sin^2(k\Delta) \left\{ 1 - \left( \frac{v\Delta t}{\Delta} \right)^2 \right\} \quad (162)$$

warunek stabilności będzie spełniony dla

$$\frac{|v\Delta t|}{\Delta} \leq 1 \quad (163)$$

czyli

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{|v|} \quad (164)$$

dla równań hiperbolicznych to tzw. warunek *Couranta–Friedrichsa–Lewy’ego*  
**Dyspersja i dyfuzja na siatce różnicowej**

Dlaczego metoda Eulera dla adwekcji nie jest stabilna a Laxa tak – obie są pierwszego rzędu, obie nie są wycelowane w czasie.

przepiszmy schemat Laxa do postaci

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}(u_j^{n+1} - u_j^{n-1}) + \frac{1}{2}(u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_j^{n-1}) \\ &= \frac{1}{2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) - \frac{v\Delta t}{2\Delta}(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) \end{aligned} \quad (165)$$



odpowiada to schematowi drugiego rzędu dla równania różniczkowego

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\Delta^2}{2\Delta t} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + v \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (166)$$

drugi człon powoduje niestabilność, trzeci stabilizuje, żeby zapewnić stabilność potrzeba aby

$$\frac{\Delta^2 k^2}{2\Delta t} \geq \frac{\Delta t}{2} \omega^2 \quad (167)$$

dla modu Fouriera liczbie falowej  $k$  i częstości  $\omega \sim vk$

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{|v|} \quad (168)$$

To co powyżej dotyczy stabilności schematu, ale to nie wszystko. Jakie są własności numeryczne schematu związane z dyfuzją i dyspersją rozwiązania – można to analizować przy pomocy związku dyspersyjnego.

$$\omega = \omega(k, \Delta, \Delta t) \quad (169)$$

podstawiając mod Fouriera  $u(x, t) = \hat{u}e^{i(\omega t - kx)}$  do równania różniczkowego (adwekcji) otrzymamy

$$\omega = vk \quad (170)$$

$\omega$  jest rzeczywiste, nie ma ani dyfuzji ani dyspersji w schemacie różnicowym (Laxa)

$$\hat{u}e^{i[\omega(t^n + \Delta t) - kx_j]} = \frac{1}{2} \hat{u}e^{i(\omega t - kx_j)} \left\{ (e^{ik\Delta} + e^{-ik\Delta}) - \frac{v\Delta t}{\Delta} (e^{ik\Delta} - e^{-ik\Delta}) \right\} \quad (171)$$

po skróceniu

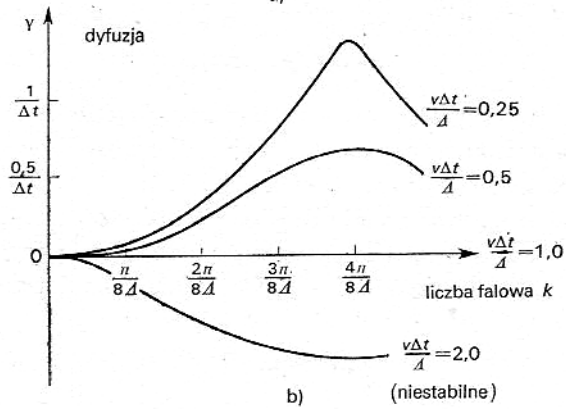
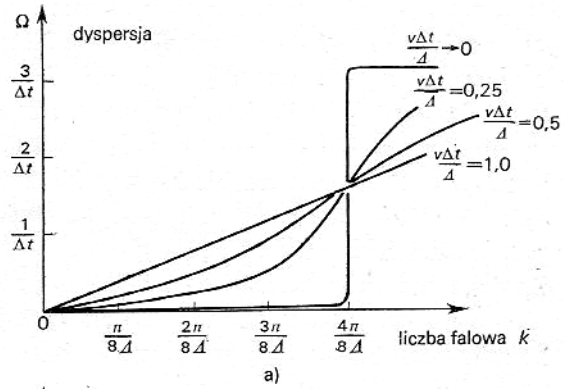
$$e^{i\omega\Delta t} = \cos(k\Delta) - \frac{v\Delta t}{\Delta} i \sin(k\Delta) \quad (172)$$

ogólnie  $\omega$  jest zespolone:  $\omega = \Omega + i\gamma$  i porównując części urojone i rzeczywiste w związku dyspersyjnym otrzymujemy

$$\text{tg}(\Omega\Delta t) = \frac{v\Delta t}{\Delta} \text{tg}(k\Delta) \quad (173)$$

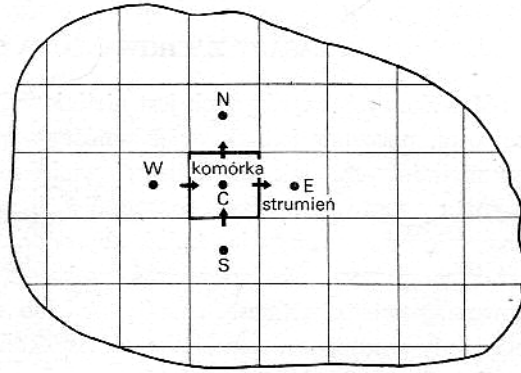
$$e^{-2\gamma\Delta t} = \cos^2(k\Delta) + \left( \frac{v\Delta t}{\Delta} \right)^2 \sin^2(k\Delta) \quad (174)$$

dla  $v\Delta t/\Delta = 1$  jak dla równania różniczkowego  $\gamma = 0$  i  $\Omega = vk$  dla małych liczb falowych (długich fal) dyfuzja i dyspersja jest (może być) akceptowalna, dla dużych  $k$  (krótkich fal) jest znacznie gorzej



### Zasady zachowania na siatce różnicowej

Rozważmy pewien prostokątny obszar  $R$  ograniczony przez brzeg  $B$  i dzielimy go na zbiór  $I \times J$  elementarnych komórek o objętości  $\Delta V$  każda.



całkując równanie zachowacze

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot f = 0 \quad (175)$$

po każdej komórce czasowo-przestrzennej  $C$  (z brzegiem,  $A$ )

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \iint_C \frac{\partial u}{\partial t} dV dt = - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \iint_C \nabla \cdot f dV dt \quad (176)$$

czyli

$$\iint_C u^{n+1} dV - \iint_C u^n dV = - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \oint_A f \cdot dS dt \quad (177)$$

jeśli oznaczymy wartości „globalne” (w komórce)

$$\Delta V \tilde{u}_{ij}^n = \iint_C u^n dV \quad (178)$$

i strumienie przez poszczególne powierzchnie

$$\sum_{\alpha=\{E,N,W,S\}} F_{\alpha ij} = \oint_A f \cdot dS \quad (179)$$

to

$$\tilde{u}_{ij}^{n+1} = \tilde{u}_{ij}^n - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{1}{\Delta t} \sum_{\alpha} F_{\alpha ij} dt \quad (180)$$

taki schemat jest schematem zachowawczym (niezależnie od sposobu wyliczania strumienia) – jeśli równanie różniczkowe zachowuje  $\int_R u dV$  to i schemat różnicowy zachowuje te zmienne

zauważmy, że np.

$$F_{Eij} = -F_{W_{i+1,j}} \quad (181)$$

to sumując po całym obszarze  $R$

$$\sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \tilde{u}_{ij}^{n+1} = \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \tilde{u}_{ij}^n - \sum_B \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{1}{\Delta V} F_{\alpha} dt \quad (182)$$

### Metody zachowawcze dla równań hiperbolicznych

dla przypomnienia równanie hiperboliczne

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (183)$$

- zachowawcza metoda Laxa

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) - (f_{j+1}^n - f_{j-1}^n) \frac{\Delta t}{2\Delta} \quad (184)$$

jeśli  $f = vu$  to mamy równanie adwekcji, i warunek stabilności  $\Delta t \leq \Delta/|v|$

dla przykładu weźmy równania opisujące rozchodzenie się spolaryzowanej fali elektromagnetycznej

$$\frac{\partial B}{\partial t} + c \frac{\partial E}{\partial x} = 0 \quad (185)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + c \frac{\partial B}{\partial x} = 0 \quad (186)$$

gdzie  $E = E_y$ ,  $B = cB_z$  (i  $c = 1/\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}$ )

wstawiając w metodzie Laxa  $u = (E, B)$  i strumień  $f = (cB, cE)$  mamy

$$E_j^{n+1} = \frac{1}{2}(E_{j+1}^n + E_{j-1}^n) - (B_{j+1}^n - B_{j-1}^n) \frac{c\Delta t}{2\Delta} \quad (187)$$

$$B_j^{n+1} = \frac{1}{2}(B_{j+1}^n + B_{j-1}^n) - (E_{j+1}^n - E_{j-1}^n) \frac{c\Delta t}{2\Delta} \quad (188)$$

podstawiając mod Fouriera

$$u^n = (\hat{E}^n e^{ikx}, \hat{B}^n e^{ikx}) \quad (189)$$

otrzymamy macierz wzmocnienia

$$G = \begin{bmatrix} \cos(k\Delta) & \frac{-ic\Delta t}{\Delta} \sin(k\Delta) \\ \frac{-ic\Delta t}{\Delta} \sin(k\Delta) & \cos(k\Delta) \end{bmatrix} \quad (190)$$

i wartości własne

$$[\cos(k\Delta) - g]^2 = \frac{c^2(\Delta t)^2}{\Delta^2} \sin^2(k\Delta) \quad (191)$$

czyli

$$g = \cos(k\Delta) \pm \frac{ic\Delta t}{\Delta} \sin(k\Delta) \quad (192)$$

obie dają

$$|g|^2 = 1 - \sin^2(k\Delta) \left[ 1 - \frac{c^2(\Delta t)^2}{\Delta^2} \right] \quad (193)$$

i jak ostatnio

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{c} \quad (194)$$

ale dla przypomnienia – metoda nie jest wycentrowana w czasie i pojawia się człon destabilizujący – konieczność ekstra dyfuzji i w efekcie rozmywanie rozwiązania

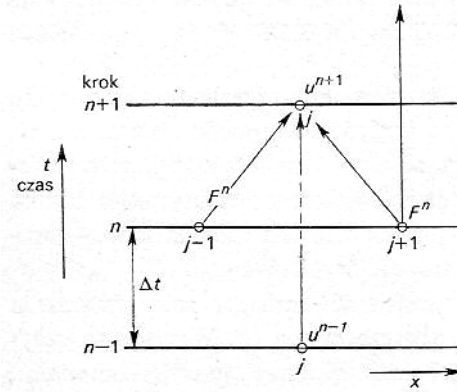
- *zachowawcza metoda skokowa*

spróbujemy wycentrować w czasie schemat – jak w metodzie skokowej

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} - \frac{\Delta t}{\Delta} (f_{j+1}^n - f_{j-1}^n) \quad (195)$$

gdzie  $f_j^n = f(u_j^n)$ , i w następnym kroku

$$u_{j+1}^{n+2} = u_{j+1}^n - \frac{\Delta t}{\Delta} (f_{j+2}^{n+1} - f_j^{n+1}) \quad (196)$$



w najprostszym przypadku ( $f = vu$ ) mamy współczynnik wzmocnienia

$$g^2 = 1 - i \frac{2\Delta t}{\Delta} v \sin(k\Delta)g \quad (197)$$

czyli

$$g = i\alpha \pm \sqrt{-\alpha^2 + 1} \quad (198)$$

gdzie  $\alpha = (\Delta t/\Delta)v \sin(k\Delta)$ , dla  $|\alpha| \leq 1$  mamy  $|g| = 1$  czyli (jak zwykle)

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{|v|} \quad (199)$$

- *Dwustopniowy schemat Laxa-Wendroffa*

krok pomocniczy – jak w metodzie Laxa

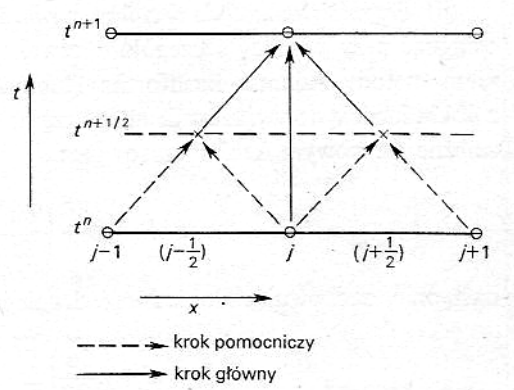
$$u_{j+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2}(u_j^n + u_{j+1}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta}(f_{j+1}^n - f_j^n) \quad (200)$$

stąd wyliczamy strumienie w punktach „połówkowych”

$$f_{j+1/2}^{n+1/2} = f(u_{j+1/2}^{n+1/2}) \quad (201)$$

oraz krok główny

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta}(f_{j+1/2}^{n+1/2} - f_{j-1/2}^{n+1/2}) \quad (202)$$



wartości  $u_{j+1/2}^{n+1/2}$  nie są pamiętane

stabilność dla  $f = vu$  dostaniemy podstawiając mod Fouriera

$$g = 1 - \frac{v\Delta t}{\Delta} \left\{ i \sin(k\Delta) - \frac{v\Delta t}{\Delta} [\cos(k\Delta) - 1] \right\} \quad (203)$$

lub jeśli  $\alpha = v\Delta t/\Delta$

$$g = 1 - i\alpha \sin(k\Delta) + \alpha^2 [\cos(k\Delta) - 1] \quad (204)$$

i moduł

$$|g|^2 = 1 - \alpha^2(1 - \alpha^2)[1 - \cos(k\Delta)]^2 \quad (205)$$

i znowu – stabilny schemat dla  $\alpha^2 \leq 1$ , i stąd

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{|v|} \quad (206)$$

zauważmy, że dla  $\alpha < 1$  współczynnik wzmocnienia jest mniejszy od 1, czyli krótsze mody Fouriera zanikają, ale

$$|g|^2 = 1 - \alpha^2(1 - \alpha^2) \frac{k^4 \Delta^4}{4} + O(k^4 \Delta^4) \quad (207)$$

dyfuzja numeryczna jest efektem dopiero czwartego rzędu (niewielka dyfuzja jest zwykle korzystna)

- *Przybliżona metoda drugiego rzędu*

jeśli zachować drugi wyraz rozwinięcia w szereg Taylora

$$u^{n+1} = u^n + \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_n \Delta t + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_n \frac{(\Delta t)^2}{2} \quad (208)$$

i dalej

$$u^{n+1} = u^n + \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_n \Delta t + \left[ \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_n - \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_{n-1} \right] \frac{\Delta t}{2} \quad (209)$$

i dla zachowawczych równań hiperbolicznych mamy

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \left(\frac{3}{2} + \varepsilon\right) \frac{\Delta t}{2\Delta} (f_{j+1}^n - f_{j-1}^n) + \left(\frac{1}{2} + \varepsilon\right) \frac{\Delta t}{2\Delta} (f_{j+1}^{n-1} - f_{j-1}^{n-1}) \quad (210)$$

dla jakiegoś małego  $\varepsilon$

współczynnik wzmocnienia dla  $f = vu$

$$g^2 = g - (3/2 + \varepsilon)i\alpha g + (1/2 + \varepsilon)i\alpha \quad (211)$$

gdzie  $\alpha = (v\Delta t/\Delta) \sin(k\Delta)$

dla  $|\alpha| \leq 1/2$  otrzymamy  $|g| < 1$  jeśli

$$\varepsilon > \frac{1}{4}\alpha^2 + \frac{1}{2}\alpha^4 + O(\alpha^4) \quad (212)$$

np. dla  $\Delta t = \frac{1}{2} \frac{\Delta}{|v|}$  potrzeba aby  $\varepsilon \geq 3/32$

kosztem małego  $\Delta t$  można wybrać dowolnie małe  $\varepsilon$  i przez to dowolnie zbliżyć się do dokładności rzędu drugiego

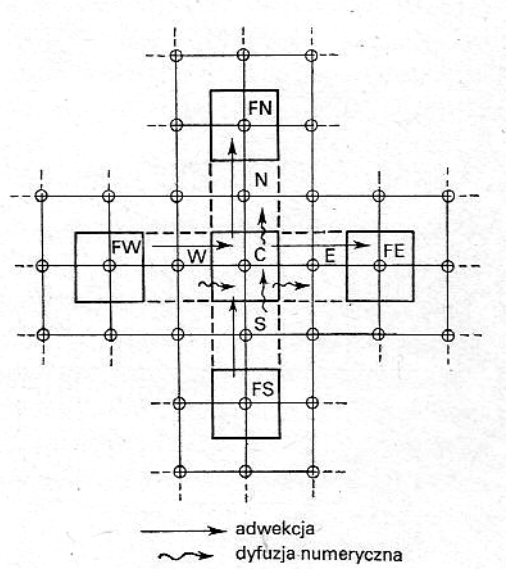


## Wielowymiarowe metody jawne

W przypadku  $N$  wymiarowym schemat Laxa ma postać

$$u^{n+1} = \frac{1}{2N} \sum_{\alpha=-N}^N u_{\alpha}^n - \sum_{\alpha=1}^N (f_{\alpha}^n - f_{-\alpha}^n) \frac{\Delta t}{2\Delta} \quad (213)$$

gdzie  $\alpha$  odnosi się do  $2N$  sąsiadujących komórek w  $N$  wymiarach przestrzennych



w analizie stabilności (np. w dwóch wymiarach) podstawiamy  $u = \hat{u}e^{ik_x x + ik_y y}$  i np. dla równania adwekcji  $f_x = v_x u$  i  $f_y = v_y u$

$$u_{ij}^{n+1} = \frac{1}{4} (u_{i+1,j}^n + u_{i-1,j}^n + u_{i,j+1}^n + u_{i,j-1}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta} v_x (u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta} v_y (u_{i,j+1}^n - u_{i,j-1}^n) \quad (214)$$

oznaczając  $\theta_x = v_x \Delta t / \Delta$ ,  $\theta_y = v_y \Delta t / \Delta$ ,  $\alpha = k_x \Delta$  i  $\beta = k_y \Delta$  mamy

$$g = \frac{1}{2} \cos \alpha + \frac{1}{2} \cos \beta - i\theta_x \sin \alpha - i\theta_y \sin \beta \quad (215)$$

oraz

$$|g|^2 = 1 - (\sin^2 \alpha + \sin^2 \beta) \left[ \frac{1}{2} - (\theta_x^2 + \theta_y^2) \right] - \frac{1}{4} (\cos \alpha - \cos \beta)^2 - (\theta_y \sin \alpha - \theta_x \sin \beta)^2 \quad (216)$$

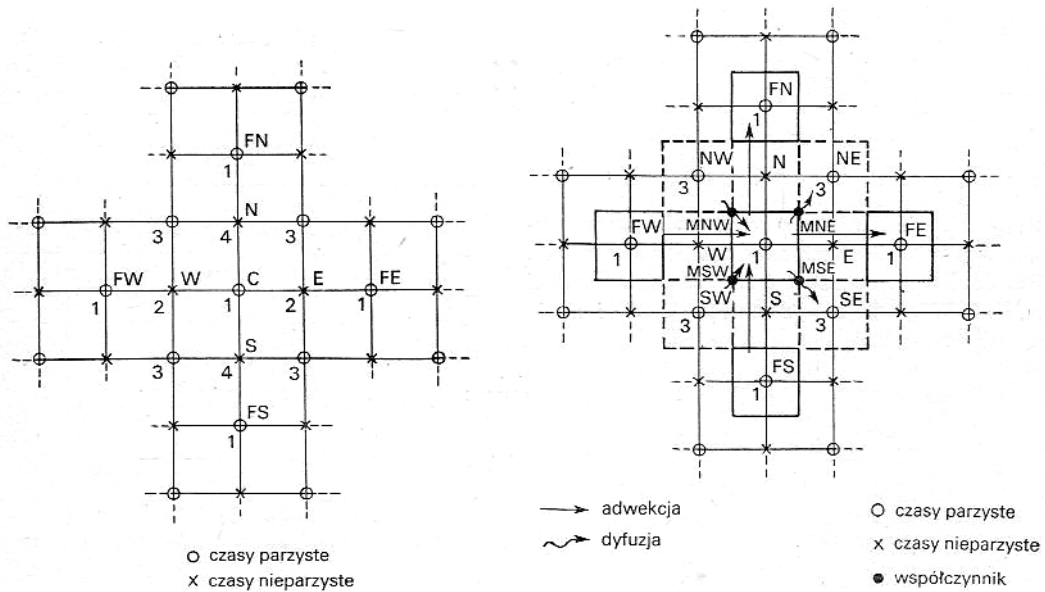
warunek stabilności będzie spełniony, gdy

$$\frac{1}{2} - (\theta_x^2 + \theta_y^2) \geq 0 \quad (217)$$

lub

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{(v_x^2 + v_y^2)^{1/2} \sqrt{2}} \quad (218)$$

w innych schematach mogą się pojawić problemy ze słabym sprzężeniem siatki w różnych kierunkach – może się okazać konieczne stosowanie sztucznej dyfuzji „po przekątnej”



## Metody dla równań parabolicznych

ustalmy uwagę na równaniu dyfuzji

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad (219)$$

- *metoda jawna pierwszego rzędu*

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \quad (220)$$

jak już wiemy, stabilne dla

$$\Delta t \leq \frac{1}{2} \cdot \frac{\Delta^2}{\kappa} \quad (221)$$

- *metoda niejawna Cranka-Nicholsona*

analogiczna do metody niejawnej drugiego rzędu

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} = u_j^n &+ \frac{\kappa \Delta t}{2\Delta^2} (u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) \\ &+ \frac{\kappa \Delta t}{2\Delta^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \end{aligned} \quad (222)$$

podobnie, współczynnik wzmocnienia

$$g = \frac{1 - \frac{2\kappa \Delta t}{\Delta^2} \sin^2\left(\frac{k\Delta}{2}\right)}{1 + \frac{2\kappa \Delta t}{\Delta^2} \sin^2\left(\frac{k\Delta}{2}\right)} \quad (223)$$

i metoda jest bezwzględnie stabilna

- *niestabilna metoda skokowa*

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + 2\frac{\kappa \Delta t}{\Delta^2} (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \quad (224)$$

ale dla niej współczynnik wzmocnienia

$$g = -\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 1} \quad (225)$$

gdzie

$$\alpha = \frac{4\kappa \Delta t}{\Delta^2} \sin\left(\frac{k\Delta}{2}\right) \quad (226)$$

jest zawsze niestabilna

- *metoda Duforta-Frankla*

weźmy następującą modyfikację metody skokowej

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + 2\frac{\kappa\Delta t}{\Delta^2} [u_{j+1}^n - (u_j^{n+1} + u_j^{n-1}) + u_{j-1}^n] \quad (227)$$

można przekształcić to do postaci jawnej

$$u_j^{n+1} = \left(\frac{1-\alpha}{1+\alpha}\right) u_j^{n-1} + \frac{\alpha}{1+\alpha} (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) \quad (228)$$

gdzie  $\alpha = 2\kappa\Delta t/\Delta^2$  i tradycyjnie współczynnik wzmocnienia

$$g = \frac{1}{1+\alpha} \left[ \alpha \cos(k\Delta) \pm \sqrt{1 - \alpha^2 \sin^2(k\Delta)} \right] \quad (229)$$

dla małych kroków czasowych  $\alpha^2 \sin^2(k\Delta) \leq 1$  jest rzeczywisty i mniejszy od jedności dla obu pierwiastków

dla dużych kroków czasowych  $\alpha^2 \sin^2(k\Delta) > 1$  jest zespolony, ale

$$|g| = \frac{1-\alpha}{1+\alpha} \quad (230)$$

i metoda jest zawsze stabilna

□

## Metody „upwind” typu Godunova

Przestrzenna dyskretyzacja oparta na centrowanym schemacie

$$\frac{\partial u}{\partial x} \rightarrow \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} \quad (231)$$

nie odzwierciedla natury adwekcji – nie wyróżnia kierunku. Z kolei jednostronne ilorazy różnicowe odzwierciedlają naturę równania tylko dla konkretnego kierunku unoszenia. Rozważmy taką dyskretyzację równania adwekcji

$$\begin{aligned} \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + v \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} &= 0 \quad , \quad v > 0 \\ \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + v \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x} &= 0 \quad , \quad v < 0 \end{aligned} \quad (232)$$

schemat ten jest stabilny odpowiednio dla

$$\begin{aligned} 0 \leq \frac{v\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad , \quad v > 0 \\ -1 \leq \frac{v\Delta t}{\Delta x} \leq 0 \quad , \quad v < 0 \end{aligned} \quad (233)$$

można to zapisać dla równań zachowawczych  $\partial u/\partial t + \partial f/\partial x = 0$ , gdzie  $f = vu$

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \frac{f_{i+1/2}^n - f_{i-1/2}^n}{\Delta x} = 0 \quad (234)$$

gdzie

$$\begin{aligned} f_{i+1/2}^n &= v^+ u_i^n + v^- u_{i+1}^n \\ f_{i-1/2}^n &= v^+ u_{i-1}^n + v^- u_i^n \end{aligned} \quad (235)$$

przy czym

$$\begin{aligned} v^+ &= \max(v, 0) = (v + |v|)/2 \\ v^- &= \min(v, 0) = (v - |v|)/2 \end{aligned} \quad (236)$$

niestety jest to schemat tylko pierwszego rzędu.

Istnieje kilka modyfikacji schematu Godunova poprawiające rząd dokładności:

- MUSCL (*monotonic upwind scheme for conservation flows*) – drugiego rzędu;
- PPM (*piecewise parabolic method*) – trzeciego;
- ENO (*essentially non-oscillatory scheme*) – czwartego i wyższych.

Np. dla schematu MUSCL  $u(x, t)$  aproksymuje się na obszarze komórki w każdym kroku czasowym

$$\bar{u}(x, t) = u_i + s_i(x - \bar{x}_i) \quad (237)$$

gdzie  $\bar{x}_i = (x_i + x_{i+1})/2$ , a nachylenie  $s_i$  może mieć postać

$s_i = 0$  – schemat Godunova

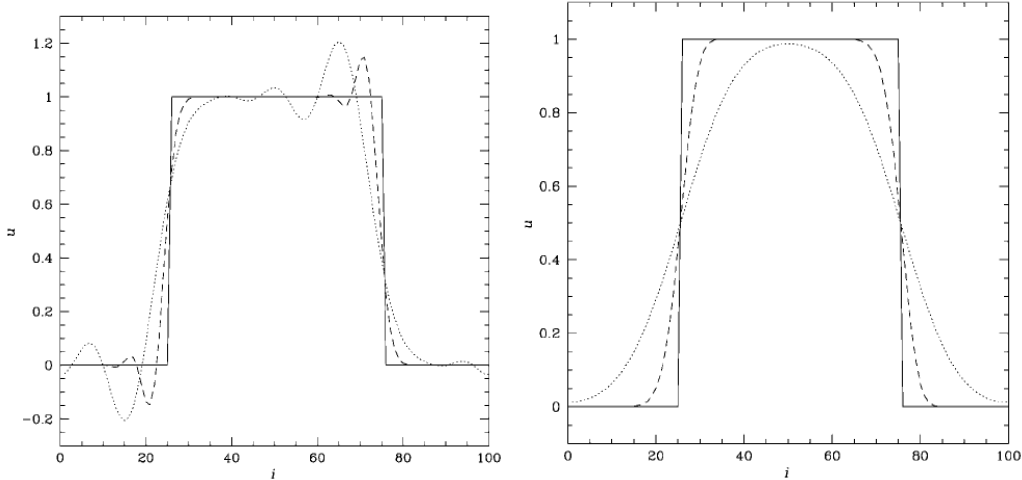
$s_i = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x}$  – schemat Fromma

$s_i = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}$  – schemat Beama-Warmminga

$s_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$  – schemat Laxa-Wendroffa

$s_i = \text{minmod}\left(\frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}, \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}\right)$  – schemat minmod

$$\text{minmod}(a, b) = \begin{cases} a, & |a| < |b|, ab > 0 \\ b, & |a| > |b|, ab > 0 \\ 0, & ab < 0 \end{cases} \quad (238)$$



Lax-Wendroff i "upwind" 1. stopnia

## Metody TVD

Jeśli funkcja jest monotoniczna w kroku  $n$ ,

$$\min(u_{i-1}, u_{i+1}) \leq u_i \leq \max(u_{i-1}, u_{i+1}) \quad (239)$$

to chcemy, żeby pozostała taką w kroku  $n + 1$ .

Zdefiniujmy całkowitą zmienność (*total variation*)

$$TV(u^n) = \sum_i |u_i^n - u_{i-1}^n| \quad (240)$$

metodę definiujemy jako stabilną ze względu na całkowitą zmienność, jeśli

$$TV(u^n) \leq c \quad (241)$$

dla każdego kroku czasowego.

Metody TVD (*total variation diminishing*) wymagają, żeby

$$TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n) \quad (242)$$

Rozważmy przykład metody TVD drugiego rzędu – strumień (pierwszego rzędu) na brzegu kostki

$$f_{i+1/2}^n = \begin{cases} f_i^n, & v > 0 \\ f_{i+1}^n, & v < 0 \end{cases} \quad (243)$$

poprawiamy o poprawki dla  $v > 0$

$$\begin{aligned} \Delta f_{i+1/2}^{L,n} &= \frac{f_i^n - f_{i-1}^n}{2} \\ \Delta f_{i+1/2}^{R,n} &= \frac{f_{i+1}^n - f_i^n}{2} \end{aligned} \quad (244)$$

oraz dla  $v < 0$

$$\begin{aligned} \Delta f_{i+1/2}^{L,n} &= -\frac{f_{i+1}^n - f_i^n}{2} \\ \Delta f_{i+1/2}^{R,n} &= -\frac{f_{i+2}^n - f_{i+1}^n}{2} \end{aligned} \quad (245)$$

i samą poprawkę wyliczamy z  $\Delta f^L$  i  $\Delta f^R$

$$\Delta f_{i+1/2}^n = \phi \left( \Delta f_{i+1/2}^{L,n}, \Delta f_{i+1/2}^{R,n} \right) \quad (246)$$

gdzie  $\phi$  to tzw. ogranicznik (*limiter*).

Drugi rząd obliczeń otrzymujemy stosując schemat Rungego-Kutty 2. stopnia:

– krok pomocniczy (połówkowy):

$$u_i^{n+1/2} = u_i^n - \frac{f_{i+1/2}^n - f_{i-1/2}^n}{\Delta x} \cdot \frac{\Delta t}{2} \quad (247)$$

i następnie pełny krok:

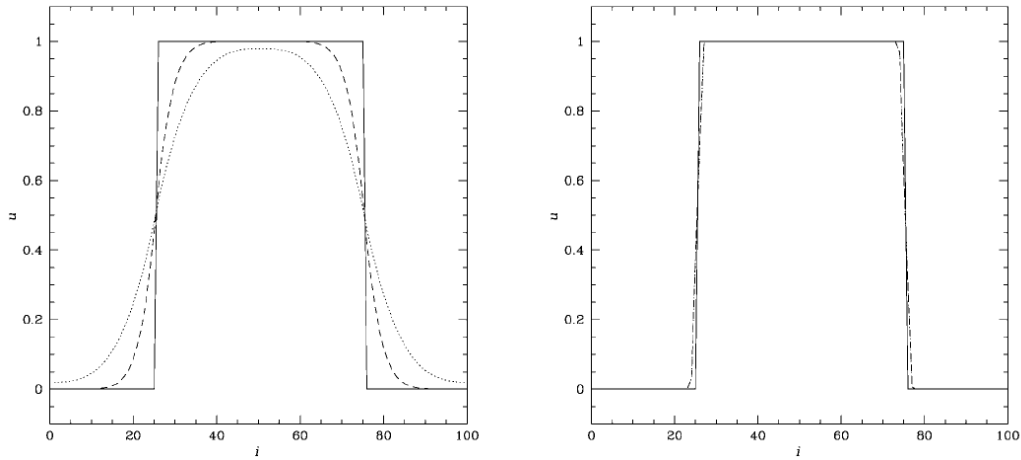
$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{f_{i+1/2}^{n+1/2} - f_{i-1/2}^{n+1/2}}{\Delta x} \cdot \Delta t \quad (248)$$

jako *limiter* używa się:

$$\phi(a, b) = \text{minmod}(a, b) \quad (249)$$

$$\phi(a, b) = \text{superbee}(a, b) = \begin{cases} \text{minmod}(a, 2b), & |a| \geq |b| \\ \text{minmod}(2a, b), & |a| \leq |b| \end{cases} \quad (250)$$

$$\phi(a, b) = \text{vanleer}(a, b) = \frac{2ab}{a+b}, \quad ab > 0 \quad (251)$$



minmod i superbee





### Zastosowanie do równiań hydrodynamiki

Przepływający ośrodek możemy traktować jako sumę lewo- i prawobieżnego przepływu  $u = u^R + u^L$ , gdzie dla  $c = |v|$

$$u^R = \left( \frac{1 + v/c}{2} \right) u \quad (252)$$

$$u^L = \left( \frac{1 - v/c}{2} \right) u \quad (253)$$

Oba strumienie płyną w przeciwnych kierunkach z prędkością  $c$  i można je opisać równaniami adwekcji

$$\frac{\partial u^R}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(cu^R) = 0 \quad (254)$$

$$\frac{\partial u^L}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}(cu^L) = 0 \quad (255)$$

i możemy łatwo zastosować schemat MUSCL do równania adwekcji

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f^R}{\partial x} - \frac{\partial f^L}{\partial x} = 0 \quad (256)$$

gdzie strumienie w obu kierunkach  $f^R = cu^R$  i  $f^L = cu^L$ .

Dla dowolnego równania w postaci zachowawczej

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0 \quad (257)$$

(np. dla  $u = (\rho, \rho v, e)$ ) możemy zastąpić je równaniami

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(cw) = 0 \quad (258)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(cu) = 0 \quad (259)$$

gdzie  $c(x, t)$  jest dowolną dodatnią funkcją. W praktyce kładzie się  $w = f(u)/c$ .

Możemy rozwikłać ten układ równań podstawiając

$$u^R = \frac{u + w}{2} \quad (260)$$

$$u^L = \frac{u - w}{2} \quad (261)$$

co daje

$$\frac{\partial u^R}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(cu^R) = 0 \quad (262)$$

$$\frac{\partial u^L}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}(cu^L) = 0 \quad (263)$$

i jak poprzednio dla  $f^R = cu^R$  i  $f^L = cu^L$  mamy

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f^R}{\partial x} - \frac{\partial f^L}{\partial x} = 0 \quad (264)$$

Pozostaje dobrać wartość  $c$  tak, żeby zachować stabilność schematu –  $c$  musi być większe od charakterystycznych szybkości danych przez wartości własne Jacobianu  $\frac{\partial f(u)}{\partial u}$

Dla równań hydrodynamiki

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j) = 0 \quad (265)$$

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_i v_j + p \delta_{ij}) = 0 \quad (266)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}[(e + p)v_j] = 0 \quad (267)$$

gdzie gęstość energii

$$e = \rho \varepsilon + \frac{1}{2} \rho v^2 \quad (268)$$

uzupełnione przez równanie stanu  $p = (\gamma - 1)\varepsilon$ . Warunek stabilności wymaga, żeby szybkość „zamrożenia”  $c$  była większe od charakterystycznej szybkości – największej wartości własnej Jacobianu  $\partial F(u)/\partial u$ . Dla układu równań hydrodynamiki prędkość dźwięku  $c_s^2 = \gamma p/\rho$  i wystarczy żeby

$$c \geq |v| + c_s \quad (269)$$

i warunek na krok czasowy

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{c_{\max}} \quad (270)$$

□

## Metody numeryczne algebry liniowej

Rachunek różnicowy sprawia, że równania różniczkowe zamieniają się w równania macierzowe. Powstaje zatem potrzeba sprawnego rozwiązywania takich równań.

$$\begin{aligned} a_{11}u_1 + a_{12}u_2 + \cdots + a_{1n}u_n &= w_1 \\ a_{21}u_1 + a_{22}u_2 + \cdots + a_{2n}u_n &= w_2 \\ &\vdots \\ a_{m1}u_1 + a_{m2}u_2 + \cdots + a_{mn}u_n &= w_m \end{aligned} \tag{271}$$

lub jak ktoś woli

$$Au = w \tag{272}$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_m \end{bmatrix} \tag{273}$$

jeśli macierz  $A$  jest kwadratowa ( $m = n$ ), to rozwiązanie

$$u = A^{-1}w \tag{274}$$

$A^{-1}$  możemy policzyć np. ze wzorów Cramera

$$(A^{-1})_{ij} = (-1)^{i+j} \frac{|A_{ij}|}{|A|} \tag{275}$$

i wyznacznik

$$|A| = \sum_{i,j=1}^n (-1)^{i+j} |A_{ij}| a_{ij} \tag{276}$$

ale sam wyznacznik to  $n!$  operacji! Zatem potrzeba bardziej wydajnych metod.

### Macierze powstające w rachunku różnic skończonych

Często macierze mają szczególną postać, np. dla równania Poissona

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = -\rho \tag{277}$$

na siatce przestrzennej (z krokiem  $\Delta$ ) mamy

$$\Phi_{j+1} - 2\Phi_j + \Phi_{j-1} = -\Delta^2 \rho_j \quad (278)$$

jeśli położymy warunki brzegowe  $\Phi_1 = w_1$ ,  $\Phi_J = w_J$  to

$$\begin{array}{rcccccc} \Phi_1 & & & & & = & w_1 \\ \Phi_1 & -2\Phi_2 & +\Phi_3 & & & = & -\Delta^2 \rho_2 \\ & \Phi_2 & -2\Phi_3 & +\Phi_4 & & = & -\Delta^2 \rho_3 \\ & & & \dots & & & \\ & & & & \Phi_{J-2} & -2\Phi_{J-1} & \Phi_J = -\Delta^2 \rho_{J-1} \\ & & & & & \Phi_J & = w_J \end{array} \quad (279)$$

i jeśli  $A\Phi = w$  to macierz  $A$  ma postać *trójprzekątniową*

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ & & & \dots & & \\ 0 & & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & & \dots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (280)$$

ogólnie macierze trójprzekątniowe powstają w problemach jedowymiarowych – w ogólnym przypadku

$$f \frac{d^2 u}{dx^2} + g \frac{du}{dx} + hu = w \quad (281)$$

to w postaci różnicowej

$$\frac{f_j}{\Delta^2} (u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}) + \frac{g_j}{2\Delta} (u_{j+1} - u_{j-1}) + h_j u_j = w_j \quad (282)$$

można je przepisać następująco

$$\alpha_j u_{j+1} + \beta_j u_j + \gamma_j u_{j-1} = w_j \quad (283)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \alpha_j &= \frac{f_j}{\Delta^2} + \frac{g_j}{2\Delta} \\ \beta_j &= h_j - \frac{2f_j}{\Delta^2} \\ \gamma_j &= \frac{f_j}{\Delta^2} - \frac{g_j}{2\Delta} \end{aligned} \quad (284)$$

dla  $1 < j < J$  i warunki brzegowe

$$\begin{aligned} \left( a \frac{du}{dx} + bu \right)_{x_1} &= c \\ \left( a' \frac{du}{dx} + b'u \right)_{x_J} &= c' \end{aligned} \quad (285)$$

można je przedstawić w postaci różnicowej

$$\begin{aligned} au_2 + (b\Delta - a)u_1 &= c\Delta \\ -a'u_{J-1} + (b'\Delta + a')u_J &= c'\Delta \end{aligned} \quad (286)$$

lub jeszcze „ładniej”

$$\begin{aligned} \alpha_1 u_2 + \beta_1 u_1 &= w_1 \\ \gamma_J u_{J-1} + \beta_J u_J &= w_J \end{aligned} \quad (287)$$

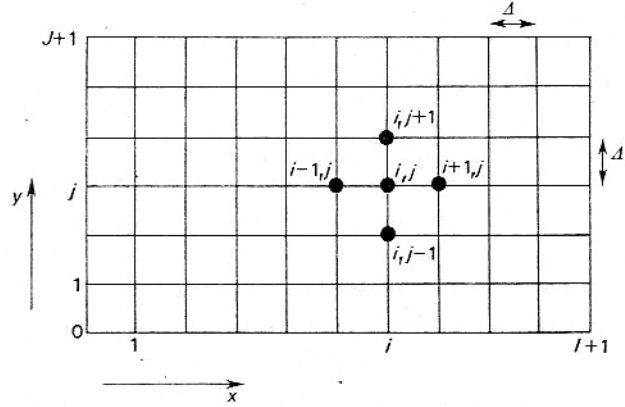
i układ równań jest określony przez trójprzekątniową macierz

$$A = \begin{bmatrix} \beta_1 & \alpha_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \gamma_2 & \beta_2 & \alpha_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \gamma_3 & \beta_3 & \alpha_3 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ & & & \cdots & & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \gamma_J & \beta_J \end{bmatrix} \quad (288)$$

Dla dwuwymiarowego problemu macierz jest dalej *rzadka*, ale już nie trójprzekątniowa – dla równania Poissona

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = -\rho \quad (289)$$

na dwuwymiarowej siatce przestrzennej



$$(\Phi_{i+1,j} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i-1,j}) + (\Phi_{i,j+1} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i,j-1}) = -\Delta^2 \rho_{i,j} \quad (290)$$

lub

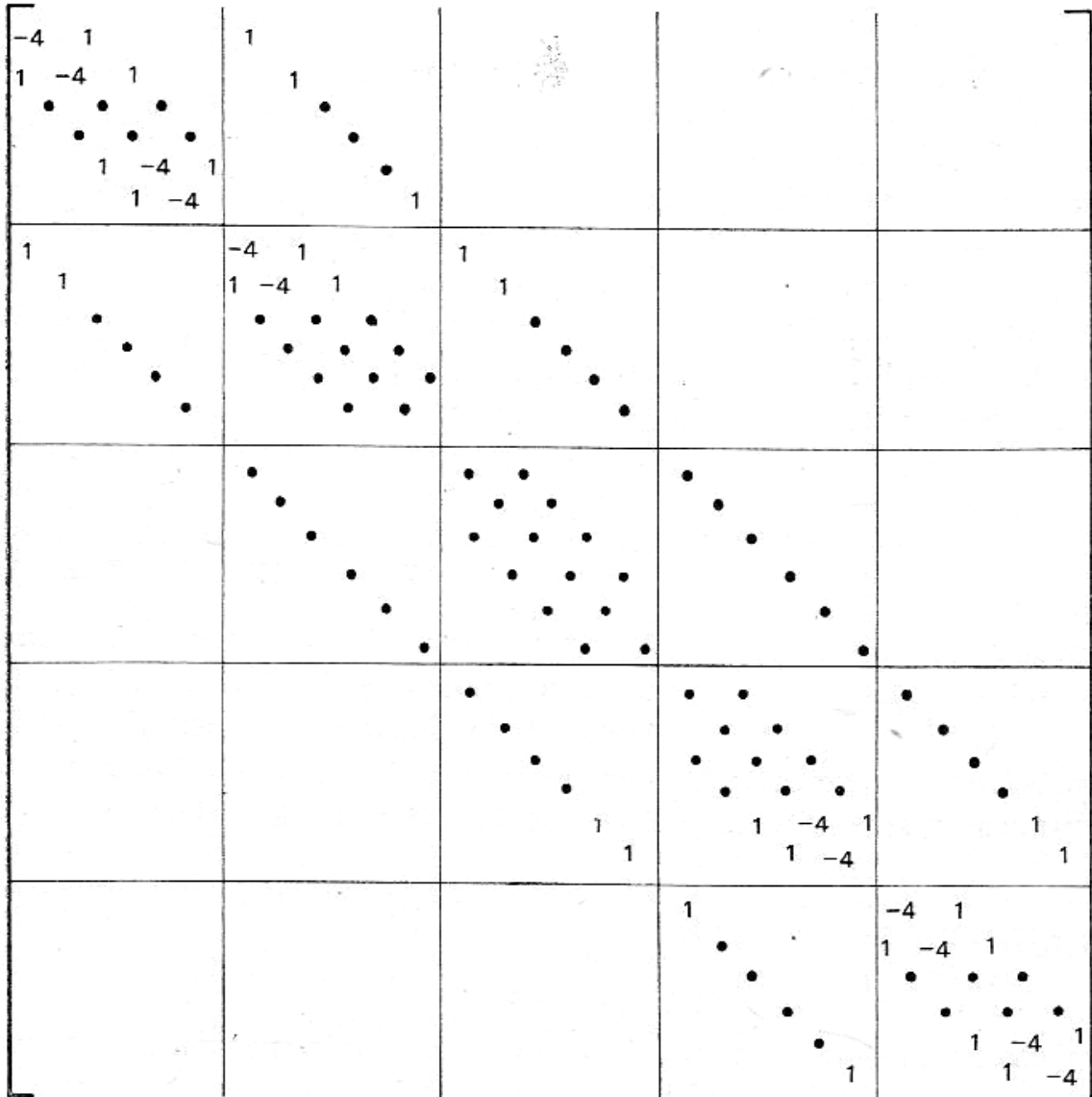
$$(\Phi_{i+1,j} + \Phi_{i-1,j} + \Phi_{i,j+1} + \Phi_{i,j-1}) - 4\Phi_{i,j} = -\Delta^2 \rho_{i,j} \quad (291)$$

jeśli siatka ma rozmiar  $I \times J$  to możemy  $\Phi_{i,j}$  zastąpić wektorem  $u_k$  o rozmiarze  $I \cdot J$

$$u_k = u_{i \cdot J + j} = \Phi_{i,j} \quad (292)$$

i podobnie

$$w_k = w_{i \cdot J + j} = -\Delta^2 \rho_{i,j} \quad (293)$$



Przypomnijmy jak to było przy metodzie niejawnej (Cranka-Nicholsona) dla równania dyfuzji

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\kappa\Delta t}{2\Delta^2}(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) + \frac{\kappa\Delta t}{2\Delta^2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \quad (294)$$

czyli (podstawiając  $\alpha = \kappa\Delta t/2\Delta^2$ ):

$$-\alpha u_{j+1}^{n+1} + (1 + 2\alpha)u_j^{n+1} - \alpha u_{j-1}^{n+1} = u_j^n + \alpha(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) = w_j \quad (295)$$

otrzymujemy do rozwiązania równanie z macierzą trójprzekątniową, a dla większej liczby wymiarów jakąś inną – ale dalej rzadką.

### Rozwiązanie rekurencyjne równania z macierzą trójprzekątniową

Mamy układ równań

$$\alpha_j u_{j+1} + \beta_j u_j + \gamma_j u_{j-1} = w_j \quad (296)$$

dla  $1 < j < J$ , z warunkami brzegowymi

$$\begin{aligned} \alpha_1 u_2 + \beta_1 u_1 &= w_1 \\ \gamma_J u_{J-1} + \beta_J u_J &= w_J \end{aligned} \quad (297)$$

i szukamy rozwiązania, w którym mając  $u_j$  możemy wyliczyć  $u_{j+1}$ , czyli poszukujemy takich  $x_j$  i  $y_j$ , że

$$u_{j+1} = x_j u_j + y_j \quad (298)$$

podstawiając  $u_{j+1}$  mamy

$$\alpha_j (x_j u_j + y_j) + \beta_j u_j + \gamma_j u_{j-1} = w_j \quad (299)$$

czyli

$$u_j = \frac{-\gamma_j}{\alpha_j x_j + \beta_j} u_{j-1} + \frac{w_j - \alpha_j y_j}{\alpha_j x_j + \beta_j} \quad (300)$$

ale chcemy, żeby też

$$u_j = x_{j-1} u_{j-1} + y_{j-1} \quad (301)$$

co daje

$$\begin{aligned} x_{j-1} &= \frac{-\gamma_j}{\alpha_j x_j + \beta_j} \\ y_{j-1} &= \frac{w_j - \alpha_j y_j}{\alpha_j x_j + \beta_j} \end{aligned} \quad (302)$$

dla wszystkich  $j > 1$ .

Warunki brzegowe dają

$$\begin{aligned} x_{J-1} &= \frac{-\gamma_J}{\beta_J} = \frac{a'}{b'\Delta + a'} \\ y_{J-1} &= \frac{w_J}{\beta_J} = \frac{c'\Delta}{b'\Delta + a'} \end{aligned} \quad (303)$$



oraz

$$u_1 = \frac{w_1 - \alpha_1 y_1}{\beta_1 + \alpha_1 x_1} = \frac{-c\Delta + ay_1}{a - b\Delta - ax_1} \quad (304)$$

często mamy dwa szczególne przypadki

– albo  $u$  jest określone na brzegu ( $a' = 0$ ), czyli  $x_{J-1} = 0$  i  $y_{J-1} = u_J$

– albo pochodna na brzegu znika ( $b' = 0$ ), czyli  $x_{J-1} = 1$  i  $y_{J-1} = 0$

### „Dokładne” rozwiązanie równania Poissona

Ogólnie równania eliptyczne prowadzą do trudnych i czasochłonnych układów równań, ale do równania Poissona można zastosować szczególne metody rozwiązywania.

Weźmy równanie Poissona w dwóch wymiarach

$$(\Phi_{i+1,j} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i-1,j}) + (\Phi_{i,j+1} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i,j-1}) = -\Delta^2 \rho_{i,j} \quad (305)$$

oznaczymy przez  $P$  pięciopunktowy operator po lewej stronie

$$P\Phi_{i,j} = (\Phi_{i+1,j} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i-1,j}) + (\Phi_{i,j+1} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i,j-1}) \quad (306)$$

i zauważmy, że mod Fouriera

$$s_{i,j}(k, l) = \hat{\Phi}(k, l) \sin \frac{\pi k j}{J} \sin \frac{\pi l i}{I} \quad (307)$$

jest funkcją własną operatora  $P$  dla całkowitych  $(k, l)$

$$\begin{aligned} P s_{i,j}(k, l) &= \quad (308) \\ &= \hat{\Phi}(k, l) \sin \frac{\pi k j}{J} \left[ \sin \frac{\pi l(i+1)}{I} - 2 \sin \frac{\pi l i}{I} + \sin \frac{\pi l(i-1)}{I} \right] \\ &+ \hat{\Phi}(k, l) \sin \frac{\pi l i}{I} \left[ \sin \frac{\pi k(j+1)}{J} - 2 \sin \frac{\pi k j}{J} + \sin \frac{\pi k(j-1)}{J} \right] \\ &= \hat{\Phi}(k, l) \sin \frac{\pi k j}{J} \left[ 2 \cos \frac{\pi l}{I} \sin \frac{\pi l i}{I} - 2 \sin \frac{\pi l i}{I} \right] \\ &+ \hat{\Phi}(k, l) \sin \frac{\pi l i}{I} \left[ 2 \cos \frac{\pi k}{J} \sin \frac{\pi k j}{J} - 2 \sin \frac{\pi k j}{J} \right] \end{aligned}$$

a stąd

$$P s_{i,j}(k, l) = \left( 2 \cos \frac{\pi l}{I} + 2 \cos \frac{\pi k}{J} - 4 \right) s_{i,j}(k, l) \quad (309)$$

gdzie wartości własne do funkcji własnych  $s_{i,j}(k, l)$  wynoszą

$$\alpha_{kl} = 2 \cos \frac{\pi l}{I} + 2 \cos \frac{\pi k}{J} - 4 \quad (310)$$

Możemy równanie Poissona rozwiązać dla każdej funkcji własnej oddzielnie (i na koniec zsumować rozwiązania), co więcej – wykorzystując symetrię operatora Laplace'a – możemy to zrobić dla każdego wymiaru oddzielnie.

W efekcie otrzymujemy rozwiązanie w pięciu krokach

1) rozkład źródeł względem jednego wymiaru

$$\hat{\rho}_i(k) = \frac{2}{J} \sum_{j=1}^J \rho_{i,j} \sin \frac{\pi k j}{J} \quad (311)$$

2) rozkład względem drugiego wymiaru

$$\hat{\rho}(k, l) = \frac{2}{I} \sum_{i=1}^I \hat{\rho}_i(k) \sin \frac{\pi l i}{I} \quad (312)$$

3) dla każdego modu Fouriera liczymy amplitudę potencjału

$$\hat{\Phi}(k, l) = \frac{\hat{\rho}(k, l) \Delta^2}{4 - 2 \cos \frac{\pi k}{J} - 2 \cos \frac{\pi l}{I}} \quad (313)$$

4) synteza dla jednego wymiaru

$$\hat{\Phi}_i(k) = \sum_{l=1}^I \hat{\Phi}(k, l) \sin \frac{\pi l i}{I} \quad (314)$$

5) i względem drugiego wymiaru

$$\Phi_{ij} = \sum_{k=1}^J \hat{\Phi}_i(k) \sin \frac{\pi k j}{J} \quad (315)$$

Warunki brzegowe wymuszają jakie mamy funkcje własne. To co powyżej jest dla stałego potencjału na brzegu. Dla np. znikania pochodnej potencjału na brzegu mamy

$$\Phi_j = \frac{1}{2} \hat{\Phi}(0) + \sum_{k=1}^{J-1} \hat{\Phi}(k) \cos \frac{\pi k j}{J} \quad (316)$$

dla syntezy i

$$\hat{\Phi}(k) = \frac{2}{J} \sum_{j=1}^{J-1} \Phi_j \cos \frac{\pi k j}{J} \quad (317)$$

dla analizy.

Przy okresowych warunkach brzegowych musimy użyć szeregu z sinusami i cosinusami. Dla kroku syntezy

$$\Phi_j = \frac{1}{2} \hat{\Phi}^c(0) + \sum_{k=1}^{J/2-1} \hat{\Phi}^c(k) \cos \frac{2\pi k j}{J} + \hat{\Phi}^s(k) \sin \frac{2\pi k j}{J} \quad (318)$$

i dla analizy

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}^c(k) &= \frac{2}{J} \sum_{j=1}^{J-1} \Phi_j \cos \frac{2\pi k j}{J} \\ \hat{\Phi}^s(k) &= \frac{2}{J} \sum_{j=1}^{J-1} \Phi_j \sin \frac{2\pi k j}{J} \end{aligned} \quad (319)$$

### Dokładne rozwiązanie ogólnego równania macierzowego

Mamy układ równań

$$\begin{aligned} a_{11}u_1 + a_{12}u_2 + \cdots + a_{1n}u_n &= w_1 \\ a_{21}u_1 + a_{22}u_2 + \cdots + a_{2n}u_n &= w_2 \\ &\vdots \\ a_{i1}u_1 + a_{i2}u_2 + \cdots + a_{in}u_n &= w_i \\ &\vdots \\ a_{n1}u_1 + a_{n2}u_2 + \cdots + a_{nn}u_n &= w_n \end{aligned} \quad (320)$$

w metodzie eliminacji Gaussa bierzemy np. pierwsze równanie i dodając z odpowiednim czynnikiem do pozostałych zerujemy np. pierwszą kolumnę

$$\begin{aligned} a_{11}u_1 + a_{12}u_2 + a_{13}u_3 + \cdots + a_{1n}u_n &= w_1 \\ a'_{22}u_2 + a'_{23}u_3 + \cdots + a'_{2n}u_n &= w'_2 \\ a'_{32}u_2 + a'_{33}u_3 + \cdots + a'_{3n}u_n &= w'_3 \\ &\vdots \\ a'_{n2}u_2 + a'_{n3}u_3 + \cdots + a'_{nn}u_n &= w'_n \end{aligned} \quad (321)$$

gdzie

$$a'_{ij} = a_{ij} - \frac{a_{i1}}{a_{11}} a_{1j}, \quad w'_i = w_i - \frac{a_{i1}}{a_{11}} w_1 \quad (322)$$

po powtórzeniu tej procedury  $n - 1$  razy otrzymujemy

$$\begin{aligned}
 a_{11}u_1 + a_{12}u_2 + a_{13}u_3 + \cdots + a_{1n}u_n &= w_1 \\
 a_{22}u_2 + a'_{23}u_3 + \cdots + a'_{2n}u_n &= w'_2 \\
 a_{33}u_3 + \cdots + a''_{3n}u_n &= w''_3 \\
 &\dots \\
 a_{nn}^{(n-1)}u_n &= w_n^{(n-1)}
 \end{aligned} \tag{323}$$

i teraz „od tyłu” kolejno obliczamy  $u_n, u_{n-1}$  itd. do  $u_1$

Metoda Gaussa odpowiada rozkładowi macierzy  $A$  na iloczyn dwóch trójkątnych – górnej i dolnej  $A = LU$ . Do rozwiązania potrzeba  $\frac{2}{3}n^3$  operacji.

### Iteracyjne metody rozwiązywania równań macierzowych

Mamy równanie

$$Au = w \tag{324}$$

załóżmy jakieś rozwiązanie  $u = u^{(0)}$  i poprzez liniową operację wyliczamy kolejne przybliżenia  $u^{(p)}$

$$u^{(p+1)} = Pu^{(p)} + c \tag{325}$$

jeśli taki proces jest zbieżny, czyli

$$\lim_{p \rightarrow \infty} u^{(p)} = Pu^{(p)} + c \tag{326}$$

to graniczny wektor  $u^{(\infty)}$  spełnia równanie

$$(I - P)u^{(\infty)} = c \tag{327}$$

jeśli

$$c = Tw \tag{328}$$

to

$$T^{-1}(I - P) = A \tag{329}$$

czyli

$$P = I - TA \tag{330}$$

Zauważmy, że procedura ta odpowiada całkowaniu równania

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla^2 u = \rho \tag{331}$$

w jawnym schemacie

$$u^{(p+1)} = u^{(p)} + \Delta t \Delta'' u^{(p)} + \rho \Delta t \tag{332}$$

### Konstrukcja i własności macierzy iteracyjnej

Trzeba zapewnić zbieżność procesu iteracji, najlepiej dla każdego  $u^{(0)}$  i żeby zbieżność osiągana była jak najmniejszą ilością iteracji.

i jeśli  $u$  to rozwiązanie dokładne, to oczywiście chcemy, żeby

$$u = Pu + c \quad (333)$$

zajmijmy się „odchyłkami” od rozwiązania dokładnego

$$\epsilon^{(p)} = u^{(p)} - u \quad (334)$$

wtedy

$$\epsilon^{(p+1)} = P\epsilon^{(p)} \quad (335)$$

żeby proces był zbieżny potrzeba, żeby

$$|\epsilon^{(p+1)}| < |\epsilon^{(p)}| \quad (336)$$

lub tzw. norma spektralna

$$\|P\| = \frac{|P\epsilon^{(p)}|}{|\epsilon^{(p)}|} < 1 \quad (337)$$

jeśli  $s_i$  to wektory własne  $P$  i  $\rho_i$  odpowiadające im wartości własne, to możemy zapisać

$$\epsilon^{(0)} = \sum_{i=1}^n \alpha_i s_i \quad (338)$$

i po  $p$  iteracjach mamy

$$\epsilon^{(p)} = P\epsilon^{(p-1)} = P^p\epsilon^{(0)} \quad (339)$$

podstawiając rozwinięcie  $\epsilon^{(0)}$

$$\epsilon^{(p)} = P^p \sum_{i=1}^n \alpha_i s_i = \sum_{i=1}^n \alpha_i \rho_i^p s_i \quad (340)$$

w granicy dużych  $p$

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \epsilon^{(p)} = \alpha_m \rho_m^p s_m \quad (341)$$

gdzie  $m$  spełnia

$$|\rho_m| = \max(|\rho_1|, |\rho_2|, \dots, |\rho_n|) \quad (342)$$

Dla przestawienia metod iteracyjnych macierz  $A$  separuje się na macierze diagonalną  $D$ , trójkątną górną  $U$  i dolną  $L$

$$A = D + U + L \quad (343)$$

dotatkowo zakłada się, że elementy  $D$  są niezerowe, i przepisuje się zasadnicze równanie do postaci

$$A'u = w' \quad (344)$$

gdzie

$$A' = D^{-1}A \quad (345)$$

wtedy

$$A' = I + U' + L' \quad (346)$$

macierz

$$B = -(U' + L') \quad (347)$$

nazywa się macierzą blokową Jacobiego – zauważmy, że wartości własne  $A'$  i  $B$  ( $\lambda_i$  i  $\mu_i$ ) spełniają

$$\lambda_i + \mu_i = 1 \quad (348)$$

Proste schematy iteracyjne otrzymamy przez analogię do ewolucji układu

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -A'u + w' \quad (349)$$

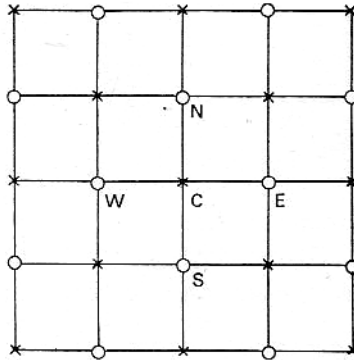
z „krokiem” iteracji  $\Delta t = \omega$ , czyli

$$u^{(p+1)} = u^{(p)} - \omega A'u^{(p)} + \omega w' \quad (350)$$

lub

$$u^{(p+1)} = (I - \omega A')u^{(p)} + \omega w' \quad (351)$$

dla przykładu – równanie Poissona na siatce 2D



$$u_C - \frac{1}{4}(u_N + u_S + u_E + u_W) = \frac{1}{4}\rho_C\Delta^2 = w_C \quad (352)$$

wartości własne przy siatce  $I \times J$  spełniają

$$1 - \frac{1}{2}\cos\frac{\pi}{J} - \frac{1}{2}\cos\frac{\pi}{I} \leq \lambda_i \leq 1 \quad (353)$$

w metodzie iteracyjnej mamy

$$u_C^{(p+1)} = (1 - \omega)u_C^{(p)} + \frac{1}{4}\omega(u_N^{(p)} + u_S^{(p)} + u_E^{(p)} + u_W^{(p)}) + \omega w_C \quad (354)$$

a to ma postać równania dyfuzji w „krokiem czasowym”  $\omega/4$ , i warunek zbieżności wymaga żeby

$$0 \leq \omega \leq 1 \quad (355)$$

*Metoda Jacobiego*

jeśli położymy  $\omega = 1$  to

$$u^{(p+1)} = (I - A')u^{(p)} + w' \quad (356)$$

lub

$$u^{(p+1)} = -(L' + U')u^{(p)} + w' \quad (357)$$

i szybkość zbieżności

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \delta\epsilon^{(p)} = \epsilon^{(p-1)} - \epsilon^{(p)} = (\rho_m - 1)\epsilon^{(p)} \quad (358)$$

czyli

$$\frac{|\delta\epsilon^{(p)}|}{|\epsilon^{(p)}|} = |\rho_m - 1| \quad (359)$$

dla równania Poissona na siatce  $I \times J$

$$\mu_m = \frac{1}{2}\cos\frac{\pi}{J} + \frac{1}{2}\cos\frac{\pi}{I} \quad (360)$$

dla dużych  $I$  i  $J$  możemy przybliżyć

$$\mu_m \simeq 1 - \frac{\pi^2}{4J^2} - \frac{\pi^2}{4I^2} \quad (361)$$

i w końcu zbieżność

$$\frac{|\delta\epsilon^{(p)}|}{|\epsilon^{(p)}|} = \frac{\pi^2}{4J^2} + \frac{\pi^2}{4I^2} \quad (362)$$

### *Iteracja Gaussa-Seidla*

jeśli liczymy punkty na siatce po kolei, to dochodząc do  $C$  mamy już policzone nowe wartości w punktach  $S$  i  $W$

$$u_C^{(p+1)} = \frac{1}{4}(u_N^{(p)} + u_S^{(p+1)} + u_E^{(p)} + u_W^{(p+1)}) + w'_C \quad (363)$$

w ujęciu macierzowym to ma postać

$$(I + L')u^{(p+1)} = -U'u^{(p)} + w' \quad (364)$$

lub

$$u^{(p+1)} = -(I + L')^{-1}U'u^{(p)} + (I + L')^{-1}w' \quad (365)$$

szybkość zbieżności jest lepsza niż w metodzie Jacobbiego, ale niewiele

### *Metoda sukcesywnej nadrelaksacji*

wźmy metodę Gaussa-Seidla i spróbujemy dobrać optymalny parametr relaksacji  $\omega$

$$(I + \omega L')u^{(p+1)} = (1 - \omega)Iu^{(p)} - \omega U'u^{(p)} + \omega w' \quad (366)$$

lub

$$u^{(p+1)} = (I + \omega L')^{-1}[(1 - \omega)I - \omega U']u^{(p)} + (I + \omega L')^{-1}\omega w' \quad (367)$$

optymalny czynnik relaksacji

$$\omega_b = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \mu_m^2}} \quad (368)$$

i sama szybkość zbieżności

$$\frac{|\delta\epsilon^{(p)}|}{|\epsilon^{(p)}|} = \sqrt{1 - \mu_m^2} \quad (369)$$

dla równania Poissona algorytm ma postać

$$u_C^{(p+1)} = (1 - \omega)u_C^{(p)} + \frac{1}{4}\omega(u_N^{(p)} + u_S^{(p+1)} + u_E^{(p)} + u_W^{(p+1)}) + \omega w_C \quad (370)$$

i podobnie dla dużych  $I$  i  $J$  szybkość zbieżności

$$\frac{|\delta\epsilon^{(p)}|}{|\epsilon^{(p)}|} = \pi\sqrt{\frac{1}{2J^2} + \frac{1}{2I^2}} \quad (371)$$



### Metoda cykliczna Czebyszewa

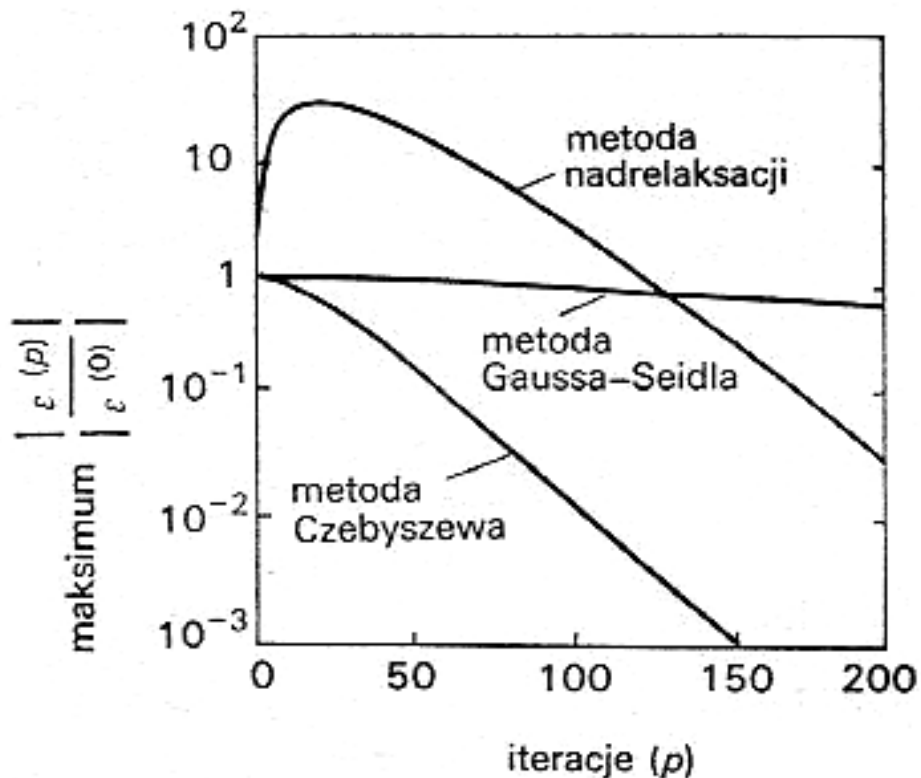
najpierw obliczamy  $u^{(p+1)}$  w punktach parzystych, w drugim cyklu w nieparzystych

$$u_{\nu}^{(p+1)} = -\omega_p(L' + U')u_{1-\nu}^{(p)} + (1 - \omega_p)u_{\nu}^{(p-1)} + \omega_p w'_{\nu} \quad (372)$$

gdzie  $\nu = 0$  dla parzystych  $p$  i  $\nu = 1$  dla nieparzystych  
na dodatek zmieniamy  $\omega_p$  na każdym kroku  $p$

$$\begin{aligned} \omega_0 &= 1 \\ \omega_1 &= \frac{1}{1 - \mu_m^2/2} \\ \omega_{p+1} &= \frac{1}{1 - \mu_m^2 \omega_p/4} \end{aligned} \quad (373)$$

oraz metody z przemiennym kierunkiem iteracji.



### Problem N ciał z działaniem na odległość

Kilka ciał – jądro atomowe, atom, Układ Słoneczny, gromada gwiazd, galaktyka, ...

Wiele ciał – gaz, płyn, elektrony w siatce krystalicznej, gwiazda, ośrodek plazmowy, ...

### ruch pojedynczej cząstki w polu zachowawczym

Stan cząstki w polu zachowawczym  $E = -\nabla\Phi$  określa wektor stanu – położenia  $x = (x, y, z)$  i prędkości  $v = (v_x, v_y, v_z)$ , Współrzędne spełniają równania ruchu

$$\frac{dx}{dt} = v \quad (374)$$

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{e}{m}\nabla\Phi \quad (375)$$

potencjał  $\Phi$  zależy tylko od położenia w przestrzeni (i czasu) – szczególnie stosowny jest schemat skokowy, bo na każdym kroku wystarczy położenia wyliczać co drugi krok

$$x^n = x^{n-2} + 2\Delta t v^{n-1} \quad (376)$$

i na przemian współrzędne prędkości

$$v^{n+1} = v^{n-1} - 2\Delta t \frac{e}{m}\nabla\Phi(x^n, t^n) \quad (377)$$

i odpada problem rozprzegania się siatek parzystych i nieparzystych

Ruch cząstki w polu zachowawczym ma własności odwracalności w czasie i zachowania energii. Odwracalność schematu różnicowego możemy sprawdzić postawiając  $\Delta t' = -\Delta t$

$$v^{n-1} = v^{n+1} - 2\Delta t' \frac{e}{m}\nabla\Phi(x^n, t^n) \quad (378)$$

$$x^{n-2} = x^n + 2\Delta t' v^{n-1}$$

sprwdźmy zachowanie energii – podnosząc do kwadratu równanie

$$v^{n+1} - \Delta t \frac{e}{m}E^n = v^{n-1} + \Delta t \frac{e}{m}E^n \quad (379)$$

i różnica energii kinetycznej pomiędzy kolejnymi krokami

$$\frac{1}{2}m(v^{n+1})^2 - \frac{1}{2}m(v^{n-1})^2 = e(v^{n+1} - v^{n-1}) \cdot E^n \Delta t \quad (380)$$

i w końcu

$$\frac{1}{2}m(v^{n+1})^2 - \frac{1}{2}m(v^{n-1})^2 = \frac{1}{2}e(x^{n+2} - x^{n-2}) \cdot E^n \quad (381)$$

prawa strona jest aproksymacją całki

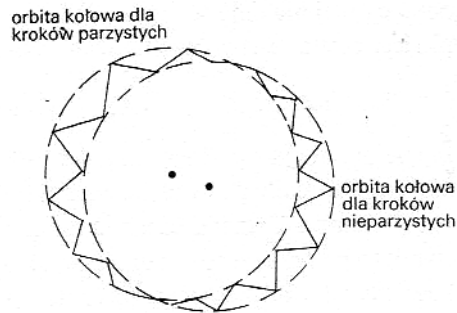
$$\int_{n-1}^{n+1} E^n \cdot dx \quad (382)$$

z dokładnością do drugiego rzędu.

**Ruch cząstki w prostopadłym polu magnetycznym**  
cząstka o masie  $m$  i ładunku  $e$  spełnia równania

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= v \\ \frac{dv}{dt} &= \frac{e}{m}v \times B \end{aligned} \quad (383)$$

i zastosowanie metody skokowej może napotkać na trudności



Rozważmy zagadnienie dwuwymiarowe stosując metodę niejawną drugiego rzędu. Niech prędkość  $v = (v_x, v_y, 0)$  i pole magnetyczne  $B = (0, 0, B_z)$ , wtedy częstość cyklotronowa

$$\Omega = \frac{eB_z}{m} \quad (384)$$

w gólnym przypadku  $\Omega = \Omega(x, t)$

jeśli wprowadzimy zespolone współrzędne  $\hat{v} = v_x + iv_y$  i  $\hat{x} = x + iy$  to

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \hat{v}, \quad \frac{d\hat{v}}{dt} = -i\Omega\hat{v} \quad (385)$$

i stosując dla prędkości niejawną metodę mamy

$$\hat{v}^{n+1} - \hat{v}^n = -i\phi(\hat{v}^{n+1} + \hat{v}^n) \quad (386)$$

gdzie  $\phi = \Omega\Delta t/2$

można wyliczyć wprost, że

$$\hat{v}^{n+1} = \frac{1 - \phi^2 - i2\phi}{1 + \phi^2} \hat{v}^n \quad (387)$$

jeśli to rozpisać na rzeczywiste i urojone składniki

$$\begin{aligned} v_x^{n+1} &= \frac{1 - \phi^2}{1 + \phi^2} v_x^n + \frac{2\phi}{1 + \phi^2} v_y^n \\ v_y^{n+1} &= \frac{1 - \phi^2}{1 + \phi^2} v_y^n - \frac{2\phi}{1 + \phi^2} v_x^n \end{aligned} \quad (388)$$

aby otrzymać wycelowane w czasie równania to kąt  $\phi$  (pole  $B_z$ ) powinien być wybrany w połowie kroku

$$\phi = \phi^{n+1/2} = \frac{\Delta t}{2} \frac{e}{m} B_z(x^n + \frac{\Delta t}{2} v^n, t^n + \frac{\Delta t}{2}) \quad (389)$$

mając prędkości można wyliczyć położenie

$$x^{n+1} = x^n + (v^n + v^{n+1}) \frac{\Delta t}{2} \quad (390)$$

metoda jest stabilna dla dużego  $\phi \gg 1$  (nawet dla dużego kroku czasowego), a również

$$|\hat{v}^{n+1}|^2 = |\hat{v}^n|^2 \cdot \frac{1 - \phi^2 - i2\phi}{1 + \phi^2} \cdot \frac{1 - \phi^2 + i2\phi}{1 + \phi^2} \quad (391)$$

czyli

$$|\hat{v}^{n+1}|^2 = |\hat{v}^n|^2 \quad (392)$$

i schemat zachowuje tożsamościowo energię.

łatwo też dołączyć do tego schematu pole elektryczne  $\hat{E} = E_x + iE_y$

$$\hat{v}^{n+1} = \frac{e}{m} \Delta t \frac{1 - i\phi}{1 + \phi^2} \hat{E} + \frac{1 - \phi^2 - i2\phi}{1 + \phi^2} \hat{v}^n \quad (393)$$

i zauważmy, że dla silnego pola magnetycznego ( $\phi \gg 1$ ) i dużych kroków czasowych

$$\hat{v}^{n+1} \simeq -\frac{e}{m} \Delta t \frac{i\hat{E}}{\phi} - \hat{v}^n \quad (394)$$

czyli

$$\frac{\hat{x}^{n+1} - \hat{x}^n}{\Delta t} = \frac{1}{2}(\hat{v}^{n+1} + \hat{v}^n) = -i\frac{\hat{E}}{B_z} \quad (395)$$

czyli dryf (powolny) w kierunku prostopadłym do  $E$  przy szybkiej cyklotronowej prędkości orbitalnej wokół  $B$

**Bezpośrednia symulacja działania na odległość w układzie  $N$  ciał** w trójwymiarowej przestrzeni przy  $N$  cząstkach stan układu jest opisany przez  $6N$  składowych położenia  $x_\mu$  i prędkości  $v_\mu$  ( $1 \leq \mu \leq N$ ), oraz  $6N$  równań

$$\begin{aligned} \frac{dx_\mu}{dt} &= v_\mu \\ \frac{dv_\mu}{dt} &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \frac{e_\mu e_\nu}{m_\mu} \cdot \frac{x_\mu - x_\nu}{|x_\mu - x_\nu|^3} \end{aligned} \quad (396)$$

przy oddziaływaniach długozasięgowych musimy śledzić  $N(N-1)/2$  oddziaływań pomiędzy cząstkami – stąd wynika ograniczenie na ilość cząstek jakie możemy śledzić w symulacjach. Mimo to przy  $10^4$ – $10^5$  cząstkach można już modelować statystyczne własności takich układów.

najprostszym schematem jest schemat skokowy

$$\begin{aligned} x_\mu^n &= x_\mu^{n-2} + 2v_\mu^{n-1}\Delta t \\ v_\mu^{n+1} &= v_\mu^{n-1} + \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \frac{2e_\mu e_\nu \Delta t}{m_\mu} \cdot \frac{x_\mu - x_\nu}{|x_\mu - x_\nu|^3} \end{aligned} \quad (397)$$

jesli  $a$  jest typową odległością oddziaływania

$$\frac{4}{3}\pi a^3 = \frac{V}{N} \quad (398)$$

to powinniśmy wybrać

$$\Delta t \ll \frac{a}{|v_\mu|} \quad (399)$$

zachowanie energii zapewnia nam trzecia zasada dynamiki Newtona

*uśrednianie względem czasu*

W praktyce zakłada się postać potencjału w oddziaływaniu między cząstkami, symuluje jakiś czas zachowanie się cząstek i (zakładając, że układ osiągnął stan równowagi termodynamicznej) wyznacza własności termodynamiczne uśredniając po czasie własności mikroskopowe.

np. mając  $N$  cząstek o masie  $m$  każda i potencjał  $\Phi$ , to

$$\frac{dx_\mu}{dt} = v_\mu \quad (400)$$

$$\frac{dv_\mu}{dt} = -\frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x_\mu} \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \Phi(|x_\mu - x_\nu|)$$

zwykle mając potencjał centralny, wygodniej jest używać  $F(r) = -\partial\Phi/\partial r$  unikając pochodnych przestrzennych

w schemacie skokowym dostaniemy dla  $1 \ll \mu \ll N$

$$x_\mu^n = x_\mu^{n-2} + 2v_\mu^{n-1} \Delta t \quad (401)$$

$$v_\mu^{n+1} = v_\mu^{n-1} + \frac{2\Delta t}{m} \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N F(|x_\mu - x_\nu|) \frac{x_\mu - x_\nu}{|x_\mu - x_\nu|} \quad (402)$$

i np. średnią energię wewnętrzną (makroskopową)  $U = \frac{3}{2}kT + \bar{\Phi}$  otrzymamy średniując po  $p$  krokach czasowych energię kinetyczną

$$\frac{3}{2}kT = \frac{1}{N} \cdot \frac{1}{p} \sum_{n=1}^p \sum_{\mu=1}^N \frac{1}{2} m (v_\mu^n)^2 \quad (403)$$

i energię potencjalną cząstek

$$\bar{\Phi} = \frac{1}{2N} \cdot \frac{1}{p} \sum_{n=1}^p \sum_{\mu=1}^N \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \Phi(|x_\mu^n - x_\nu^n|) \quad (404)$$

*uśrednianie względem zespołu metodą Monte Carlo*

Mamy znaleźć dla danej zmiennej mikroskopowej  $u$  jej wartość  $\bar{u}$  w stanie równowagi termodynamicznej

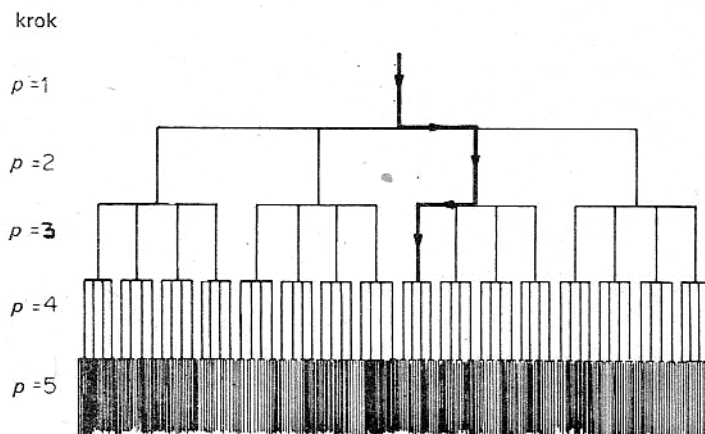
$$\bar{u} = \frac{\int u e^{-E/kT} dx^N dv^N}{\int e^{-E/kT} dx^N dv^N} \quad (405)$$

gdzie całkowanie przebiega przez całą przestrzeń fazową układu  $N$  cząstek  
Można tę całkę zastąpić średnią po kanonicznym zespole  $M$  układów

$$\bar{u} = \frac{1}{M} \sum_{\nu=1}^M u_{\nu} \quad (406)$$

takich, że prawdopodobieństwo należenia do układu jest proporcjonalne do  $e^{-E/kT}$

Rozważamy układ na kroku  $p$ , tworzymy nowy układ na kroku  $p + 1$  przechodząc losowo (z jednakowym prawdopodobieństwem) do jednego z wielu stanów,



zespół składa się ze wszystkich stanów, przez który przechodzi układ.  
Np. dla dwuwymiarowej przestrzeni

- losujemy dowolny początkowy układ  $N$  cząstek w przestrzeni  $V$ .
- wybieramy jedną z cząstek i przesuujemy ją losowo do dowolnego punktu wewnątrz kwadratu o powierzchni  $a^2$

$$\begin{aligned} x_{\mu}^{p+1} &= x_{\mu}^p + a(R_1 - 1/2) \\ y_{\mu}^{p+1} &= y_{\mu}^p + a(R_2 - 1/2) \end{aligned} \quad (407)$$

$R_1$  i  $R_2$  są losowane z przedziału  $[0, 1]$

- liczymy zmianę energii potencjalnej układu

$$\Delta E = \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \Phi(|x_{\mu}^{p+1} - x_{\nu}^{p+1}|) - \Phi(|x_{\mu}^p - x_{\nu}^p|) \quad (408)$$

i jeśli  $\Delta E < 0$ , czyli energia spadła, to nowy układ akceptujemy w zespole

- jeśli  $\Delta E > 0$  to możemy go zaakceptować ale tylko z prawdopodobieństwem  $e^{-\Delta E/kT}$  – losujemy trzecią liczbę  $R_3$  i jeśli  $R_3 < e^{-\Delta E/kT}$  akceptujemy, a jeśli  $R_3 > e^{-\Delta E/kT}$  to odrzucamy i „stary” układ zaliczamy ponownie do zespołu
- przesuwamy kolejną cząstkę

Trzeba utworzyć co najmniej  $M_{\min} = NL/a$  układów,  $a$  co prawda jest dowolne, ale zbieżność uzyskuje się najszybciej gdy jest rzędu odległości międzycząsteczkowych



### Obliczenia w schemacie cząstka-pole

Można uniknąć śledzenia każdej pary  $N^2$  oddziaływań wprowadzając średnią siłę (pole) od cząstek zespołu.

drugie z równań

$$\begin{aligned}\frac{dx_\mu}{dt} &= v_\mu \\ \frac{dv_\mu}{dt} &= \sum_{\substack{\nu=1 \\ \nu \neq \mu}}^N \frac{e_\mu e_\nu (x_\mu - x_\nu)}{m_\mu |x_\mu - x_\nu|^3}\end{aligned}\quad (409)$$

zastępujemy

$$\frac{dv_\mu}{dt} = \frac{e_\mu}{m_\mu} E(x_\mu) \quad (410)$$

gdzie

$$E(x) = \sum_{\nu=1}^N \frac{e_\nu (x - x_\nu)}{|x - x_\nu|^3} \quad (411)$$

jest określone w każdym punkcie siatki

zamiast pola wektorowego łatwiej wyznaczyć potencjał, i wtedy

$$\frac{dv_\mu}{dt} = \frac{e_\mu}{m_\mu} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial x_\mu} \quad (412)$$

i sam potencjał

$$\Phi(x) = \sum_{\nu=1}^N \Phi(x_\nu) = \sum_{\nu=1}^N \frac{e_\nu}{|x - x_\nu|} \quad (413)$$

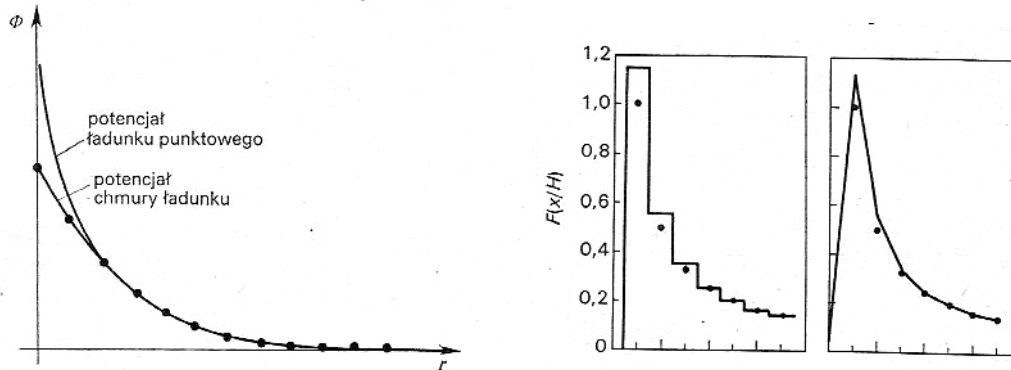
jeśli same cząstki zastąpimy rozkładem ich gęstości  $\rho$ , to potencjał można wyliczać z równania Poissona

$$\nabla^2 \Phi = -4\pi\rho \quad (414)$$

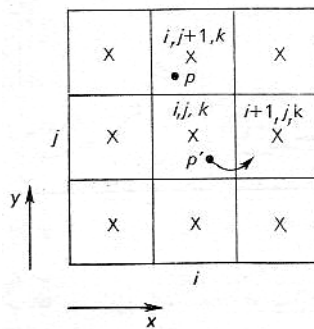
aby zapewnić dokładność takiego podejścia jak w schemacie cząstka-cząstka krok siatki musi być mniejszy od średniej odległości pomiędzy cząstkami

$$\Delta \ll \frac{L}{N^{1/3}} \quad (415)$$

efektywnie zastępujemy potencjał punktowej cząstki potencjałem „chmury” o objętości  $\Delta^3$



wraz ze wzrostem ilości cząstek na komórkę siatki zwiększa się prawdopodobieństwo że cząstka „przeskoczy” do sąsiedniej komórki



sytuacja się dopiero „poprawia” dla dużej gęstości cząstek

$$\Delta \gg \frac{L}{N^{1/3}} \quad (416)$$

W sytuacjach pośrednich można podzielić przestrzeń na bliską (tzw. kula Debye'a), gdzie cząstki oddziałują ze sobą, i daleką, gdzie cząstka oddziałuje z zespołem.



### Bezzderzeniowy model „cząstki w komórce”

Dla każdej cząstki  $\mu$  pamiętamy jej położenie i prędkość  $(x_\mu, y_\mu, v_{x_\mu}, v_{y_\mu})$ , przestrzeń w której znajdują się cząstki dzielimy na komórki (np.  $I \times I$ ) i każdej komórce  $(i, j)$  przypisujemy własności cząstek, które się w niej znajdują

$$i = \left\lfloor \frac{x_\mu^{n-1}}{\Delta} \right\rfloor, \quad j = \left\lfloor \frac{y_\mu^{n-1}}{\Delta} \right\rfloor \quad (417)$$

jeśli wyliczymy pole w komórce zajmowanej przez cząstkę  $\mu$

$$\begin{aligned} E_x^{n-1} \quad ij &= - \frac{\Phi_{i+1,j}^{n-1} - \Phi_{i-1,j}^{n-1}}{2\Delta} \\ E_y^{n-1} \quad ij &= - \frac{\Phi_{i,j+1}^{n-1} - \Phi_{i,j-1}^{n-1}}{2\Delta} \end{aligned} \quad (418)$$

to użyjemy je do wyliczenia nowych współrzędnych cząstki  $\mu$

$$\begin{aligned} v_\mu^n &= v_\mu^{n-2} + \frac{e_\mu}{m_\mu} 2\Delta t E_{ij}^{n-1} \\ x_\mu^{n+1} &= x_\mu^{n-1} + v_\mu^n 2\Delta t \end{aligned} \quad (419)$$

nową gęstość liczymy z nowych współrzędnych

$$\rho_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{\Delta^2} \sum_{\mu=1}^N e_\mu \delta \left( \left\lfloor \frac{x_\mu^{n+1}}{\Delta} \right\rfloor - i \right) \delta \left( \left\lfloor \frac{y_\mu^{n+1}}{\Delta} \right\rfloor - j \right) \quad (420)$$

i w końcu potencjał z gęstości

$$\Phi_{i+1,j}^{n+1} + \Phi_{i-1,j}^{n+1} + \Phi_{i,j+1}^{n+1} + \Phi_{i,j-1}^{n+1} - 4\Phi_{i,j}^{n+1} = -4\pi\Delta^2 \rho_{i,j}^{n+1} \quad (421)$$

Uwagi:

- warunki początkowe  
początkowy rozkład cząstek losujemy z zadaniem rozkładem
- warunki brzegowe  
stosowne do problemu, ale ostrożnie z okresowymi
- jednostki  
zwykle stosuje się przeskalowanie

$$\tilde{x}_\mu = x_\mu \cdot \frac{1}{\Delta} \quad (422)$$

$$\begin{aligned}
\tilde{v}_\mu &= v_\mu \cdot \frac{2\Delta t}{\Delta} \\
\tilde{E} &= E \cdot \frac{4(\Delta t)^2}{\Delta} \frac{e}{m} \\
\tilde{\Phi} &= \Phi \cdot \frac{2(\Delta t)^2}{\Delta^2} \frac{e}{m} \\
\tilde{\rho} &= \rho \cdot \frac{\Delta^2}{4\pi en}
\end{aligned}$$

wtedy upraszcza się schemat w każdym kroku

$$i = \lfloor \tilde{x}_\mu^{n-1} \rfloor, j = \lfloor \tilde{y}_\mu^{n-1} \rfloor \quad (423)$$

$$E_x^{n-1}{}_{ij} = -\tilde{\Phi}_{i+1,j}^{n-1} + \tilde{\Phi}_{i-1,j}^{n-1} \quad (424)$$

$$E_y^{n-1}{}_{ij} = -\tilde{\Phi}_{i,j+1}^{n-1} + \tilde{\Phi}_{i,j-1}^{n-1}$$

$$\tilde{v}_\mu^n = \tilde{v}_\mu^{n-2} + \tilde{E}_{i,j}^{n-1}$$

$$\tilde{x}_\mu^{n+1} = \tilde{x}_\mu^{n-1} + \tilde{v}_\mu^n$$

$$\tilde{\rho}_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{n} \sum_{\mu=1}^N \delta(\lfloor \tilde{x}_\mu^{n+1} \rfloor - i) \delta(\lfloor \tilde{y}_\mu^{n+1} \rfloor - j)$$

$$\tilde{\Phi}_{i+1,j}^{n+1} + \tilde{\Phi}_{i-1,j}^{n+1} + \tilde{\Phi}_{i,j+1}^{n+1} + \tilde{\Phi}_{i,j-1}^{n+1} - 4\tilde{\Phi}_{i,j}^{n+1} = -\theta \tilde{\rho}_{i,j}^{n+1} \quad (425)$$

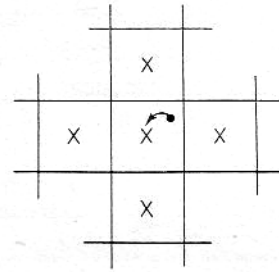
$$\theta = \frac{4\pi n e^2}{\Delta^2 m} 2(\Delta t)^2 \quad (426)$$

i dla stabilności metody skokowej potrzeba aby  $|\theta| \leq 1/2$

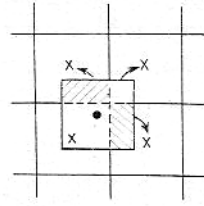
– ograniczenia

mała liczba cząstek, skończony krok (czasowy i przestrzenny), niezachowanie energii

ten pierwszy problem można częściowo ograniczyć stosując „chmurę” zamiast „cząstkę” w komórce



a)



b)

### Hydrodynamiczny model PIC z przewagą zderzeń

Zakładamy, że cząstek w każdej komórce jest na tyle dużo i zderzają się na tyle często, że na każdym kroku czasowym osiągają równowagę hydrodynamiczną (w pojedynczej komórce). Komórki są opisywane wielkościami hydrodynamicznymi i spełniają równania hydrodynamiki

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) &= 0 \\ \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v v) &= -\nabla p\end{aligned}\quad (427)$$

można je przepisać do postaci Lagrange'a

$$\begin{aligned}\frac{d\rho}{dt} &= -\rho \nabla \cdot v \\ \rho \frac{dv}{dt} &= -\nabla p\end{aligned}\quad (428)$$

potrzebujemy jeszcze równania stanu – np. równanie politropy dla gazu doskonałego

$$\frac{p}{\rho^\gamma} = \text{const}\quad (429)$$

czyli

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{p}{\rho^\gamma} \right) = 0\quad (430)$$

w postaci zachowawczej możemy je otrzymać z

$$\frac{p}{\rho^\gamma} \left[ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) \right] + \rho \frac{d}{dt} \left( \frac{p}{\rho^\gamma} \right) = 0\quad (431)$$

czyli

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \rho \frac{p}{\rho^\gamma} \right) + \nabla \cdot \left( \rho \frac{p}{\rho^\gamma} v \right) = 0\quad (432)$$

w języku unoszenia przez cząstki możemy te zasady zachowania zapisać

$$\begin{aligned}\frac{\partial (nm)}{\partial t} + \nabla \cdot (nmv) &= 0 \\ \frac{\partial (nmv)}{\partial t} + \nabla \cdot (nmv v) &= -\nabla p \\ \frac{\partial}{\partial t} \left( n \frac{p}{\rho^\gamma} \right) + \nabla \cdot \left( n \frac{p}{\rho^\gamma} v \right) &= 0\end{aligned}\quad (433)$$

gdzie  $n(x, t)$  jest gęstością cząstek

każdą cząstkę na  $n$ -tym kroku czasowym opisuje wektor stanu  $u_\mu^n = (x_\mu^n, y_\mu^n, m_\mu, m_\mu v_{x_\mu}^n, m_\mu v_{y_\mu}^n, e_\mu^n)$ ,

gdzie  $e = p/\rho^\gamma$

wielkości opisujące komórkę  $(i, j)$  otrzymamy średniując po wszystkich cząstkach w komórce

$$\begin{aligned} n_{ij}^n &= \frac{1}{\Delta^2} \sum_{\mu} \delta \left( \left\lfloor \frac{x_\mu^n}{\Delta} \right\rfloor - i \right) \delta \left( \left\lfloor \frac{y_\mu^n}{\Delta} \right\rfloor - j \right) \\ \rho_{ij}^n &= \frac{1}{\Delta^2} \sum_{\mu} m_\mu \delta \left( \left\lfloor \frac{x_\mu^n}{\Delta} \right\rfloor - i \right) \delta \left( \left\lfloor \frac{y_\mu^n}{\Delta} \right\rfloor - j \right) \\ (\rho v)_{ij}^n &= \frac{1}{\Delta^2} \sum_{\mu} m_\mu v_\mu^n \delta \left( \left\lfloor \frac{x_\mu^n}{\Delta} \right\rfloor - i \right) \delta \left( \left\lfloor \frac{y_\mu^n}{\Delta} \right\rfloor - j \right) \\ n_{ij}^n \frac{p_{ij}^n}{(\rho_{ij}^n)^\gamma} &= \frac{1}{\Delta^2} \sum_{\mu} e_\mu^n \delta \left( \left\lfloor \frac{x_\mu^n}{\Delta} \right\rfloor - i \right) \delta \left( \left\lfloor \frac{y_\mu^n}{\Delta} \right\rfloor - j \right) \end{aligned} \quad (434)$$

krok Eulera (dla wielkości na siatce) zachodzi pod wpływem ciśnienia

$$\begin{aligned} v_{x\ ij}^{n+1} &= v_{x\ ij}^n - \frac{\Delta t}{2\Delta\rho_{ij}^n} (p_{i+1,j}^n - p_{i-1,j}^n) \\ v_{y\ ij}^{n+1} &= v_{y\ ij}^n - \frac{\Delta t}{2\Delta\rho_{ij}^n} (p_{i,j+1}^n - p_{i,j-1}^n) \end{aligned} \quad (435)$$

tu krok  $\Delta t$  trzeba dobrać, żeby spełnić warunek CFL

krok Lagrange'a – dla wielkości opisujących cząstkę w komórce  $(i, j)$

$$u_\mu^{n+1} = (x_\mu^n, y_\mu^n, m_\mu, m_\mu v_{x\ ij}^{n+1}, m_\mu v_{y\ ij}^{n+1}, e_{ij}^{n+1}) \quad (436)$$

gdzie  $e_{ij}^{n+1} = \frac{p_{ij}^n}{(\rho_{ij}^n)^\gamma}$

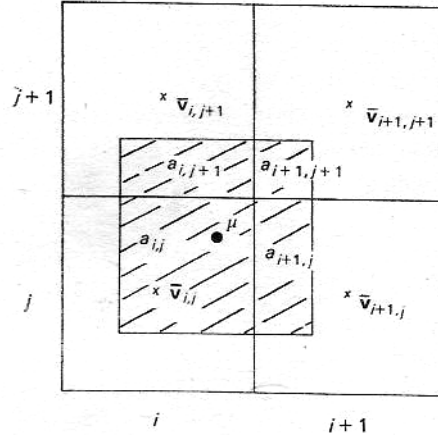
i pozostaje jeszcze przesunięcie cząstek na nowe współrzędne

$$\begin{aligned} \frac{dx_\mu}{dt} &= \bar{v}_{x\ \mu} \\ \frac{dy_\mu}{dt} &= \bar{v}_{y\ \mu} \end{aligned} \quad (437)$$

cząstki przemieszczają się z prędkością  $\bar{v}_\mu$  (określoną przez siatkę) różną od tej określającej pęd cząstki  $m_\mu v_\mu^{n+1}$

należy zinterpolować jednocześnie w czasie i przestrzeni  $\bar{v}_\mu$  dla cząstki w komórce  $(i,j)$

$$\bar{v}_\mu = \frac{1}{\Delta^2} (a_{i+1,j} \bar{v}_{i+1,j} + a_{i-1,j} \bar{v}_{i-1,j} + a_{i,j+1} \bar{v}_{i,j+1} + a_{i,j-1} \bar{v}_{i,j-1}) \quad (438)$$



a prędkości dla komórki  $\bar{v}_{ij} = (v_{ij}^{n+1} + v_{ij}^n)/2$  i w końcu

$$\begin{aligned} x_\mu^{n+1} &= x_\mu^n + \Delta t \bar{v}_{x\mu} \\ y_\mu^{n+1} &= y_\mu^n + \Delta t \bar{v}_{y\mu} \end{aligned} \quad (439)$$

Uwagi:

- przy obliczaniu prędkości pośrednich średniowanie wprowadza dyfuzję numeryczną ze współczynnikiem rzędu

$$D \sim \left\langle v^2 + \frac{\gamma p}{\rho} \right\rangle \Delta t \quad (440)$$

- można łatwo rozróżniać poszczególne cząstki i np. analizować mieszanie się różnych płynów

### Gęstość cząstek w przestrzeni fazowej

Przy bardzo dużej ilości cząstek ( $N \rightarrow \infty$ ), układ cząstek możemy traktować jak ciecz (ośrodek ciągły) i opisywać go funkcją rozkładu  $f = f(x, v, t)$

$$dn = f(x, v, t) dx dv \quad (441)$$



w przypadku układów bezzderzeniowych położenie w przestrzeni fazowej jest funkcją ciągłą i dla ustalonej objętości  $V$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V f dx dv = - \oint_S f u \cdot dS \quad (442)$$

gdzie  $u = (v, a)$  – „prędkość” w przestrzeni fazowej, i dalej

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V f dx dv + \int_V \nabla \cdot (f u) dx dv = 0 \quad (443)$$

a że zachodzi to dla dowolnego  $V$ , to

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot f u = 0 \quad (444)$$

lub

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(f v) + \frac{\partial}{\partial v}(f a) = 0 \quad (445)$$

jeśli układ oddziałuje siłami zachowawczymi, to znikają  $\partial v/\partial x$  i  $\partial a/\partial v$  i ostatecznie

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} + a \frac{\partial f}{\partial v} = 0 \quad (446)$$

otrzymujemy równanie Własowa, które opisuje układ bezzderzeniowy wielu cząstek oddziałujących za pośrednictwem sił zachowawczych.

Całkując funkcję rozkładu po przestrzeni prędkości, możemy policzyć gęstość

$$n(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, v, t) dv \quad (447)$$

prędkość środka masy

$$n u(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} v f(x, v, t) dv \quad (448)$$

i inne (temperatura, przepływ ciepła, ...)

Równanie Własowa jest jednorodne i funkcja  $f$  jest zachowana (wraz z wszystkimi potęgami) – w szczególności

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f \ln f dx dv = 0 \quad (449)$$

czyli zachowana jest też entropia układu

Przykład – bezzderzeniowy układ grawitacyjny

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} + g \frac{\partial f}{\partial v} = 0 \quad (450)$$

gdzie przyspieszenie grawitacyjne  $g(x, t) = -\partial\Phi/\partial x$ , a sam potencjał

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = 4\pi Gmn(x) \quad (451)$$

### Rozwiązania różnicowe równania Własowa

Równanie Własowa jest w istocie równaniem adwekcji i możemy je rozwiązać na siatce  $I \times J$  z krokami  $\Delta x$ ,  $\Delta v$  (i czasowym  $\Delta t$ ) np. korzystając ze schematu Laxa

$$\begin{aligned} f_{ij}^{n+1} &= \frac{1}{4}(f_{i+1,j}^n + f_{i-1,j}^n + f_{i,j+1}^n + f_{i,j-1}^n) - \\ &- \frac{\Delta t v_j}{2\Delta x}(f_{i+1,j}^n - f_{i-1,j}^n) + \frac{\Delta t}{2\Delta v} \cdot \frac{\Phi_{i+1}^n - \Phi_{i-1}^n}{2\Delta x}(f_{i,j+1}^n - f_{i,j-1}^n) \end{aligned} \quad (452)$$

po każdym kroku czasowym trzeba policzyć nowy potencjał, najpierw rozkład masy

$$m_i^{n+1} = m \sum_j f_{i,j}^{n+1} \Delta v \quad (453)$$

i sam potencjał z równania Poissona

$$\Phi_{i+1}^{n+1} - 2\Phi_i^{n+1} + \Phi_{i-1}^{n+1} = 4\pi Gm_i^{n+1}(\Delta x)^2 \quad (454)$$

dla zapewnienia stabilności potrzeba, żeby

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{v_{\max}} \quad (455)$$

ale i wzdłuż osi prędkości

$$\Delta t \leq \frac{\Delta v}{g_{\max}} \quad (456)$$

gdzie

$$g_{\max} = \max \frac{\Phi_{i+1}^{n+1} - \Phi_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} \quad (457)$$

ponieważ  $g \sim 4\pi Gmn\Delta x$  to ostatecznie

$$(\Delta t)^2 \leq \frac{\Delta v}{v_{\max}} \cdot \frac{1}{4\pi Gmn} \quad (458)$$

□

### Klasyczna dynamika cieczy

Celem jest opis układu wielu ciał przy pomocy funkcji ciągłych. Na poziomie molekularnym zderzenia cząstek zachodzą tak często, że można założyć lokalną równowagę termodynamiczną. W dowolnym punkcie możemy założyć, że cząstki mają rozkład (przynajmniej bliski) Maxwella i można ten rozkład opisać prędkością w układzie środka masy i temperatury.

Zamiast funkcji rozkładu możemy użyć zmienne w przestrzeni konfiguracyjnej – gęstość  $\rho$ , predkość  $v$ , temperaturę  $T$  (lub ciśnienie  $p$ , czy energię wewnętrzną  $\varepsilon$ ).

Równania opisujące nasz układ

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho v = 0 \quad (459)$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \nabla \cdot \rho v v = -\nabla p \quad (460)$$

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + p \nabla \cdot v + \nabla \cdot \rho \varepsilon v = 0 \quad (461)$$

i potrzeba je uzupełnić równaniem stanu

$$\varepsilon = \varepsilon(p, \rho) \quad (462)$$

np. dla gazu doskonałego

$$\varepsilon = \frac{kT}{m(\gamma - 1)} = \frac{p}{\rho(\gamma - 1)} \quad (463)$$

ostatnie równanie możemy też przedstawić w postaci zachowawczej

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \rho \varepsilon + \frac{1}{2} \rho v^2 \right) + \nabla \cdot \left( \rho \varepsilon v + \frac{1}{2} \rho v^2 v + p v \right) = 0 \quad (464)$$

Taki opis jest poprawny jeśli średnia droga swobodna pomiędzy zderzeniami jest mała w stosunku do skali zmian gęstości, pędu i energii. Jeśli tak nie jest, to musimy wziąć pod uwagę unoszenie pędu i energii przez cząstki poprzez dyfuzję.

Możemy ten efekt uwzględnić wprowadzając tensor napięć lepkich w równania opisujące pęd

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v v + pI + V) = 0 \quad (465)$$

i energię

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + (pI + V) : \nabla v + \nabla \cdot (\rho \varepsilon v + q) = 0 \quad (466)$$

gdzie strumień przewodnictwa cieplnego ma postać

$$q = -\kappa \nabla T \quad (467)$$

a tensor lepkości opisuje przenoszenie pędu w ruchu ścinającym i ściskającym

$$V = \mu(\nabla v + \overline{\nabla v} - \frac{2}{3}I\nabla \cdot v) \quad (468)$$

przewodnictwo  $\kappa$  i lepkość  $\mu$  zależą od częstości z jaką zderzają się cząstki, więc ogólnie mogą zależeć od lokalnej temperatury i gęstości.

Przy braku lepkości i przewodnictwa cieplnego równania są równaniami hiperbolicznymi i charakterystycznymi prędkościami w układzie są prędkość środka masy  $v$  i prędkość dźwięku  $c_s = \sqrt{\gamma p / \rho}$ , zatem używając jawnych schematów różnicowych musimy zadbać, żeby

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{|v| + c_s} \quad (469)$$

### Rozwiązanie różnicowe w przypadku nieściśliwym

Często energia przepływu jest mała w porównaniu z energią wewnętrzną, czyli przepływ nie może spowodować kompresji cieczy.

$$\nabla \cdot v = 0 \quad (470)$$

czyli

$$\frac{d\rho}{dt} = 0 \quad (471)$$

równania znacząco się upraszczają

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \cdot \nabla v = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 v \quad (472)$$

gdzie  $\nu = \mu / \rho$ , oraz

$$\nabla \cdot v = 0 \quad (473)$$

Można wyeliminować ciśnienie biorąc rotację na pierwsze z równań, wprowadzając wirowość cieczy

$$\xi = \nabla \times v \quad (474)$$

wtedy

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + \nabla \times (v \cdot \nabla v) = \nu \nabla^2 \xi \quad (475)$$

czyli

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + v \cdot \nabla \xi = \nu \nabla^2 \xi \quad (476)$$

Drugie równanie możemy „zrealizować” wprowadzając funkcję prądu

$$v = \nabla \times \Psi \quad (477)$$

wtedy

$$\nabla \times (\nabla \times \Psi) = \nabla \times v = \xi \quad (478)$$

i stąd

$$\nabla^2 \Psi - \nabla(\nabla \cdot \Psi) = -\xi \quad (479)$$

i w końcu

$$\nabla^2 \Psi = -\xi \quad (480)$$

W przypadku dwuwymiarowym mamy szczególnie prostą sytuację. Ruch odbywa się w płaszczyźnie  $(x, y)$ , prędkość ma dwie składowe  $(v_x, v_y)$ , a wirowość i funkcja prądu redukują się do pseudoskalarów

$$\begin{aligned} \xi &= (0, 0, \xi) \\ \Psi &= (0, 0, \Psi) \end{aligned} \quad (481)$$

i pełny układ równań

$$\begin{aligned} \frac{\partial \xi}{\partial t} + v \cdot \nabla \xi &= \nu \nabla^2 \xi \\ \nabla^2 \Psi &= -\xi \\ v &= \nabla \times (\Psi e_z) \end{aligned} \quad (482)$$

stosując np. schemat Laxa wykonujemy krok pomocniczy

$$\begin{aligned} v_{x_{i,j+1}}^n &= (\Psi_{i,j+2}^n - \Psi_{i,j}^n) \frac{1}{2\Delta} \\ v_{y_{i,j+1}}^n &= -(\Psi_{i+1,j+1}^n - \Psi_{i-1,j+1}^n) \frac{1}{2\Delta} \\ \xi_{i,j+1}^{n+1/2} &= \frac{1}{4}(\xi_{i,j}^n + \xi_{i+1,j+1}^n + \xi_{i-1,j+1}^n + \xi_{i,j+2}^n) - \\ &\quad - \frac{\Delta t}{4\Delta} v_{x_{i,j+1}}^n (\xi_{i+1,j+1}^n - \xi_{i-1,j+1}^n) - \\ &\quad - \frac{\Delta t}{4\Delta} v_{y_{i,j+1}}^n (\xi_{i,j+2}^n - \xi_{i,j}^n) \end{aligned} \quad (483)$$

rozwiązujemy równanie Poissona

$$\Psi_{i,j+1}^{n+1/2} + \Psi_{i,j-1}^{n+1/2} + \Psi_{i+2,j+1}^{n+1/2} + \Psi_{i+2,j-1}^{n+1/2} - 4\Psi_{i+1,j}^{n+1/2} = -2\Delta^2 \xi_{i+1,j}^{n+1/2} \quad (484)$$

i krok główny

$$\begin{aligned} v_{xi,j}^{n+1/2} &= (\Psi_{i,j+1}^{n+1/2} - \Psi_{i,j-1}^{n+1/2}) \frac{1}{2\Delta} \\ v_{yi,j}^{n+1/2} &= -(\Psi_{i+1,j}^{n+1/2} - \Psi_{i-1,j}^{n+1/2}) \frac{1}{2\Delta} \\ \xi_{i,j}^{n+1} &= \xi_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{2\Delta} v_{xi,j}^{n+1/2} (\xi_{i+1,j}^{n+1/2} - \xi_{i-1,j}^{n+1/2}) - \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2\Delta} v_{yi,j}^{n+1/2} (\xi_{i,j+1}^{n+1/2} - \xi_{i,j-1}^{n+1/2}) - \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2\Delta^2} \nu (\xi_{i+1,j+1}^n + \xi_{i-1,j+1}^n + \xi_{i+1,j-1}^n + \xi_{i-1,j-1}^n - 4\xi_{i,j}^n) \end{aligned} \quad (485)$$

i ponownie równanie Poissona

$$\Psi_{i+1,j+1}^{n+1} + \Psi_{i+1,j-1}^{n+1} + \Psi_{i-1,j+1}^{n+1} + \Psi_{i-1,j-1}^{n+1} - 4\Psi_{i,j}^{n+1} = -2\Delta^2 \xi_{i,j}^{n+1} \quad (486)$$

aby spełnić warunek CFL

$$\Delta t \leq \frac{\Delta}{|v|_{\max}} \quad (487)$$

ponadto człon dyfuzyjny wymaga

$$\Delta t \leq \frac{\Delta^2}{\nu} \quad (488)$$

□