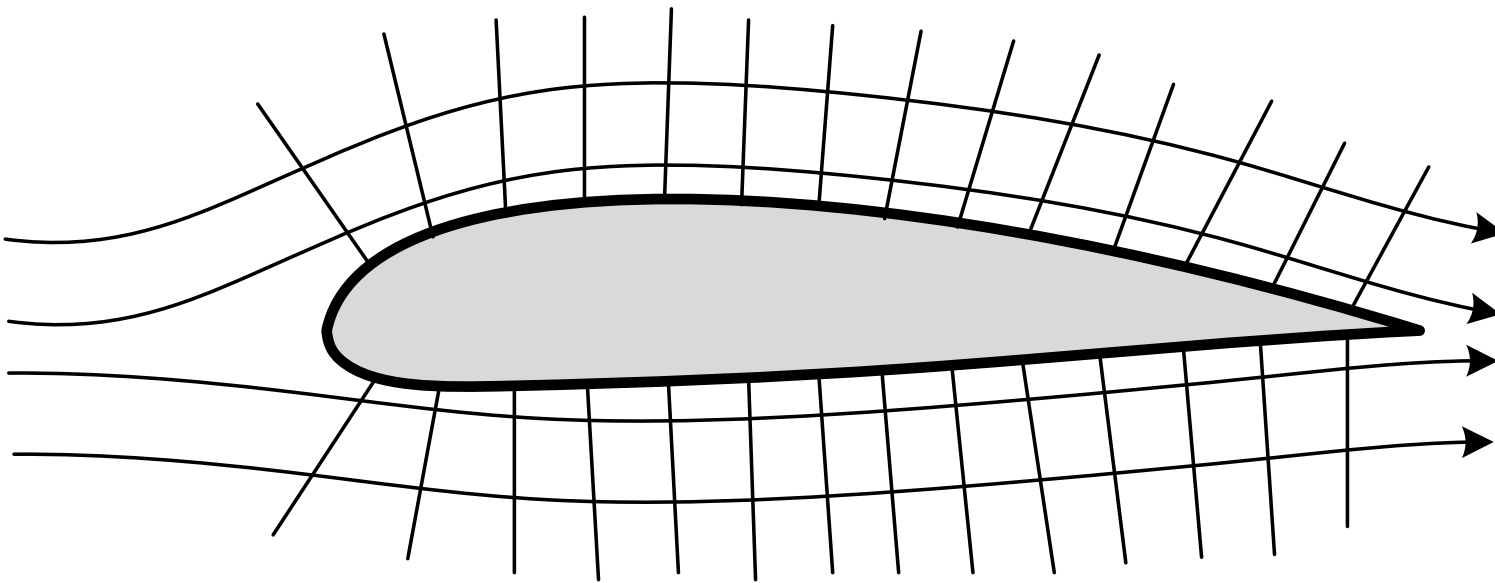


ΒΑΣΙΚΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ
ΡΕΥΣΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗ - ΑΕΡΟΔΥΝΑΜΙΚΗ



Καθηγητής Ι. Καλλιντέρης

Τμήμα Μηχανολόγων και Αεροναυπηγών Μηχανικών
Πανεπιστήμιο Πατρών

Πάτρα 2023

1 Μέθοδος των Πεπερασμένων Διαφορών

Περιεχόμενα

1	Μέθοδος των Πεπερασμένων Διαφορών	2
1.1	Κατηγορίες Διαφορικών Εξισώσεων	3
1.2	Ανάπτυγμα σειράς Taylor	4
1.3	Κατασκευή Πεπερασμένων Διαφορών	7
1.4	Διακριτοποίηση Παραγώγου Δεύτερης Τάξης.....	10
1.5	Η Μέθοδος των Πεπερασμένων Όγκων.....	16
1.6	Ρητό και Άρρητο Αριθμητικό Σχήμα	18
1.7	Συνοριακές Συνθήκες	20
1.8	Τα είδη Σφάλματος στις Υπολογιστικές Προσομοιώσεις.....	21
1.9	Τυπικό Διάγραμμα Ροής Εφαρμογής Αριθμητικού Σχήματος	22

1.1 Κατηγορίες Διαφορικών Εξισώσεων

Οι μερικές διαφορικές εξισώσεις διακρίνονται σε (i) υπερβολικές, (ii) παραβολικές και (iii) ελλειπτικές.

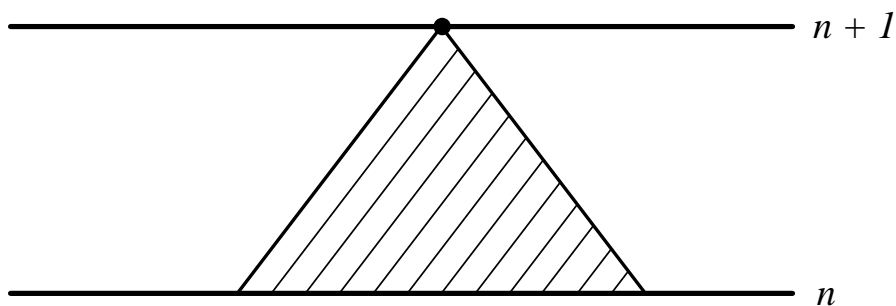
Υπάρχουν ειδικές περιπτώσεις στις οποίες η διαφορική εξίσωση αλλάζει χαρακτήρα κάτω από συγκεκριμένες συνθήκες (π.χ. μετάβαση από υπερηχητική σε υποηχητική ροή).

Οι Υπερβολικές και οι Παραβολικές εξισώσεις περιέχουν συνήθως χρονική παράγωγο με την λύση να «περπατά» στον χρόνο ("Marching problems").

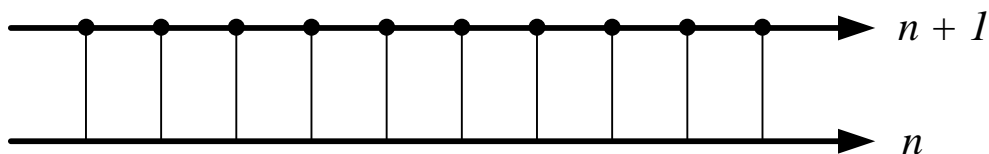
Η λύση στις ελλειπτικές εξισώσεις έρχεται σε ισορροπία ("Steady State") μέσα από επαναλήψεις ("Equilibrium problems").

Στα προβλήματα της Ρευστομηχανικής – Αεροδυναμικής ενδιαφέρον έχουν οι εξής εξισώσεις – μοντέλα σχετικών διεργασιών του πεδίου:

- (i) η πρώτης τάξης κυματική εξίσωση ($u_t + c u_x = 0$)
- (ii) η εξίσωση της διάχυσης ($u_t = \nu u_{xx}$)
- (iii) η εξίσωση Laplace ($u_{xx} + u_{yy} = 0$)



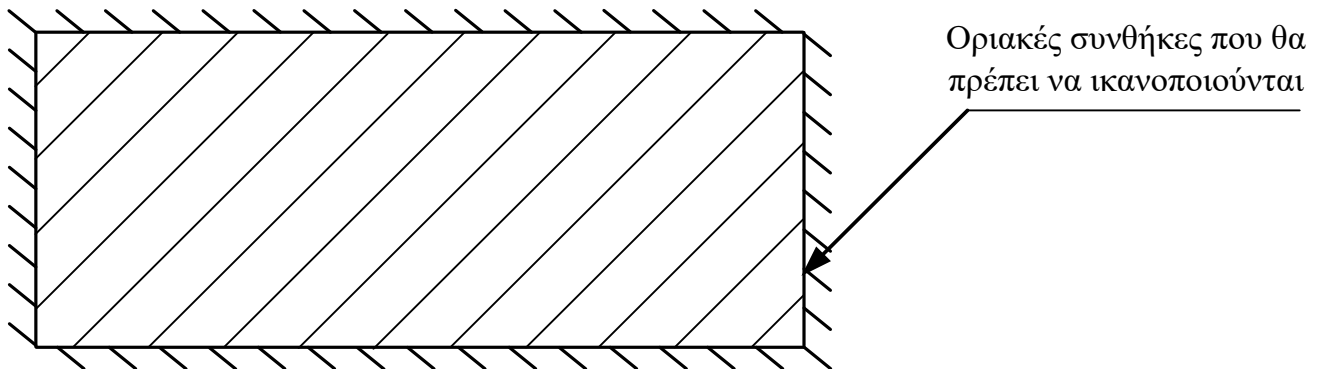
Σχήμα 1.1 Υπερβολικό πρόβλημα: η λύση σε ένα σημείο στην χρονική στιγμή ($n+1$) εξαρτάται από την λύση σε ορισμένα σημεία στην στιγμή (n).



Σχήμα 1.2 Παραβολικό πρόβλημα: η λύση σε κάθε σημείο του πεδίου στην χρονική στιγμή ($n+1$) εξαρτάται από την λύση σε όλα τα σημεία του πεδίου την στιγμή (n).

Τα "Equilibrium problems" είναι προβλήματα των οποίων η λύση της μερικής διαφορικής εξίσωσης απαιτείται να βρίσκεται σε ένα κλειστό πεδίο που "υπακούει" ένα καθορισμένο σύνολο συνοριακών συνθηκών. Τέτοιου είδους προβλήματα είναι για παράδειγμα σταθεροποιημένης κατάστασης ("steady-state") κατανομής θερμοκρασίας, ασυμπίεστης και μη συνεκτικής ροής, κατανομής τάσεων σε ένα στερεό.

Στο Σχήμα 1.3 παρουσιάζεται γραφικά η μορφή ενός Ελλειπτικού προβλήματος:



Σχήμα 1.3 Ελλειπτικό πρόβλημα: η λύση σε ένα σημείο του πεδίου εξαρτάται από τις οριακές συνθήκες, καθώς και από την λύση σε όλα τα άλλα σημεία.

1.2 Ανάπτυγμα σειράς Taylor

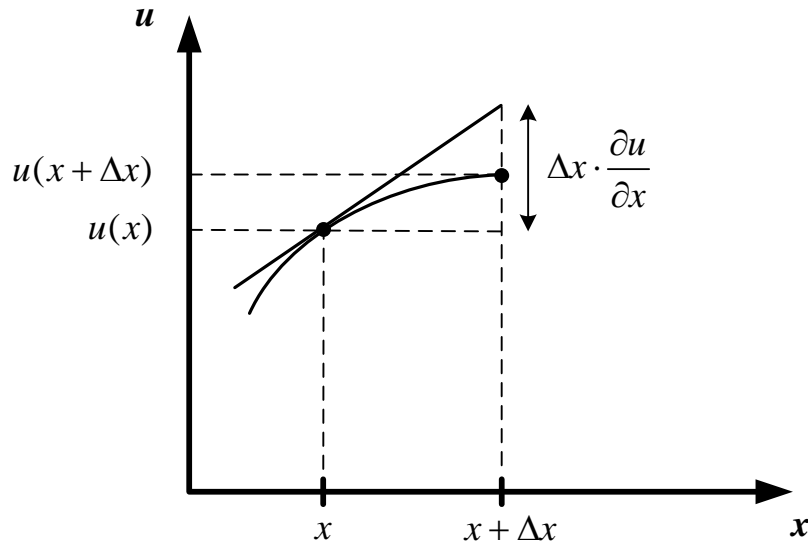
Το ανάπτυγμα Taylor είναι το "εργαλείο" για την διακριτοποίηση μιας συνεχούς συνάρτησης $u(x, y)$, μετατρέποντάς την στη διακριτή μορφή $u_{i,j} = u(i\Delta x, j\Delta y)$ ώστε να γίνει εφικτή η διαχείρισή της από Η/Υ.

Το ανάπτυγμα Taylor στην μία διάσταση (1- D) έχει την παρακάτω μορφή:

$$u(x + \Delta x) = u(x) + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dots + \frac{(\Delta x)^n}{n!} \frac{\partial^n u}{\partial x^n} \quad (1.1)$$

Το ανάπτυγμα μπορεί να κατανοηθεί αν θεωρήσουμε γεωμετρική απεικόνιση της προσέγγισης της τιμής της συνάρτησης σημείο $(x + \Delta x)$ με βάση την τιμή της καθώς και την τιμή της παραγώγου της $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)$ στην θέση x , όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.4. Η

πρώτη προσέγγιση είναι $u(x + \Delta x) = u(x)$. Η δεύτερη και πιο ακριβής προσέγγιση είναι: $u(x + \Delta x) = u(x) + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x}$.



Σχήμα 1.4 Προσέγγιση της τιμής της συνάρτησης u στο σημείο $x + \Delta x$ με βάση την τιμή της καθώς και την τιμή της παραγώγου της στη θέση x .

Στις δύο διαστάσεις (2- D), το ανάπτυγμα Taylor γίνεται:

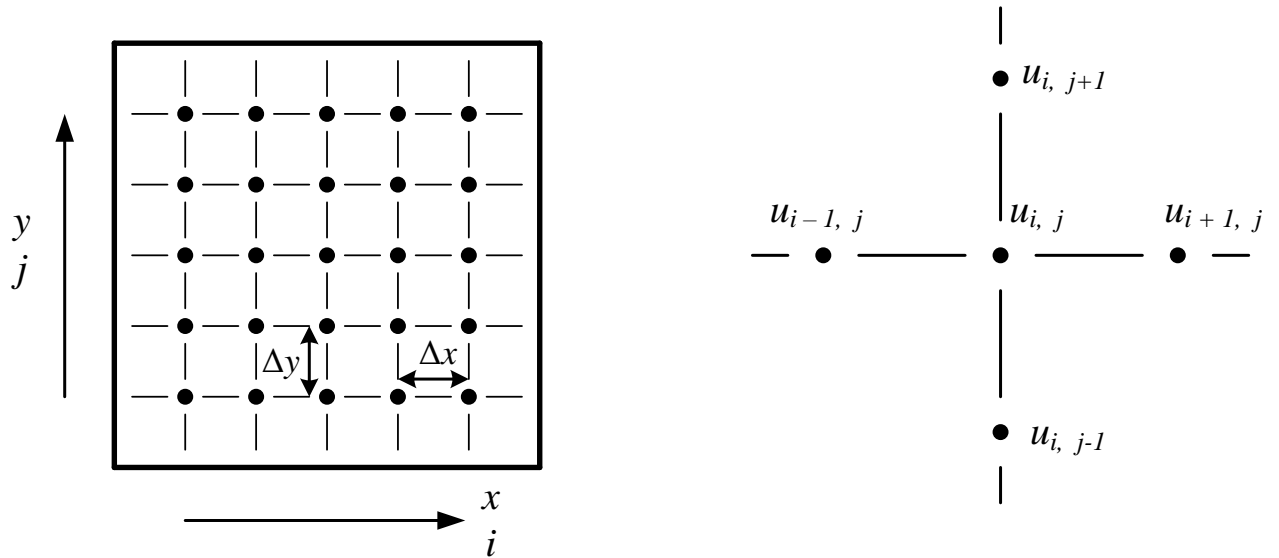
$$u(x + \Delta x, y + \Delta y) = u(x, y) + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \Delta y \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{(\Delta y)^2}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + 2 \frac{(\Delta x)(\Delta y)}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial xy} + \dots + \frac{1}{n!} \left((\Delta x) \frac{\partial}{\partial x} + (\Delta y) \frac{\partial}{\partial y} \right)^n u(x, y) \quad (1.2)$$

Έστω η υπολογιστική κυψέλη ("numerical stencil") δύο διαστάσεων που φαίνεται στο Σχήμα 1.5.

Το ανάπτυγμα Taylor για τα σημεία της υπολογιστικής κυψέλης $u_{i+1, j}$, $u_{i-1, j}$, $u_{i, j+1}$, $u_{i, j-1}$ γύρω από το σημείο $u_{i, j}$, εκφράζεται ως εξής:

$$u_{i\pm 1, j} = u_{i, j} \pm \Delta x \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i, j} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{i, j} \pm \dots \quad (1.3)$$

$$u_{i, j\pm 1} = u_{i, j} \pm \Delta y \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{i, j} + \frac{(\Delta y)^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right|_{i, j} \pm \dots \quad (1.4)$$

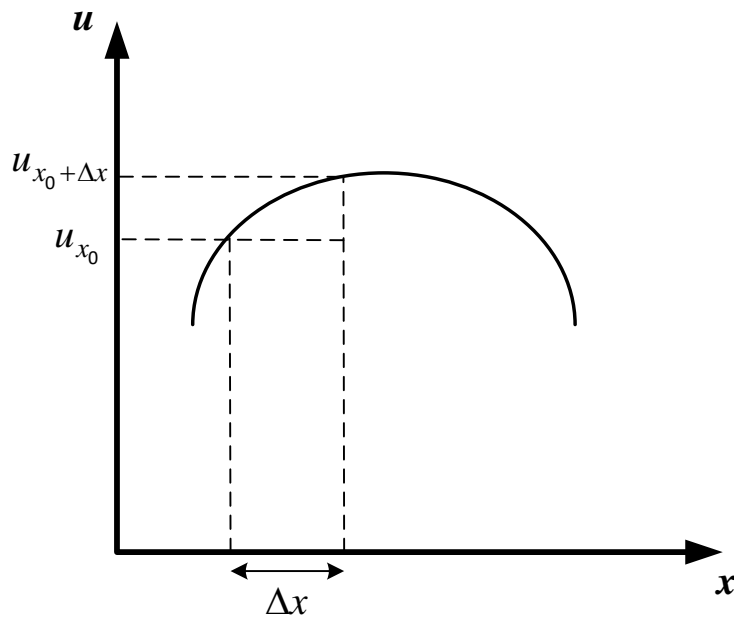


Σχήμα 1.5 Πλέγμα πεπερασμένων διαφορών.

1.3 Κατασκευή Πεπερασμένων Διαφορών

Οι εξισώσεις που διέπουν φυσικά φαινόμενα είναι Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις οι οποίες εμπεριέχουν παραγώγους χωρικές και χρονικές, συνήθως πρώτης και δεύτερης τάξης. Για την επίλυσή τους, θα πρέπει να δημιουργηθεί προσέγγιση των χωρικών και χρονικών παραγώγων στον διακριτό χώρο (x_i, y_j) .

Έστω μια συνεχής συνάρτηση $u(x)$ που απεικονίζεται στο Σχήμα 1.6.



Σχήμα 1.6 Συνεχής συνάρτηση $u(x)$ για την προσέγγιση της παραγώγου της.

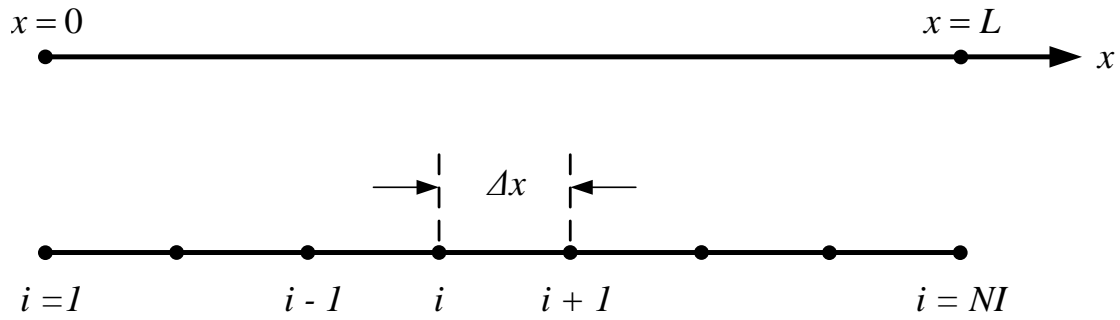
Θεωρώντας τα σημεία x_0 και $x_0 + \Delta x$, ορίζεται παράγωγος με την γνωστή σχέση:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x_0 + \Delta x) - u(x_0)}{\Delta x}$$

Ο συνεχής χώρος διακριτοποιείται όπως απεικονίζεται στο Σχήμα 1.7.

Η ανωτέρω παράγωγος προσεγγίζεται με την ακόλουθη "πεπερασμένη διαφορά":

$$\frac{\partial u}{\partial x} \cong \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$$



Σχήμα 1.7 Ομοιόμορφη υπολογιστική κυψέλη στην μια διάσταση.

Χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα Taylor στην μια διάσταση (1- D), προκύπτουν διαφορές αναπαραστάσεις της πρώτης παραγώγου, οι βασικότερες των οποίων είναι οι εξής:

1. Προς τα εμπρός διαφóριση ("forward difference")

$$u_{i+1} = u_i + \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{(\Delta x)^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + \frac{(\Delta x)^3}{6} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i + \dots \quad (1.5)$$

διαιρώντας κατά μέλη με Δx προκύπτει τελικά:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} + \underbrace{\frac{-\Delta x}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i}_{\text{Σφάλμα Αποκοπής}} + \dots \quad (1.6)$$

2. Προς τα πίσω διαφóριση ("backward difference")

$$u_{i-1} = u_i - \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{(\Delta x)^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i - \frac{(\Delta x)^3}{6} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i + \dots \quad (1.7)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + \underbrace{\frac{\Delta x}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i}_{\text{Σφάλμα Αποκοπής}} + \dots \quad (1.8)$$

3. Κεντρική διαφóριση ("central difference")

Η κεντρική διαφóριση προκύπτει αφαιρώντας κατά μέλη τις εξισώσεις (1.5), (1.7):

$$u_{i+1} - u_{i-1} = 2\Delta x \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i + \frac{(\Delta x)^3}{3} \left. \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right|_i + \dots \quad (1.9)$$

$$\Rightarrow \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + \underbrace{\frac{-(\Delta x)^2}{6} \left. \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right|_i}_{\text{Σφάλμα Αποκοπής}} + \dots \quad (1.10)$$

Στο σημείο αυτό εισάγεται η έννοια του Σφάλματος Αποκοπής ("Truncation Error"). Γενικά για το Σφάλμα Αποκοπής ισχύει :

Σφάλμα Αποκοπής \equiv (Μερική Διαφορική Εξίσωση) - (Εξίσωση Πεπερασμένων Διαφορών)

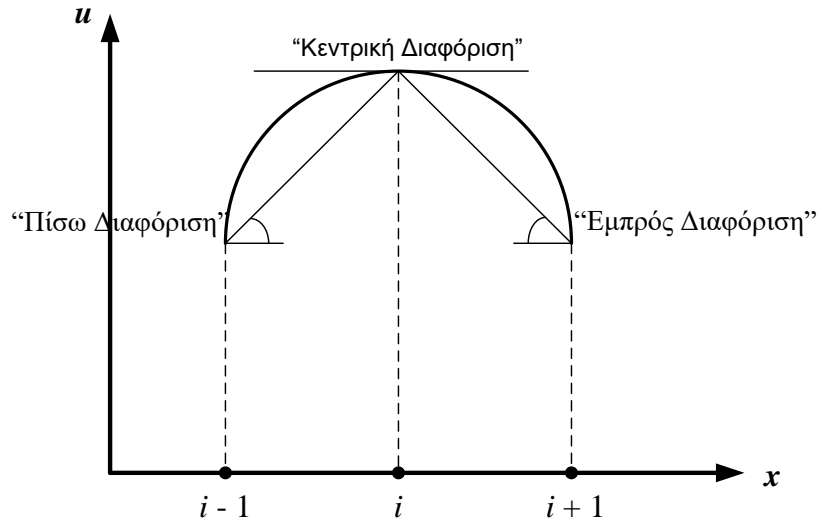
ή συμβολικά γράφουμε ως εξής :

$$TE = PDE - FDE$$

όπου PDE είναι η διαφορική εξίσωση και FDE είναι η διακριτή εξίσωση.

Η τάξη μεγέθους του σφάλματος αναφέρεται στον μεγαλύτερο όρο του ("leading order term") και συμβολίζεται ως $O[(\Delta t)^l, h^m]$, όπου h είναι το τοπικό διάστημα του πλέγματος και l, m είναι μη μηδενικοί ακέραιοι. Παρατηρούμε ότι το σφάλμα στην κεντρική διαφóριση είναι μιας τάξης μικρότερο από το σφάλμα που εμφανίζεται στην προς τα εμπρός και στην προς τα πίσω διαφóριση ("upwind differences"). Στην κεντρική διαφóριση η υπολογιστική κυψέλη ("stencil") είναι πιο μεγάλη σε σχέση με τις "εμπρός" και "πίσω" διαφορές, η οποία «δίνει» περισσότερη ακρίβεια.

Επικρατεί ο γενικός κανόνας ότι όσο επεκτείνεται η υπολογιστική κυψέλη τόσο η ακρίβεια της πεπερασμένης διαφοράς βελτιώνεται. Η γραφική αναπαράσταση των παραπάνω διαφóρισεων παρουσιάζεται στο Σχήμα 1.8.



Σχήμα 1.8 Υπολογισμός της κλίσης $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)$ στο σημείο (i) χρησιμοποιώντας "εμπρός", "πίσω", και "κεντρική" διαφοράση.

Παρατηρούμε ότι οι "μη συμμετρικές" διαφορές έχουν μεγάλο σφάλμα στον υπολογισμό της κλίσης ενώ η "συμμετρική" διαφορά είναι πολύ πιο ακριβής.

1.4 Διακριτοποίηση Παραγώγου Δεύτερης Τάξης

Η διακριτοποίηση της u_{xx} επιτυγχάνεται ακριβώς με την ίδια λογική.

Προσθέτοντας τα αναπτύγματα (1.5) και (1.7) προκύπτει:

$$u_{i+1} + u_{i-1} = 2u_i + (\Delta x)^2 \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_i + \frac{(\Delta x)^4}{12} \left. \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right|_i + \dots$$

Λύνοντας ως προς $\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_i$ παίρνουμε τελικά :

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_i = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{(\Delta x)^2} - \underbrace{\frac{(\Delta x)^2}{12} \left. \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right|_i}_{\text{Σφάλμα Αποκοπής}} + \dots \quad (1.11)$$

Δηλαδή, το σφάλμα αποκοπής (TE) είναι δεύτερης τάξης $O(\Delta x)^2$ με βάση τον μεγαλύτερο (κυρίαρχο) όρο του. Έχουμε ακρίβεια της πεπερασμένης διαφοράς η οποία είναι δεύτερης τάξης. Όπως γίνεται φανερό, το σφάλμα εξαρτάται από το τοπικό μέγεθος (Δx) του αριθμητικού πλέγματος, και από την παράγωγο της λύσης (u_{xxxx}). Εάν για παράδειγμα, η συνάρτηση (u) είναι σταθερή ή γραμμική, τότε το σφάλμα γίνεται μηδενικό.

Εναλλακτική προσέγγιση της (u_{xx})

Η u_{xx} μπορεί να προσεγγιστεί εναλλακτικά με την χρήση των σημείων $i, i+1, i+2$.

Η σχέση (1.5) πολλαπλασιάζεται με τον συντελεστή 2 κατά μέλη:

$$2u_{i+1} = 2u_i + 2\Delta x \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i + 2 \left. \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_i + O(\Delta x)^3$$

Ανάπτυγμα Taylor στο σημείο $i+2$ ως προς το σημείο i :

$$u_{i+2} = u_i + 2\Delta x \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i + \left. \frac{(2\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_i + O(\Delta x)^3$$

Αφαιρώντας τις δύο παραπάνω σχέσεις:

$$u_{i+2} - 2u_{i+1} = -u_i + \left. (\Delta x)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_i + O(\Delta x)^3$$

και λύνοντας ως προς u_{xx} προκύπτει τελικά:

$$u_{xx} = \frac{u_i - 2u_{i+1} + u_{i+2}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x) \quad (1.12)$$

Παρατηρούμε ότι με την ασύμμετρη διαφορά έχουμε πρώτης τάξης ακρίβεια σε αντίθεση με την προηγούμενη συμμετρική προσέγγιση της u_{xx} .

Γενικά, μπορούμε να προσεγγίσουμε οποιαδήποτε παράγωγο με κατάλληλο συνδυασμό σημείων του αριθμητικού πλέγματος. Οι συμμετρικές διαφορές δίνουν

μεγαλύτερη ακρίβεια, όπως και η αύξηση του αριθμού των σημείων τα οποία χρησιμοποιούνται.

Παράδειγμα 1.1: *Αν είναι γνωστή η πεπερασμένη διαφορά*

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_i = \frac{-u_{i+2} + 16u_{i+1} - 30u_i + 16u_{i-1} - u_{i-2}}{12h^2}, \text{ να βρεθεί η τάξη ακρίβειας της.}$$

Λύση

Ανάπτυγμα Taylor γύρω από το σημείο i , καθενός από τους όρους που εμφανίζονται στην σχέση της εκφώνησης:

$$u_{i+1} = u_i + hu_x \Big|_i + \frac{h^2}{2} u_{xx} \Big|_i + \frac{h^3}{6} u_{xxx} \Big|_i + \frac{h^4}{24} u_{xxxx} \Big|_i + O(h)^5 \quad (\text{Π1.1.1})$$

$$u_{i-1} = u_i - hu_x \Big|_i + \frac{h^2}{2} u_{xx} \Big|_i - \frac{h^3}{6} u_{xxx} \Big|_i + \frac{h^4}{24} u_{xxxx} \Big|_i - O(h)^5 \quad (\text{Π1.1.2})$$

Σχηματίζουμε την πεπερασμένη διαφορά πολλαπλασιάζοντας τις σχέσεις (Π1.1.1) και (Π1.1.2) με τον συντελεστή 16 και προσθέτοντάς τες:

$$16u_{i+1} + 16u_{i-1} = 32u_i + 16h^2 u_{xx} \Big|_i + \frac{16}{12} h^4 u_{xxxx} \Big|_i + O(h)^6 \quad (\text{Π1.1.3})$$

Παρόμοια, τα αναπτύγματα για τα σημεία $i+2$ και $i-2$ είναι:

$$u_{i+2} = u_i + 2hu_x \Big|_i + 2h^2 u_{xx} \Big|_i + \frac{8}{6} h^3 u_{xxx} \Big|_i + \frac{16}{24} h^4 u_{xxxx} \Big|_i + O(h)^5 \quad (\text{Π1.1.4})$$

$$u_{i-2} = u_i - 2hu_x \Big|_i + 2h^2 u_{xx} \Big|_i - \frac{8}{6} h^3 u_{xxx} \Big|_i + \frac{16}{24} h^4 u_{xxxx} \Big|_i - O(h)^5 \quad (\text{Π1.1.5})$$

Πολλαπλασιάζοντας και τις σχέσεις (Π1.1.4) και (Π1.1.5) με τον συντελεστή -1, και προσθέτοντας προκύπτει:

$$-u_{i+2} - u_{i-2} = -2u_i - 4h^2 u_{xx} \Big|_i - \frac{16}{12} h^4 u_{xxxx} \Big|_i + O(h)^6 \quad (\text{Π1.1.6})$$

Σχηματίζουμε την πεπερασμένη διαφορά από τις σχέσεις (Π1.1.3) και (Π1.1.6):

$$(-u_{i+2} + 16u_{i+1} - 30u_i + 16u_{i-1} - u_{i-2})/12h^2 = u_{xx} + O(h^4)$$

Άρα, η έκφραση δίνει ακρίβεια τέταρτης τάξης.

Παράδειγμα 1.2: Να κατασκευαστεί η πεπερασμένη διαφορά για την παράγωγο $\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i$ με κεντρική διαφόριση χρησιμοποιώντας τα σημεία $i-1, i, i+1$ ως υπολογιστική κυψέλη.

Λύση

Το παρόν παράδειγμα παρουσιάζει έναν διαφορετικό τρόπο δουλειάς για την κατασκευή της πεπερασμένης διαφοράς για την παράγωγο $\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i$ χρησιμοποιώντας τα σημεία $i-1, i, i+1$.

Έστω ότι η παράγωγος είναι γραμμικός συνδυασμός των τιμών της u στα σημεία $i-1, i, i+1$:

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i = \alpha \cdot u_{i-1} + \beta \cdot u_i + \gamma \cdot u_{i+1} \quad (\text{Π1.2.1})$$

Τα σχετικά αναπτύγματα Taylor ως προς το σημείο i είναι:

$$u_{i-1} = u_i - \Delta x \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{(-\Delta x)^2}{2} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + \frac{(-\Delta x)^3}{6} \left. \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i + \dots \quad (\text{Π1.2.2})$$

$$u_{i+1} = u_i + \Delta x \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + \frac{\Delta x^3}{6} \left. \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i + \dots \quad (\text{Π1.2.3})$$

Πολλαπλασιάζοντας κατά μέλη τις (Π1.2.2) και (Π1.2.3) με α και γ αντίστοιχα και αντικαθιστώντας τες στην (Π1.2.1) προκύπτει:

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i = (\alpha + \beta + \gamma) \cdot u_i + (\gamma - \alpha) \cdot \Delta x \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + (\gamma + \alpha) \cdot \frac{\Delta x^2}{2} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i +$$

$$+ (\gamma - \alpha) \cdot \frac{\Delta x^3}{6} \left. \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i + \dots \quad (\text{Π1.2.4})$$

Για να είναι ίσα τα δύο μέλη της Εξίσωσης (Π1.2.4) θα πρέπει να ισχύουν τα παρακάτω:

$$\alpha + \beta + \gamma = 0, \quad (\gamma - \alpha) \cdot \Delta x = 0, \quad (\gamma + \alpha) \cdot \frac{\Delta x^2}{2} = 1.$$

Επιλύοντας το σύστημα των ανωτέρω εξισώσεων προκύπτουν για τους συντελεστές οι τιμές: $\alpha = \gamma = \frac{1}{\Delta x^2}$ και $\beta = -\frac{2}{\Delta x^2}$. Αντικαθιστώντας τους συντελεστές στην Εξίσωση (Π1.2.1), προκύπτει η έκφραση της πεπερασμένης διαφοράς:

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Παράδειγμα 1.3: Να κατασκευαστεί η πεπερασμένη διαφορά για την παράγωγο $\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i$ με δεύτερη τάξη ακρίβειας, χρησιμοποιώντας τα σημεία $i-2, i-1, i$ ως υπολογιστική κυψέλη.

Λύση

Ανάπτυγμα Taylor γύρω από το σημείο i :

$$u_{i-2} = u_i + (-2\Delta x) \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{(-2\Delta x)^2}{2} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + \frac{(-2\Delta x)^3}{6} \left. \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i + \dots \quad (\text{Π1.3.1})$$

$$u_{i-1} = u_i + (-\Delta x) \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \frac{(-\Delta x)^2}{2} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + \frac{(-\Delta x)^3}{6} \left. \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i + \dots \quad (\text{Π1.3.2})$$

Πολλαπλασιάζοντας κατά μέλη τις σχέσεις (Π1.3.1) και (Π1.3.2) με τις σταθερές α και β αντίστοιχα, και προσθέτοντας τις δύο σχέσεις προκύπτει:

$$\alpha u_{i-2} + \beta u_{i-1} = (\alpha + \beta)u_i + (-2\alpha - \beta)\Delta x \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i + \left(2\alpha + \frac{\beta}{2} \right) (\Delta x)^2 \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_i + \frac{1}{6} (-8\alpha - \beta) (\Delta x)^3 \left. \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right|_i$$

Λύνοντας ως προς $\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i$ παίρνουμε:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i = \frac{1}{(-2\alpha - \beta)\Delta x} \left[\alpha u_{i-2} + \beta u_{i-1} - (\alpha + \beta)u_i - \left(2\alpha + \frac{\beta}{2} \right) (\Delta x)^2 \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_i - \frac{1}{6} (-8\alpha - \beta) (\Delta x)^3 \left. \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right|_i \right] \quad (\text{Π1.3.3})$$

Για δεύτερης τάξης ακρίβεια θα πρέπει για την παραπάνω σχέση να ισχύει :

$$(-2\alpha - \beta) \neq 0,$$

$$\left(2\alpha + \frac{\beta}{2} \right) = 0,$$

και

$$(-8\alpha - \beta) \neq 0$$

Θεωρούμε για το α τυχαία τιμή.

Έστω ότι $\alpha = 1$, τότε $\beta = -4$, οπότε η σχέση (Π1.3.3) τελικά γίνεται:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i = \frac{u_{i-2} - 4u_{i-1} + 3u_i}{2\Delta x} + O(\Delta x)^2 \quad (\text{Π1.3.4})$$

με το Σφάλμα Αποκοπής να ισούται με:

$$\text{TE} = \frac{1}{3} (\Delta x)^2 u_{xxx}$$

1.5 Η Μέθοδος των Πεπερασμένων Όγκων

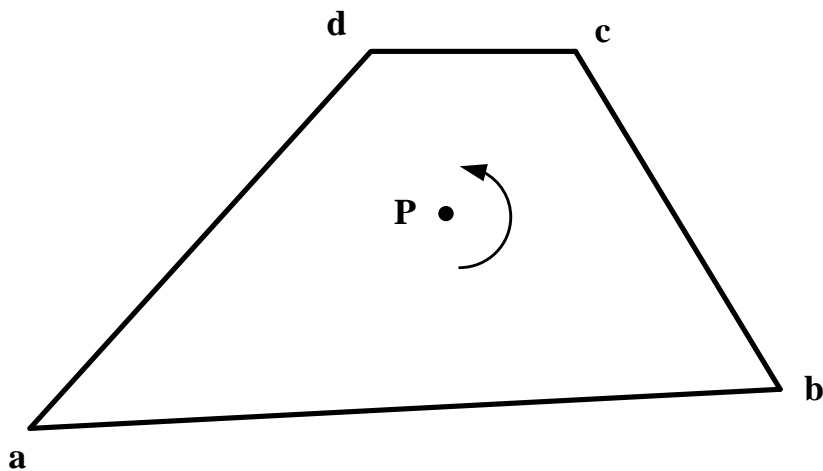
Μια διαφορετική μέθοδος διακριτοποίησης διαφορικών εξισώσεων χρησιμοποιεί την αντίστοιχη ολοκληρωτική τους μορφή. Το πεδίο διαιρείται σε μικρούς όγκους (κελιά ή υπολογιστικά στοιχεία) στους οποίους υπολογίζονται προσεγγιστικά τα ολοκληρώματα. Η μέθοδος αυτή της χωρικής διακριτοποίησης ονομάζεται *Μέθοδος Πεπερασμένων Όγκων*.

Θα εφαρμόσουμε τη *Μέθοδο Πεπερασμένων Όγκων* σε ένα διδιάστατο υπολογιστικό στοιχείο (επιφάνεια), όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.9. Η εφαρμογή στις τρεις διαστάσεις γίνεται με ανάλογο τρόπο. Ο υπολογισμός της χωρικής παραγώγου $\frac{\partial u}{\partial x}$ στο σημείο P

στο Σχήμα 1.9 γίνεται με την χρήση του Θεωρήματος του Green:

$$\iint_S \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \cdot dS = \oint_{\partial S} (u dy - v dx) \quad (1.13)$$

όπου S είναι η επιφάνεια του υπολογιστικού στοιχείου (τετράπλευρο abcd).



Σχήμα 1.9 Εφαρμογή της μεθόδου χωρικής διακριτοποίησης *Πεπερασμένων Όγκων* σε τετράπλευρο υπολογιστικό στοιχείο.

Η παράγωγος προσεγγίζεται ως η μέση τιμή στο τετράπλευρο:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_P \cong \frac{1}{S} \iint_S \frac{\partial u}{\partial x} dS = \frac{1}{S} \oint_S u dy \quad (1.14)$$

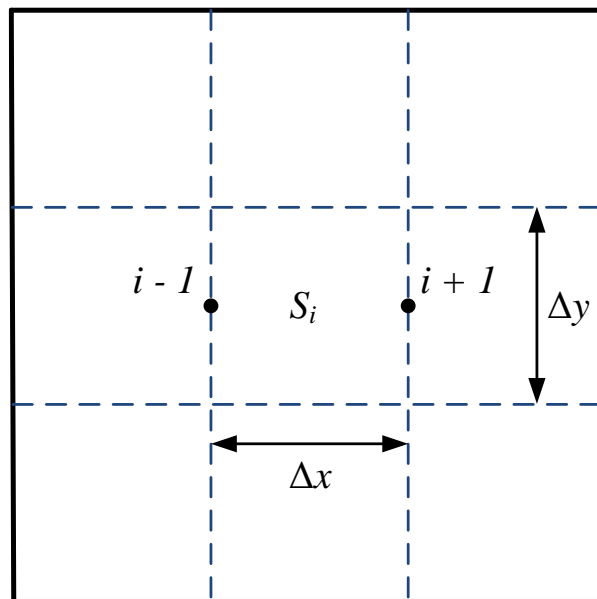
Εφαρμόζοντας τον κανόνα του Τραπεζίου για το Σχήμα 1.9 προκύπτει :

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_P \cong \frac{1}{S} \left\{ \frac{u_a + u_b}{2} (y_b - y_a) + \frac{u_b + u_c}{2} (y_c - y_b) + \frac{u_c + u_d}{2} (y_d - y_c) + \frac{u_d + u_a}{2} (y_a - y_d) \right\}$$

Στην περίπτωση του ομοιόμορφου τετραγωνικού πλέγματος του Σχήματος 1.10, η σχέση πεπερασμένων όγκων εκφράζεται ως εξής:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_P \cong \frac{1}{(\Delta x)(\Delta y)} \oint_S u dy \quad (1.15)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_P \cong \frac{1}{(\Delta x)(\Delta y)} (u_{i+1} \Delta y - u_{i-1} \Delta y) = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{\Delta x} \quad (1.16)$$



Σχήμα 1.10 Ομοιόμορφο ορθογωνικό πλέγμα στις δύο διαστάσεις.

Καταλήξαμε δηλαδή, στην ίδια ακριβώς συμμετρική διαφορά που είχε προκύψει και με την μέθοδο των Πεπερασμένων Διαφορών.

1.6 Ρητό και Άρρητο Αριθμητικό Σχήμα

Υπάρχουν γενικά, δύο επιλογές όσον αφορά το χρονικό επίπεδο στο οποίο θεωρούμε την διακριτή λύση (u) στα εμπλεκόμενα σημεία του πλέγματος.

Έστω ότι θέλουμε να διακριτοποιήσουμε την κυματική εξίσωση $u_t + c u_x = 0$.

Η διακριτοποίηση γίνεται με την μέθοδο FTCS ("Forward Time Central Space"), δηλαδή χρησιμοποιείται προς τα εμπρός διαφόριση για τον χρόνο και κεντρική για τον χώρο:

$$u_t \cong \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t}$$

$$u_x \cong \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x}$$

Αντικαθιστώντας στην κυματική εξίσωση προκύπτει :

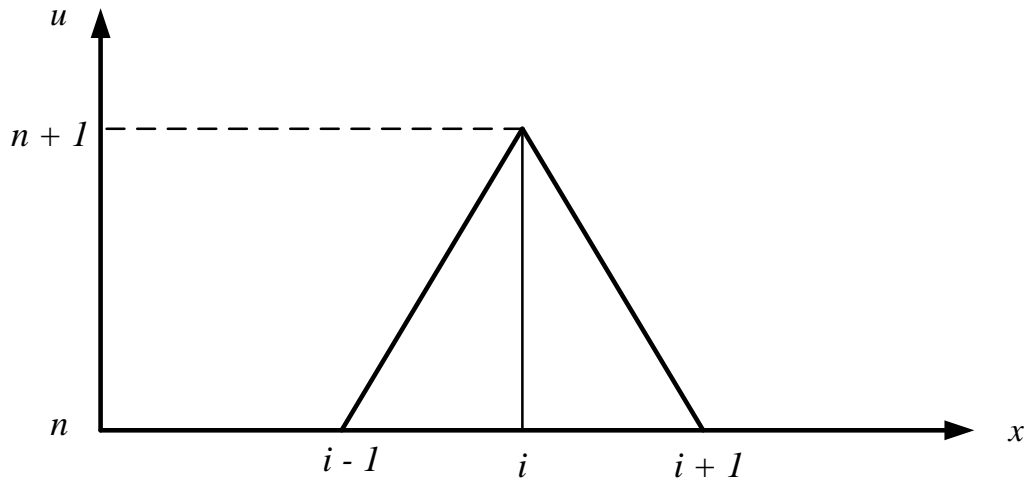
$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + c \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} = 0 \quad (1.17)$$

Η ανωτέρω διακριτή εξίσωση μπορεί να επιλυθεί *ρητά* ως προς τον μοναδικό άγνωστο u_i^{n+1} :

$$u_i^{n+1} = u_i^n - c \frac{\Delta t}{2\Delta x} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) \quad \text{για τιμές } i = 2, \dots, NI - 1 \quad (1.18)$$

Η ανωτέρω προσέγγιση οδηγεί σε *ρητό* (*explicit*) αριθμητικό σχήμα.

Το Σχήμα 1.11 απεικονίζει την εξάρτηση της επίλυσης στην χρονική στιγμή ($n+1$) από την λύση στην προηγούμενη χρονική στιγμή (n).



Σχήμα 1.11 Αναπαράσταση Ρητού αριθμητικού σχήματος.

Η δεύτερη επιλογή είναι η χωρική παράγωγος να διακριτοποιηθεί στην χρονική στιγμή $(n+1)$:

$$u_x \cong \frac{u_{i+1}^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x}$$

Έτσι προκύπτει το ακόλουθο αριθμητικό σχήμα :

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + c \frac{u_{i+1}^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} = 0 \quad (1.19)$$

ή

$$u_i^{n+1} + c \frac{\Delta t}{2\Delta x} (u_{i+1}^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}) = u_i^n \quad \text{για τιμές } i = 2, \dots, NI - 1 \quad (1.20)$$

Η ανωτέρω *πεπλεγμένη* μορφή εκφράζει «άρρητο» αριθμητικό σχήμα και απαιτεί επίλυση συστήματος για την εύρεση της λύσης στο χρονικό επίπεδο $(n+1)$.

Το Σχήμα 1.12 απεικονίζει την εξάρτηση της επίλυσης στην χρονική στιγμή $(n+1)$ από την λύση στην προηγούμενη χρονική στιγμή (n) .

- Φυσικές Συνθήκες, όπως για παράδειγμα η ύπαρξη μόνωσης σε τοίχο ($q = 0$), ή η συνθήκη μη ολίσθησης σε τοίχο ($u = 0$).
- Τεχνητές Συνθήκες, οι οποίες είναι συνθήκες που απορρέουν από το είδος του προβλήματος και την απαίτηση να "εφευρεθεί" μια συνθήκη η οποία να "υπακούει" στην φυσική του προβλήματος. Η συνθήκη αυτή βγαίνει συνήθως από την εξίσωση η οποία επιλύεται. Για παράδειγμα, στην κυματική εξίσωση μια συνήθης τεχνητή συνθήκη είναι η παρεκβολή της λύσης στο σύνορο ($i = NI$) η οποία εκφράζεται ως εξής: $u_{NI} = u_{NI-1}$.

Οι συνθήκες εκφράζονται μαθηματικά με τις ακόλουθες μορφές:

- Συνθήκες "Dirichlet", οι οποίες είναι της μορφής $u = f$.
- Συνθήκες "Neumann", οι οποίες είναι της μορφής $\frac{\partial u}{\partial n} = f$, όπου το n υποδηλώνει κατεύθυνση κάθετη στο σύνορο.
- Συνδυασμός Συνοριακών συνθηκών $\frac{\partial u}{\partial n} + ku = f$, όπως για παράδειγμα $k \frac{\partial T}{\partial n} = \alpha(T - T_w)$ που σχετίζεται με την μεταβολή της θερμοκρασίας σε μία επιφάνεια.

1.8 Τα είδη Σφάλματος στις Υπολογιστικές Προσομοιώσεις

Υπάρχουν αρκετά είδη σφάλματος τα οποία υπεισέρχονται στις υπολογιστικές προσομοιώσεις. Αυτά μπορούν να κατηγοριοποιηθούν με βάση τις «πηγές» από τις οποίες αυτό προέρχεται. Συγκεκριμένα, αυτές είναι:

1. Οι διαφορικές εξισώσεις του πεδίου ροής έχουν πολλές φορές απλοποιήσεις στους όρους τους. Έχουν επίσης προσεγγιστικά μοντέλα που εκφράζουν ορισμένους συντελεστές τους.
2. Ο ορισμός της γεωμετρίας (CAD) αναπαριστά επιφάνειες, σώματα, συστήματα με συγκεκριμένο βαθμό πιστότητας.

3. Οι κλίμακες του πεδίου ροής: ειδικά η τύρβη συνήθως δεν προσομοιώνεται αλλά προσεγγίζεται με ειδικά μοντέλα.
4. Το Αριθμητικό Σφάλμα στην προσέγγιση των παραγώγων των εξισώσεων του πεδίου.

Αν είναι γνωστή η ακριβής λύση του προβλήματος (u_{exact}), τότε το σφάλμα στην αριθμητική λύση (u_{num}) μπορεί να εκφραστεί ως:

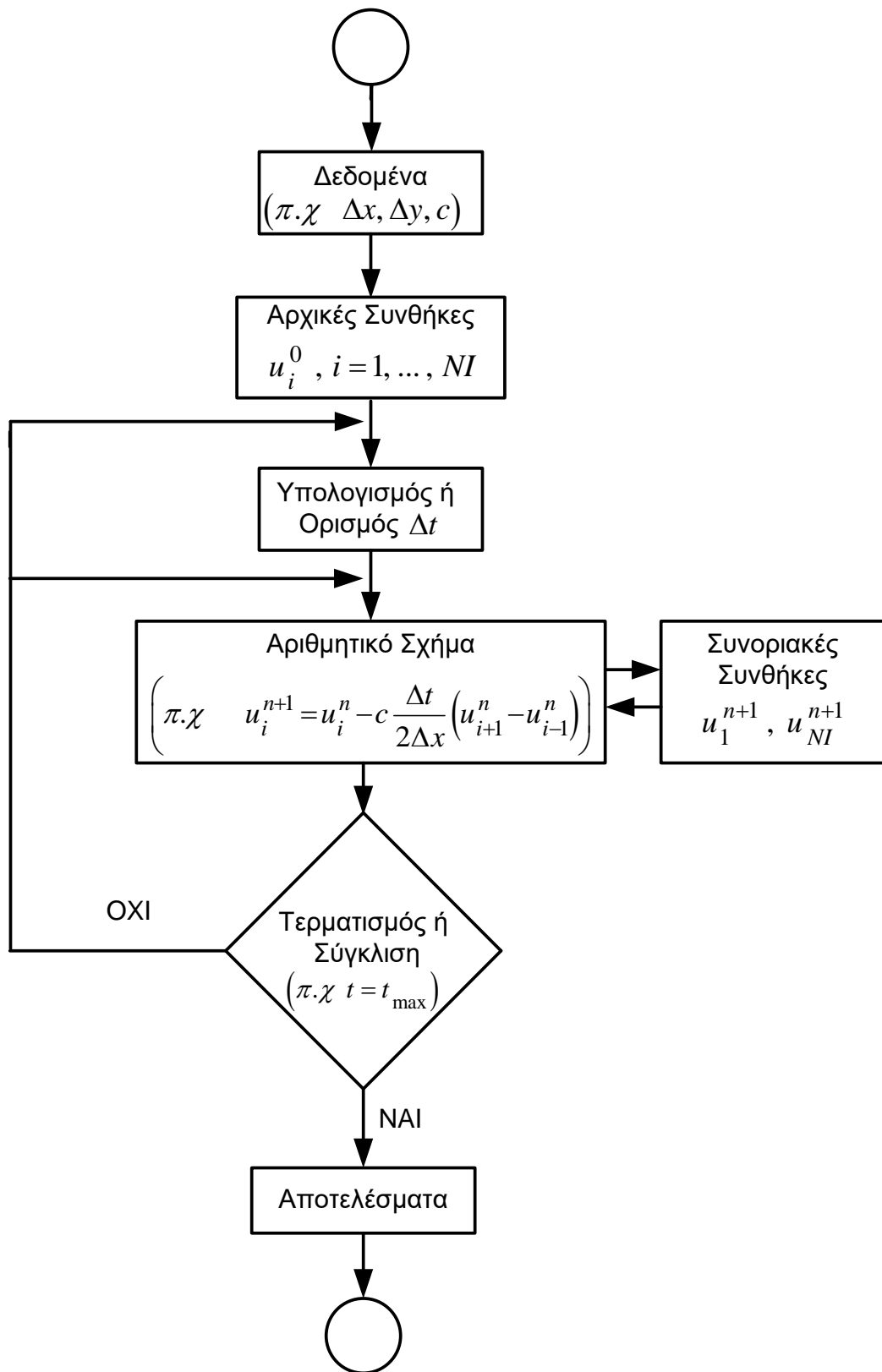
$$Error = |u_{num} - u_{exact}| \quad (1.21)$$

Αν δεν είναι γνωστή η ακριβής λύση, τότε μια εναλλακτική έκφραση του αριθμητικού σφάλματος είναι το σφάλμα αποκοπής (“Truncation Error”).

5. Οι συνοριακές συνθήκες έχουν έναν βαθμό προσέγγισης στην έκφρασή τους καθώς και στην εφαρμογή τους.
6. Η περιορισμένη ακρίβεια των αριθμητικών πράξεων στον υπολογιστή (“Round-off error”).
7. Ο υπολογισμός πρακτικών μεγεθών όπως είναι οι Αεροδυναμικές δυνάμεις εμπεριέχει σφάλμα.
8. Η οπτικοποίηση του πεδίου ροής (“Field Visualization”) χρησιμοποιεί παρεμβολές της λύσης οι οποίες εμπεριέχουν σφάλμα.

1.9 Τυπικό Διάγραμμα Ροής Εφαρμογής Αριθμητικού Σχήματος

Το Σχήμα 1.14 απεικονίζει το διάγραμμα ροής ενός τυπικού κώδικα Υπολογιστικής Ρευστομηχανικής (CFD) .



Σχήμα 1.14 Διάγραμμα ροής κατάστρωσης ενός κώδικα Υπολογιστικής Ρευστομηχανικής.