Διακριτοποίηση Εξίσωσης Μεταφοράς
Μέθοδος Πεπερασμένων Διαφορών

- **Μοντελοποίηση εξίσωσης μεταφοράς σε ασυμπίεστο ρευστό**
- **Ισχύει για μεταφορά μάζας, φ→ συγκέντρωση c, και θερμότητας, φ→ θερμοκρασία T**

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla}\phi = \vec{\nabla} \cdot \left(\alpha \vec{\nabla}\phi\right) + \dot{R} \quad \text{(I)}$$

συσσώρευση συναγωγή διάχυση καθαρή παραγωγή

- **Για διαχυτότητα σταθερή και ανεξάρτητη της θέσης παίρνουμε**

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u\frac{\partial \phi}{\partial x} + v\frac{\partial \phi}{\partial y} + w\frac{\partial \phi}{\partial z} = \alpha \nabla^2 \phi + \dot{R} = \alpha\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2}\right) + \dot{R} \quad \text{(II)}$$

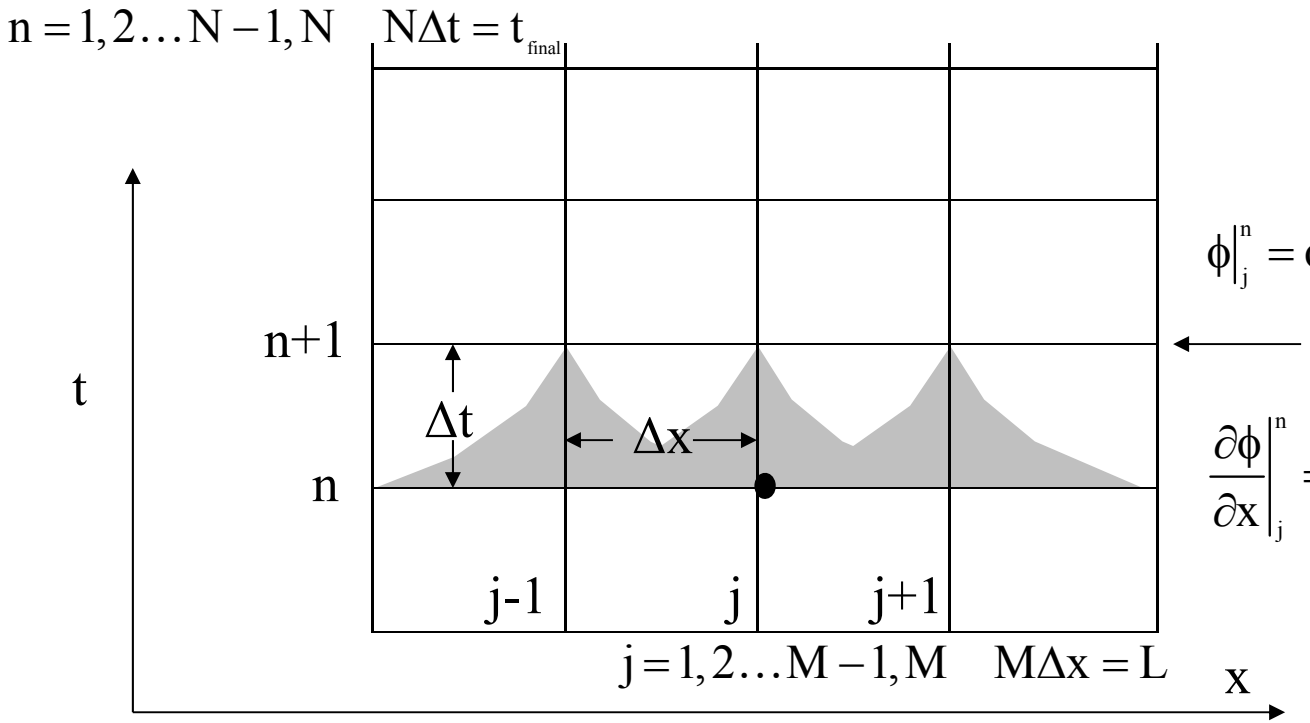
- Μερική Διαφορική Εξίσωση της οποίας επίλυση αναλυτικά δεν είναι εφικτή για τις περισσότερες γεωμετρίες
- Χρειάζεται η αριθμητική επίλυση όπου η λύση δεν είναι διαθέσιμη σε κάθε σημείο αλλά σε ένα σύνολο διακριτών σημείων

- Υπάρχει πληθώρα αριθμητικών μεθόδων για την επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων σαν την εξίσωση μεταφοράς

Πεπερασμένες Διαφορές : Βασίζεται στην προσέγγιση μερικών παραγώγων με χρήση αναπτυγμάτων Taylor - Απλή διαδικασία διακριτοποίησης αλλά προβληματική η επίλυση περίπλοκων γεωμετριών
Πεπερασμένοι Όγκοι : Αναπτύχθηκε πρώτη για την επίλυση απλών προβλημάτων ροής στην ολοκληρωτική μορφή των ισοζυγίων ορμής, θερμότητας & μάζας, που προκύπτει από την αντίστοιχη διαφορική – Είναι ευρέως διαδεμένη λόγω της προγενέστερης χρήσης της σε προβλήματα ροής
Πεπερασμένα Στοιχεία : Ολοκληρωτική προσέγγιση που καταλήγει στην ικανοποίηση της ασθενούς μορφής των διαφορικών εξισώσεων διατήρησης – Η ανάλυση των αγνώστων γίνεται μέσω συναρτήσεων βάσης με τοπική κάλυψη - Ιδανική για προβλήματα ελεύθερων επιφανειών
Συνοριακά Στοιχεία : Επίλυση ολοκληρωτικής μορφής των μερικών διαφορικών εξισώσεων με διακριτοποίηση των συνόρων του πεδίου ορισμού του προβλήματος – Ιδανική μέθοδος για γραμμικά προβλήματα με μη γραμμικές συνοριακές συνθήκες
Φασματικές Μέθοδοι : Βασίζονται στην ανάλυση των αγνώστων σε ιδιοσυναρτήσεις που ορίζονται σε όλο το πεδίο ορισμού του προβλήματος – Ιδανική μέθοδος με ταχύτατη σύγκλιση για προβλήματα με σχετικά ομαλά σύνορα

Η επιλογή της καταλληλότερης μεθόδου εξαρτάται από την φύση του προβλήματος και την σχετική εξοικείωση του χρήστη

Εισαγωγή στις Πεπερασμένες Διαφορές με Χρήση Αναπτυγμάτων Taylor



Υπολογιστικό Πλέγμα

$$\phi\Big|_j^n = \phi_j^n = \phi\left(x_j, t^n\right) = \phi\left(j\Delta x, n\Delta t\right)$$

$$\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_j^n = \frac{\partial\phi}{\partial x}\left(x_j, t^n\right) = \frac{\partial\phi}{\partial x}\left(j\Delta x, n\Delta t\right)$$

- Οι υπολογισμοί γίνονται σε πλεγματικές θέσεις και οι μεταβολές των φυσικών μεγεθών μεταξύ των παραπάνω θέσεων υπολογίζονται προσεγγιστικά με χρήση των αναπτυγμάτων Taylor
- Ανάπτυγμα Taylor με υπόλοιπο για τον υπολογισμό της συνάρτησης φ στην θέση (x0+Δx, y0) με βάση την τιμή στην θέση x0

$$\phi\left(x_0 + \Delta x, y_0\right) = \phi\left(x_o, y_o\right) + \left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_{x_0} \Delta x + \left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_{x_0} \frac{\Delta x^2}{2!} + \cdots \left.\frac{\partial^{n-1}\phi}{\partial x^{n-1}}\right|_{x_0} \frac{\Delta x^{n-1}}{(n-1)!} + \left.\frac{\partial^n\phi}{\partial x^n}\right|_{\xi} \frac{\Delta x^n}{n!} \qquad x_0 \le \xi \le x_0 + \Delta x$$

- Ο όρος υπολοίπου, που εδώ λειτουργεί και ως σφάλμα αποκοπής για τους όρους του αναπτύγματος που εμφανίζονται μετά τον n-1 όρο, μπορεί να αντικατασταθεί με την βοήθεια του συμβολισμού της τάξης μεγέθους $O(\Delta x^n)$
- Ο συμβολισμός $O(\Delta x^n)$ έχει την έννοια ότι για το άθροισμα όλων των όρων του υπολοίπου από τον ν-οστό όρο και μετά υπάρχει K πεπερασμένη θετική σταθερά τέτοια ώστε

$$\left|\left.\frac{\partial^n \phi}{\partial x^n}\right)_\xi \frac{\Delta x^n}{n!}\right| \le K\left|\Delta x\right|^n, \quad \text{καθώς } \Delta x \to 0$$

- Ο συμβολισμός αυτό μπορεί να χρησιμοποιηθεί για το σφάλμα αποκοπής οποιασδήποτε τάξης n ως προς τις μεταβλητές x και y
- Πρέπει να σημειωθεί ότι ο συμβολισμός π.χ. $O(\Delta x)$ δεν μας λέει κάτι για το απόλυτο μέγεθος του σφάλματος αποκοπής αλλά για την τάση που έχει αυτό καθώς το $\Delta x \to 0$ διότι δεν λαμβάνει υπόψη τον συντελεστή που τον πολλαπλασιάζει
  Έτσι αν έχουμε ένα σφάλμα τάξης $O(\Delta x^2)$ αυτό δεν σημαίνει κατ' ανάγκην ότι θα είναι μικρότερο από αυτό της τάξης $O(\Delta x)$ για οποιαδήποτε πλεγματοποίηση
  Σημαίνει ότι από ένα Δx και κάτω το σφάλμα τάξης $O(\Delta x^2)$ θα είναι πράγματι μικρότερο από το $O(\Delta x)$ – Όμως ποιο θα είναι αυτό το κατάλληλα μικρό Δx δεν είναι γνωστό και χρειάζεται διερεύνηση και δοκιμή για να βρεθεί

- Χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα Taylor και κάνοντας χρήση των διακριτών μεταβλητών **j, n,** για συντομία Μπορούμε να παράγουμε πληθώρα προσεγγίσεων των μερικών παραγώγων που εμπλέκονται στα μοντέλα των φαινομένων μεταφοράς που έχουμε παράγει

• Κατάντη διαφορές για την προσέγγιση της τιμής στην θέση $x_0+\Delta x$:

$$(1\alpha)\quad \phi_{j+1}^n = \phi_j^n + \left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_j^n \Delta x + \left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_j^n \frac{\Delta x^2}{2} + \left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_j^n \frac{\Delta x^3}{3!} + \left.\frac{\partial^4\phi}{\partial x^4}\right|_j^n \frac{\Delta x^4}{4!} + O\left(\Delta x^5\right) \xrightarrow{\Delta x\to 0}$$

$$(1\beta)\quad \left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_j^n = \frac{\phi_{j+1}^n - \phi_j^n}{\Delta x} - \left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_j^n \frac{\Delta x}{2} - \left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_j^n \frac{\Delta x^2}{3!} - \left.\frac{\partial^4\phi}{\partial x^4}\right|_j^n \frac{\Delta x^3}{4!} + O\left(\Delta x^4\right)$$

Σχήμα κατάντη διαφορών για την πρώτη παράγωγο

Σφάλμα αποκοπής με ακρίβεια 1ης τάξης

Η ακρίβεια του σχήματος καθορίζεται από τον κυρίαρχο όρο του σφάλματος αποκοπής
Εν προκειμένω πρόκειται για σχήμα ακρίβειας πρώτης τάξης ή $O(\Delta x)$

• Ανάντη διαφορές για την προσέγγιση της τιμής στην προγενέστερη θέση $x_0-\Delta x$
Χρήση Taylor για αρνητικό βήμα $-\Delta x$:

$$(2\alpha)\quad \phi_{j-1}^n = \phi_j^n - \left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_j^n \Delta x + \left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_j^n \frac{\Delta x^2}{2} - \left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_j^n \frac{\Delta x^3}{6} + \left.\frac{\partial^4\phi}{\partial t^4}\right|_j^n \frac{\Delta x^4}{24} + O\left(\Delta x^5\right) \rightarrow$$

$$(2\beta)\quad \left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_j^n = \frac{\phi_j^n - \phi_{j-1}^n}{\Delta x} + \left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_j^n \frac{\Delta x}{2} - \left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_j^n \frac{\Delta x^2}{6} + \left.\frac{\partial^4\phi}{\partial x^4}\right|_j^n \frac{\Delta x^3}{24} + O\left(\Delta x^4\right)$$

Σχήμα ανάντη διαφορών για την πρώτη παράγωγο

Σφάλμα αποκοπής με ακρίβεια 1ης τάξης

- Με βάση το πλεγματικό σημείο j,n και τον ορισμό κάποιας κατεύθυνσης στον χώρο οι όροι ανάντη και κατάντη αφορούν προσέγγιση πλεγματικών σημείων που βρίσκονται προγενέστερα ή μεταγενέστερα, αντίστοιχα, του σημείου βάσης σε σχέση με την εν λόγω κατεύθυνση
- Στα παραπάνω παραδείγματα η κατεύθυνση αυτή είναι η θετική του άξονα των x Σε συγκεκριμένο πρόβλημα η κατεύθυνση αυτή προκύπτει από την φυσική του προβλήματος και θα μπορούσε να είναι αυτή του διανύσματος της ταχύτητας

- Συνδυάζοντας τις 1α και 2α παράγεται σχήμα κεντρικών διαφορών για την πρώτη παράγωγο :

$$\phi_{j-1}^{n} = \phi_{j}^{n} - \left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_{j}^{n} \Delta x + \left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_{j}^{n} \frac{\Delta x^2}{2} - \left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_{j}^{n} \frac{\Delta x^3}{6} + \left.\frac{\partial^4\phi}{\partial t^4}\right|_{j}^{n} \frac{\Delta x^4}{24} + O\left(\Delta x^5\right) \qquad (1\beta)$$

$$\phi_{j+1}^{n} = \phi_{j}^{n} + \left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_{j}^{n} \Delta x + \left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_{j}^{n} \frac{\Delta x^2}{2} + \left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_{j}^{n} \frac{\Delta x^3}{6} + \left.\frac{\partial^4\phi}{\partial t^4}\right|_{j}^{n} \frac{\Delta x^4}{24} + O\left(\Delta x^5\right) \qquad (1\alpha)$$

$$(1\beta) - (1\alpha) \quad \rightarrow \quad \left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_{j}^{n} = \frac{\phi_{j+1}^{n} - \phi_{j-1}^{n}}{2\Delta x} - \left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_{j}^{n} \frac{\Delta x^2}{6} + O\left(\Delta x^4\right) \qquad (3)$$

Σχήμα κεντρικών διαφορών για την πρώτη παράγωγο

Σφάλμα αποκοπής με ακρίβεια 2ης τάξης

• Προσθέτοντας τις 1α και 2α προκύπτει σχήμα κεντρικών διαφορών για την δεύτερη παράγωγο :

$$(1\alpha)+(1\beta) \rightarrow \left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_j^n = \frac{\phi_{j+1}^n - 2\phi_j^n + \phi_{j-1}^n}{\Delta x^2} - \left.\frac{\partial^4\phi}{\partial x^4}\right|_j^n \frac{\Delta x^2}{12} + O\left(\Delta x^4\right) \qquad (4)$$

Σχήμα κεντρικών διαφορών για την δεύτερη παράγωγο

Σφάλμα αποκοπής με ακρίβεια 2ης τάξης

- Συνδυάζοντας αριθμό αναπτυγμάτων με βάση πλεγματικό σημείο j,n είναι δυνατόν να παραχθούν οικογένειες σχημάτων ανάντη, κατάντη και κεντρικών διαφορών αυξανόμενη ακρίβειας
- Υπάρχει πληθώρα σχημάτων διακριτοποίησης και η επιλογή γίνεται με βάση την φυσική του προβλήματος και τις διαθέσιμες υπολογιστικές υποδομές (βέλτιστος συνδυασμός μνήμης και υπολογιστικού χρόνου για την επίτευξη δεδομένης ακρίβειας)
- Π.χ. συνδυάζοντας την 2α με την παρακάτω 5α παράγονται σχήματα ανάντη διαφορών ανώτερης τάξης για την πρώτη παράγωγο

$$(5\alpha) \quad \phi\left(x_0 - 2\Delta x, y_0\right) \equiv \phi_{j-2}^n = \phi_j^n - \left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_j^n 2\Delta x + \left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_j^n \frac{4\Delta x^2}{2} - \left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_j^n \frac{8\Delta x^3}{6} + \left.\frac{\partial^4\phi}{\partial x^4}\right|_j^n \frac{16\Delta x^4}{24} + O\left(\Delta x^5\right)$$

$$(2\alpha) \quad \phi\left(x_0 - \Delta x, y_0\right) \equiv \phi_{j-1}^n = \phi_j^n - \left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_j^n \Delta x + \left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_j^n \frac{\Delta x^2}{2} - \left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_j^n \frac{\Delta x^3}{6} + \left.\frac{\partial^4\phi}{\partial x^4}\right|_j^n \frac{\Delta x^4}{24} + O\left(\Delta x^5\right)$$

- Παίρνοντας γραμμικό συνδυασμό των (2α) και (5α) έτσι ώστε να εξαληφθεί η δεύτερη παράγωγος προκύπτει ανάντη σχήμα για την πρώτη παράγωγο ακρίβειας 2ης τάξης

$$(5\alpha) \rightarrow \phi_{j-2}^{n} = \phi_{j}^{n} - \left.\frac{\partial \phi}{\partial x}\right|_{j}^{n} 2\Delta x + \left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right|_{j}^{n} \frac{4\Delta x^2}{2} - \left.\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right|_{j}^{n} \frac{8\Delta x^3}{6} + \left.\frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}\right|_{j}^{n} \frac{16\Delta x^4}{24} + O\left(\Delta x^5\right) \qquad (6\alpha)$$

$$(2\alpha)\times 4 \rightarrow 4\phi_{j-1}^{n} = 4\phi_{j}^{n} - 4\left.\frac{\partial \phi}{\partial x}\right|_{j}^{n} \Delta x + \left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right|_{j}^{n} \frac{4\Delta x^2}{2} - \left.\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right|_{j}^{n} \frac{4\Delta x^3}{6} + \left.\frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}\right|_{j}^{n} \frac{4\Delta x^4}{24} + O\left(\Delta x^5\right) \qquad (6\beta)$$

$$(6\beta) - (6\alpha) \rightarrow 4\phi_{j-1}^{n} - \phi_{j-2}^{n} - 3\phi_{j}^{n} = -2\Delta x \left.\frac{\partial \phi}{\partial x}\right|_{j}^{n} + \frac{4\Delta x^3}{6} \left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right|_{j}^{n} + O\left(\Delta x^4\right) \rightarrow$$

$$\left.\frac{\partial \phi}{\partial x}\right|_{j}^{n} = \frac{3\phi_{j}^{n} - 4\phi_{j-1}^{n} + \phi_{j-2}^{n}}{2\Delta x} + \frac{\Delta x^2}{3} \left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right|_{j}^{n} + O\left(\Delta x^3\right)$$

- Παίρνοντας γραμμικό συνδυασμό των (2α) και (5α) έτσι ώστε να εξαληφθεί η πρώτη παράγωγος προκύπτει ανάντη σχήμα για την δεύτερη παράγωγο ακρίβειας 1ης τάξης

$$(5\alpha) \rightarrow \phi_{j-2}^{n} = \phi_{j}^{n} - \left.\frac{\partial \phi}{\partial x}\right|_{j}^{n} 2\Delta x + \left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right|_{j}^{n} \frac{4\Delta x^2}{2} - \left.\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right|_{j}^{n} \frac{8\Delta x^3}{6} + \left.\frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}\right|_{j}^{n} \frac{16\Delta x^4}{24} + O\left(\Delta x^5\right) \qquad (7\alpha)$$

$$(2\alpha)\times 2 \rightarrow 2\phi_{j-1}^{n} = 2\phi_{j}^{n} - \left.\frac{\partial \phi}{\partial x}\right|_{j}^{n} 2\Delta x + \left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right|_{j}^{n} \frac{2\Delta x^2}{2} - \left.\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right|_{j}^{n} \frac{2\Delta x^3}{6} + \left.\frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4}\right|_{j}^{n} \frac{2\Delta x^4}{24} + O\left(\Delta x^5\right) \qquad (7\beta)$$

$$2\phi_{j-1}^{n} - \phi_{j-2}^{n} = \phi_{j}^{n} - \left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right|_{j}^{n} \Delta x^2 + \left.\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right|_{j}^{n} \Delta x^3 + O\left(\Delta x^4\right) \rightarrow \left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right|_{j}^{n} = \frac{\phi_{j}^{n} - 2\phi_{j-1}^{n} + \phi_{j-2}^{n}}{\Delta x^2} + \left.\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right|_{j}^{n} \Delta x + O\left(\Delta x^2\right) \qquad (8)$$

- Ανάλογα παίρνοντας γραμμικό συνδυασμό των (2β) και της παρακάτω (5β) έτσι ώστε να εξαληφθεί η δεύτερη παράγωγος προκύπτει κατάντη σχήμα για την πρώτη παράγωγο ακρίβειας 2ης τάξης

$$(5\beta)\quad \phi\left(x_0+2\Delta x, y_0\right)\equiv\phi_{j+2}^n=\phi_j^n+\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_j^n 2\Delta x+\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_j^n\frac{4\Delta x^2}{2}+\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_j^n\frac{8\Delta x^3}{6}+\left.\frac{\partial^4\phi}{\partial t^4}\right|_j^n\frac{16\Delta x^4}{24}+O\left(\Delta x^5\right)$$

$$(2\beta)\quad \phi\left(x_0+\Delta x, y_0\right)\equiv\phi_{j+1}^n=\phi_j^n+\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_j^n \Delta x+\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_j^n\frac{\Delta x^2}{2}+\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_j^n\frac{\Delta x^3}{6}+\left.\frac{\partial^4\phi}{\partial t^4}\right|_j^n\frac{\Delta x^4}{24}+O\left(\Delta x^5\right)$$

$$(2\beta)\times 4\rightarrow 4\phi_{j+1}^n=4\phi_j^n+\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_j^n 4\Delta x+\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_j^n\frac{4\Delta x^2}{2}+\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_j^n\frac{4\Delta x^3}{6}+\left.\frac{\partial^4\phi}{\partial t^4}\right|_j^n\frac{4\Delta x^4}{24}+O\left(\Delta x^5\right)\quad(9\alpha)$$

$$(9\alpha)-(5\beta)\rightarrow 4\phi_{j+1}^n-\phi_{j+2}^n=3\phi_j^n+\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_j^n 2\Delta x-\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_j^n\frac{4\Delta x^3}{6}+O\left(\Delta x^4\right)\rightarrow$$

$$\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_j^n=\frac{4\phi_{j+1}^n-\phi_{j+2}^n-3\phi_j^n}{2\Delta x}+\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_j^n\frac{\Delta x^2}{3}+O\left(\Delta x^3\right)\quad(9\beta)$$

- Ανάλογα παίρνοντας γραμμικό συνδυασμό των (2β) και (5β) έτσι ώστε να εξαληφθεί η πρώτη παράγωγος προκύπτει κατάντη σχήμα για την δεύτερη παράγωγο ακρίβειας 1ης τάξης

$$(5\beta) \rightarrow \phi_{j+2}^{n} = \phi_{j}^{n} + \left.\frac{\partial \phi}{\partial x}\right|_{j}^{n} 2\Delta x + \left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right|_{j}^{n} \frac{4\Delta x^2}{2} + \left.\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right|_{j}^{n} \frac{8\Delta x^3}{6} + \left.\frac{\partial^4 \phi}{\partial t^4}\right|_{j}^{n} \frac{16\Delta x^4}{24} + O\left(\Delta x^5\right) \qquad (10\alpha)$$

$$(2\beta) \times 2 \rightarrow 2\phi_{j+1}^{n} = 2\phi_{j}^{n} + \left.\frac{\partial \phi}{\partial x}\right|_{j}^{n} 2\Delta x + \left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right|_{j}^{n} \frac{2\Delta x^2}{2} + \left.\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right|_{j}^{n} \frac{2\Delta x^3}{6} + \left.\frac{\partial^4 \phi}{\partial t^4}\right|_{j}^{n} \frac{2\Delta x^4}{24} + O\left(\Delta x^5\right) \qquad (10\beta)$$

$$2\phi_{j+1}^{n} - \phi_{j+2}^{n} = \phi_{j}^{n} - \left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right|_{j}^{n} \Delta x^2 - \left.\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right|_{j}^{n} \Delta x^3 + O\left(\Delta x^4\right) \rightarrow \left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right|_{j}^{n} = \frac{\phi_{j}^{n} - 2\phi_{j+1}^{n} + \phi_{j+2}^{n}}{\Delta x^2} - \left.\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right|_{j}^{n} \Delta x + O\left(\Delta x^2\right) \qquad (10)$$

Επίλυση Μονοδιάστατης Εξίσωσης Συναγωγής: Αριθμητικά

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}+u\frac{\partial\phi}{\partial x}=0 \quad \phi(x,t=0)=f(x), \qquad \begin{array}{c}\phi(x=0,t)\\ \text{ή } \phi(x=0,t)=\phi(x=L,t)\end{array}$$

- Συνδυάζοντας τα προηγούμενα αριθμητικά σχήματα για την αριθμητική προσέγγιση της πρώτης παραγώγου ως προς τον χρόνο και τον χώρο μπορούμε να διακριτοποιήσουμε την παραπάνω μερική διαφορική εξίσωση
- Λόγω του διανύσματος της ταχύτητας υπάρχει προτιμητέα κατεύθυνση στον χώρο και έτσι κάνουμε χρήση σχήματος 1ης ανάντη διαφορών στον χώρο
- Για την χρονική διακριτοποίηση εφ'οσον έχουμε πρόβλημα αρχικών τιμών χρησιμοποιούμε κατάντη διαφορές για να υπολογίσουμε την εξέλιξη της άγνωστης συνάρτησης σε επόμενα χρονικά βήματα
- Κάνοντας χρήση της (1β) για την χρονική παράγωγο και της (2β) για την χωρική παράγωγο παίρνουμε το Σχήμα FTBS (Forward in time backward in space)

$$\left.\frac{\partial\phi}{\partial t}\right|_j^n=\frac{\phi_j^{n+1}-\phi_j^n}{\Delta t}-\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}\right|_j^n\frac{\Delta t}{2}-\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial t^3}\right|_j^n\frac{\Delta t^2}{3!}-\left.\frac{\partial^4\phi}{\partial t^4}\right|_j^n\frac{\Delta t^3}{4!}+O\left(\Delta t^4\right) \qquad (11\alpha)$$

$$\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_j^n=\frac{\phi_j^n-\phi_{j-1}^n}{\Delta x}+\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_j^n\frac{\Delta x}{2}-\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_j^n\frac{\Delta x^2}{6}+\left.\frac{\partial^4\phi}{\partial x^4}\right|_j^n\frac{\Delta x^3}{24}+O\left(\Delta x^4\right) \qquad (11\beta)$$

- Συνδυάζοντας τις δύο τελευταίες σχέσεις παίρνουμε το παραπάνω αριθμητικό σχήμα:

Πρώτη τροποποιημένη εξίσωση

Σφάλμα αποκοπής

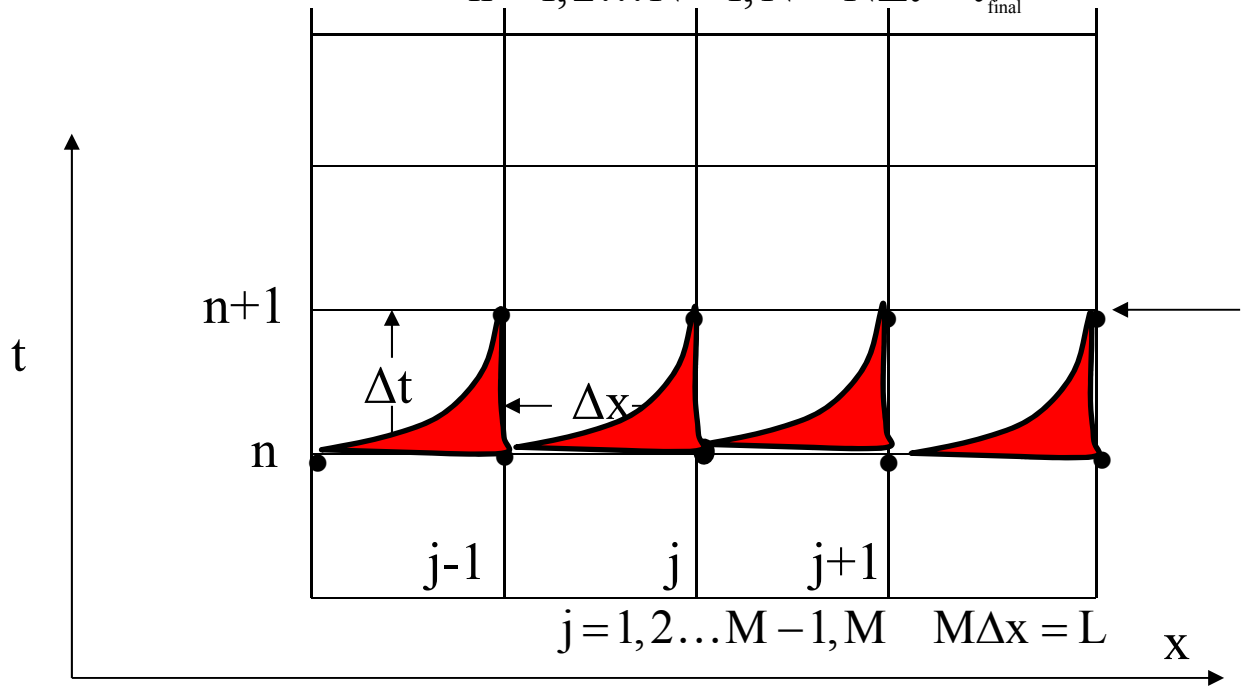
$$(11\alpha)+u(11\beta)\rightarrow \left.\frac{\partial\phi}{\partial t}\right|_j^n+u\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_j^n=-\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}\right|_j^n\frac{\Delta t}{2}-\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial t^3}\right|_j^n\frac{\Delta t^2}{3!}+O\left(\Delta t^3\right)+\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_j^n\frac{u\Delta x}{2}-\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_j^n\frac{u\Delta x^2}{6}+O\left(\Delta x^3\right)+$$

$$=0$$

$$+\frac{\phi_j^{n+1}-\phi_j^n}{\Delta t}+u\frac{\phi_j^n-\phi_{j-1}^n}{\Delta x}=0 \longrightarrow \text{Αριθμητικό σχήμα}$$

Μερική διαφορική εξίσωση

$$n=1,2\ldots N-1,N \qquad N\Delta t=t_{final}$$



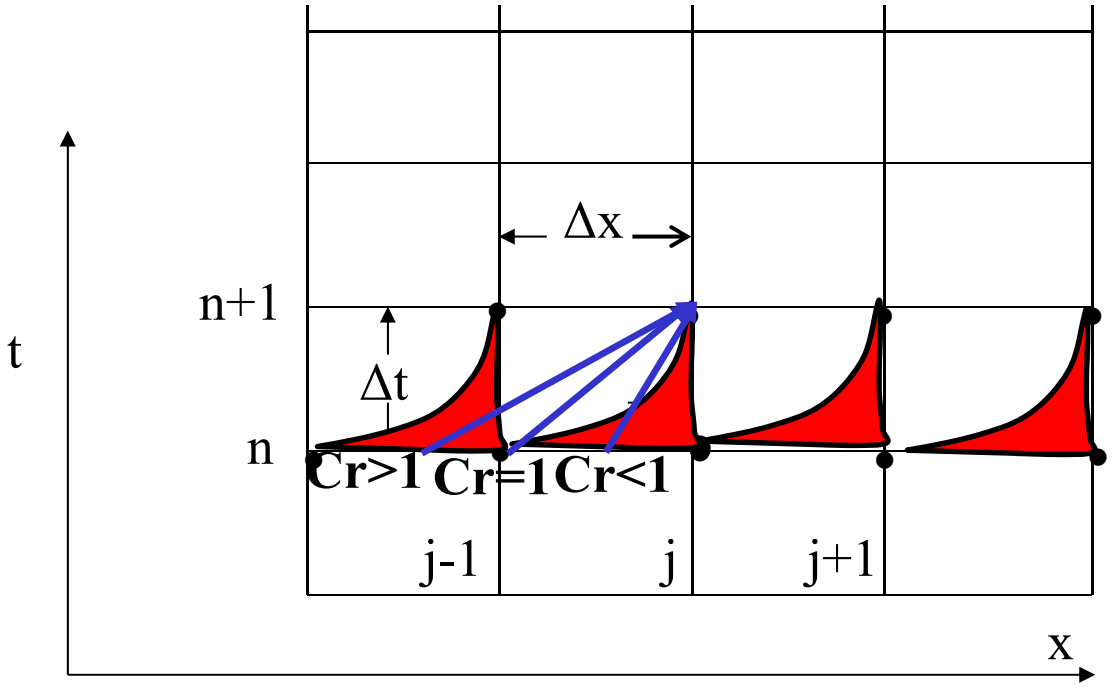
$$j=1,2\ldots M-1,M \qquad M\Delta x=L$$

Σχηματική Αναπαράσταση Αριθμητικού Σχήματος

- Το αριθμητικό σχήμα αυτό έχει τις παρακάτω ιδιότητες
- Είναι συνεπές υπό την έννοια ότι καθώς $\Delta t, \Delta x \to 0$ το Σφάλμα Αποκοπής τείνει να μηδενισθεί και το αριθμητικό σχήμα τείνει στην Μερική Διαφορική Εξίσωση της οποίας την λύση προσπαθούμε να βρούμε
- Έχει ακρίβεια 1ης τάξης μια και το σφάλμα αποκοπής είναι πρώτης τάξης ως προς τον χώρο και τον χρόνο
- Η μερική διαφορική εξίσωση που προκύπτει μετά την απαλοιφή του αριθμητικού σχήματος λέγεται 1η Τροποποιημένη και όταν υλοποιούμε το εν λόγω αριθμητικό σχήμα είναι σαν να λύνουμε την 1η Τροποποιημένη αντί της αρχικής Μερικής Διαφορικής Εξίσωσης
- **Συμπεριφορά Αριθμητικού Σχήματος**

$$\frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} + u\frac{\phi_j^n - \phi_{j-1}^n}{\Delta x} = 0 \to \phi_j^{n+1} = \phi_j^n\left(1 - Cr\right) + \phi_{j-1}^n Cr, \qquad Cr \equiv \frac{u\Delta t}{\Delta x}$$

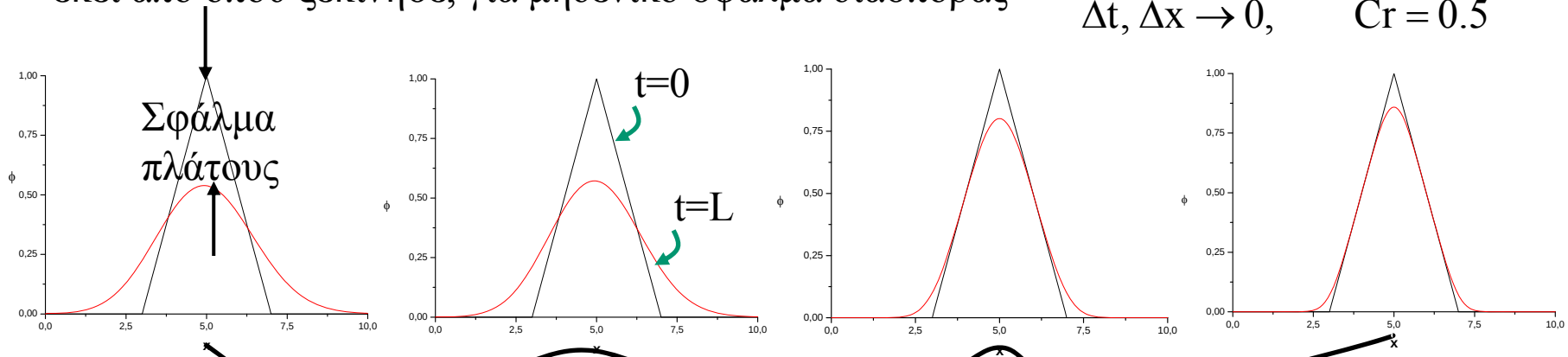
- Η τιμή της άγνωστης συνάρτησης είναι ένας γραμμικός συνδυασμός μεταξύ των τιμών της προηγούμενης χρονικής τιμής στην ίδια καθώς και στην προηγούμενη θέση
- Όταν Cr=1 τότε $\phi_j^{n+1} = \phi_{j-1}^n$ και η λύση διαδίδεται με την ταχύτητα που προβλέπεται αναλυτικά



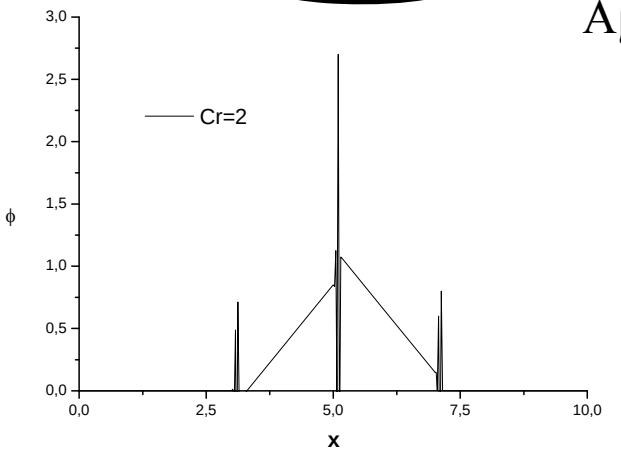
- Όταν Cr<1 η τιμή της φ στην καινούργια χρονική στιγμή είναι παρεμβολή μεταξύ της φ_j και φ_{j-1} και η αριθμητική ταχύτητα μεταφοράς Δx/Δt μεγαλύτερη της πραγματικής, u
- Όταν είναι Cr=1 η νέα τιμή στην θέση j είναι η παλιά τιμή στην θέση j-1 και η αριθμητική ταχύτητα μεταφοράς Δx/Δt είναι ίδια με την πραγματική u
- Όταν Cr<1 η τιμή της φ στην καινούργια χρονική στιγμή είναι γραμμική προεκβολή πέραν της παλιάς τιμής φ_{j-1} και η αριθμητική ταχύτητα μεταφοράς Δx/Δt μικρότερη της πραγματικής, u

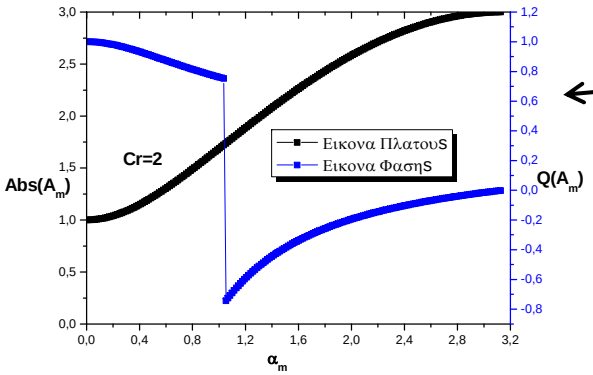
- Διαδικασία σύγκλισης για Cr=0.5 καθώς Δt, Δx→0, για συνάρτηση με αρχικό οδοντωτό σχήμα, περιοδικές συνθήκες στο διάστημα x=0,L και ταχύτητα διάδοσης u
- Κατά την χρονική στιγμή t=L η μορφή του κύματος θα πρέπει είναι ίδια με την αρχική, μηδενικό σφάλμα πλάτους για εξίσωση συναγωγής, και να έχει επανέλθει εκεί από όπου ξεκίνησε, για μηδενικό σφάλμα διασποράς

$\Delta t, \Delta x \to 0, \qquad Cr = 0.5$



Αμελητέο Σφάλμα Διασποράς





- Συμπεριφορά της φ(t+Δt)/φ(t)
- Παρουσιάζεται αναλυτικά στην ανάλυση κατά von Neuman

- Ασταθής ανάπτυξη της λύσης για Cr=2 με κυρίαρχη εμφάνιση μικρών μηκών κύματος, ~2Δx, μετά από όχι πολύ μεγάλο αριθμό χρονικών βημάτων
- Δεν είναι εγγενής συμπεριφορά της εξίσωσης συναγωγής αλλά αποτέλεσμα αριθμητικού σφάλματος

Παραγωγή 2ης Τροποποιημένης Εξίσωσης

$$\left.\frac{\partial\phi}{\partial t}\right|_j^n + u\left.\frac{\partial\phi}{\partial t}\right|_j^n = -\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}\right|_j^n \frac{\Delta t}{2} - \left.\frac{\partial^3\phi}{\partial t^3}\right|_j^n \frac{\Delta t^2}{3!} + O\left(\Delta t^3\right) + \left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_j^n \frac{u\Delta x}{2} - \left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_j^n \frac{u\Delta x^2}{6} + O\left(\Delta x^3\right) +$$

1η Τροποποιημένη ΜΔΕ

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right) = \frac{\partial}{\partial t}\left(-u\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) = -u\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right) = -u\frac{\partial}{\partial x}\left(-u\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) = u^2\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial^3\phi}{\partial t^3} = \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}\right) = \frac{\partial}{\partial t}\left(u^2\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right) = u^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right) = u^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(-u\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) = -u^3\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}$$

- Μετασχηματίζουμε τους κυρίαρχους όρους λάθους ως προς τον χρόνο στο Σφάλμα Αποκοπής (ΣΑ) με την βοήθεια παραγώγων ως προς τον χώρο και με χρήση της Μερικής Διαφορικής Εξίσωσης ή της 1ης Τροποποιημένης Εξίσωσης
- Αντικαθιστούμε στην 1η Τροποποιημένη Εξίσωση
- Αναπτύσσουμε τους όρους του ΣΑ που θα εξάγουμε, κατ' αύξουσα τάξη χωρικής παραγώγισης μέχρι μία τάξη παραγώγου, συνήθως μέχρι 3η ή 4η παράγωγο
- Εξετάζουμε το πρόσημο του συντελεστή της δεύτερης χωρικής παραγώγου, και γενικά των παραγώγων άρτιας τάξης, για την τευτοποίηση σφάλματος τύπου διάχυσης που αφορά το πλάτος, και τον συντελεστή των περιττής τάξης παραγώγων για την ταυτοποίηση σφάλματος διασποράς που αφορά την φάση της αριθμητικής λύσης

$$\left.\frac{\partial\phi}{\partial t}\right|_j^n + u\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_j^n = -\frac{\Delta t\, u^2}{2}\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_j^n + \frac{u^3\Delta t^2}{6}\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_j^n + \left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_j^n \frac{u\Delta x}{2} - \left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_j^n \frac{u\Delta x^2}{6} + O\left(\Delta t^3 + \Delta x^3\right) \Rightarrow$$

2η Τροποποιημένη ΜΔΕ

$$\left.\frac{\partial\phi}{\partial t}\right|_j^n + u\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_j^n = \left(\frac{u\Delta x}{2} - \frac{\Delta t\, u^2}{2}\right)\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_j^n + \left(\frac{u^3\Delta t^2}{6} - \frac{u\Delta x^2}{6}\right)\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_j^n + O\left(\Delta t^3 + \Delta x^3\right)$$

Σφάλμα Πλάτους

Σφάλμα Φάσης

Συντελεστής 2ης παραγώγου ρυθμίζει το πλάτους της αριθμητικής λύσης (σφάλμα λόγω διάχυσης) Ευστάθεια κατά Hirt

$$\frac{u\Delta x}{2} - \frac{\Delta t\, u^2}{2} = \frac{u\Delta x}{2}\left(1 - Cr\right)\begin{cases} > 0 & \text{Διάχυση και ευστάθεια} \\ < 0 & \text{Ενίσχυση και αστάθεια} \end{cases}$$

Κριτήριο Ευστάθειας : Cr<1

Αρνητικός συντελεστής 2ης παραγώγου δείχνει ότι το αριθμητικό σχήμα εισάγει αντιδιάχυση στην επίλυση, κάτι που οδηγεί σε όξυνση τυχόν διαταραχών και σε αστάθεια της αριθμητικής επίλυσης και εξηγεί την ασταθή συμπεριφορά του σχήματος στην αριθμητική του υλοποίηση

3η παράγωγος ρυθμίζει την φάση της αριθμητικής λύσης και το σφάλμα λόγω διασποράς

Εναλλακτικά ο υπολογισμός των χρονικών παραγώγων μέσω των χωρικών μπορεί να γίνει με χρήση της 1ης Τροποποιημένης αντί της αρχικής Μερικής Διαφορικής Εξίσωσης

	$\frac{\partial}{\partial t}$	$\frac{\partial}{\partial x}$	$\frac{\partial^2}{\partial t^2}$	$\frac{\partial^2}{\partial x \partial t}$	$\frac{\partial^2}{\partial x^2}$	$\frac{\partial^3}{\partial t^3}$	$\frac{\partial^3}{\partial t^2 \partial x}$	$\frac{\partial^3}{\partial t \partial x^2}$	$\frac{\partial^3}{\partial x^3}$	$\frac{\partial^4}{\partial t^4}$	$\frac{\partial^4}{\partial t^3 \partial x}$	....	
	1	u	$\frac{\Delta t}{2}$		$-\frac{u\Delta x}{2}$	$\frac{\Delta t^2}{6}$			$\frac{u\Delta x^2}{6}$	$\frac{\Delta t^3}{24}$			=0
$-\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial}{\partial t}$			$-\frac{\Delta t}{2}$	$-\frac{u\Delta t}{2}$		$-\frac{\Delta t^2}{4}$		$\frac{u\Delta x\Delta t}{4}$		$-\frac{\Delta t^3}{12}$			=0
$\frac{u\Delta t}{2}\frac{\partial}{\partial x}$				$\frac{u\Delta t}{2}$	$\frac{u^2\Delta t}{2}$		$\frac{u\Delta t^2}{4}$		$-\frac{u^2\Delta x\Delta t}{4}$		$\frac{u\Delta t^3}{12}$		=0
$\frac{\Delta t^2}{12}\frac{\partial^2}{\partial t^2}$						$\frac{\Delta t^2}{12}$	$\frac{u\Delta t^2}{12}$			$\frac{\Delta t^3}{24}$		...	=0
$-\frac{u\Delta t^2}{3}\frac{\partial^2}{\partial x \partial t}$							$\frac{-u\Delta t^2}{3}$	$\frac{-u^2\Delta t^2}{3}$			$\frac{-u\Delta t^3}{6}$		
$\left(\frac{u^2\Delta t^2}{3}-\frac{u\Delta x\Delta t}{4}\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}$							$\frac{u^2\Delta t^2}{3}$	$-\frac{u\Delta x\Delta t}{4}$	$\frac{u^3\Delta t^2}{3}$	$-\frac{u^2\Delta x\Delta t}{4}$			
	1	u			$\frac{u^2\Delta t}{2}$	$-\frac{u\Delta x}{2}$		$\frac{u\Delta x^2}{6}$	$+\frac{u^3\Delta t^2}{3}$	$-\frac{u^2\Delta x\Delta t}{2}$			=0

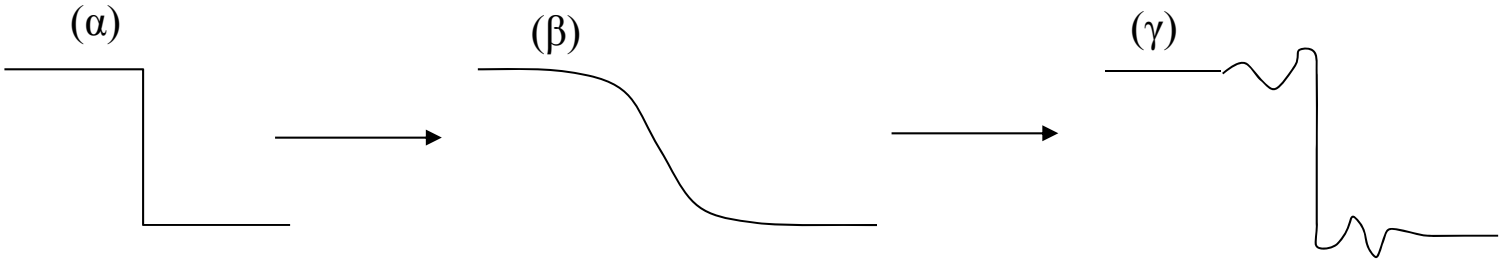
- Προσθέτοντας κατά μέλη τους συντελεστές ομοειδών παραγώγων και
- Μεταφέροντας τους όρους που προκύπτουν από το σφάλμα αποκοπής στο δεξιό μέλος ανακτούμε την 2η τροποποιημένη εξίσωση

2η Τροποποιημένη εξίσωση όπως παρέχεται με αντικατάσταση των των χρονικών παραγώγων από αντίστοιχες χωρικές με χρήση της 1ης Τροποποιημένης

$$\left.\frac{\partial\phi}{\partial t}\right|_j^n + u\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_j^n = \left(\frac{u\Delta x}{2} - \frac{\Delta t\, u^2}{2}\right)\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_j^n + \left(\frac{u^2\Delta x\Delta t}{2} - \frac{u^3\Delta t^2}{2} - \frac{u\Delta x^2}{6}\right)\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_j^n + O\left(\Delta t^3 + \Delta x^3\right)$$

- Ο συντελεστής της 2ης παραγώγου είναι ίδιος και παρέχει το ίδιο κριτήριο ευστάθειας Cr<1 σχετικά με την εξέλιξη του πλάτους καθώς αυξάνει ο αριθμός των χρονικών βημάτων
- Ο συντελεστής της 3ης παραγώγου που δίνει το σφάλμα διασποράς διαφέρει
- Οι δύο παραπάνω μεθοδολογίες αποτελούν ευριστικές διαδικασίες για την ανάλυση ευστάθειας του αριθμητικού σχήματος και την πρόβλεψη της συμπεριφοράς του μετά από μεγάλο αριθμό χρονικών βημάτων
- Πιό συστηματική διαδικασία παρέχεται από την ανάλυση κατά von-Neuman που ακολουθεί στα επόμενα

Επίδραση αριθμητικού σφάλματος λόγω διάχυσης και διασποράς



Ακριβής λύση

Αριθμητική λύση παραμορφωμένη κυρίως λόγω διάχυσης

Αριθμητική λύση παραμορφωμένη κυρίως λόγω διασποράς

Επίλυση Μονοδιάστατης Εξίσωσης Συναγωγής: Αναλυτικά

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}+u\frac{\partial\phi}{\partial x}=0 \quad \phi(x,t=0)=f(x), \qquad \phi(x=0,t) \text{ ή } \phi(x=0,t)=\phi(x=L,t)$$

$$\phi_t+u\phi_x=0\rightarrow(1,u)\cdot(\phi_x,\phi_y)=\frac{\partial\phi}{\partial t}\frac{dt}{ds}+\frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{dx}{ds}=\frac{d\phi}{ds}=0\rightarrow\vec{a}\cdot\vec{\nabla}\phi=0 \qquad \vec{a}=(1,u)=\hat{t}+u\hat{x}$$

$\hat{t},\hat{x}$, μοναδιαία στην t και x κατεύθυνση αντιστοίχως

d/ds παραγώγιση στην **χαρακτηριστική κατεύθυνση** $\vec{a}$

$$\vec{a}: \quad \frac{dt}{dx}=\frac{1}{u}\rightarrow t=\frac{x}{u}+c\rightarrow x-tu=-c\equiv\xi, \quad \xi=\sigma\tau\alpha\theta\varepsilon\rho\acute{o}\rightarrow$$ χαρακτηριστική καμπύλη

Έστω μετασχηματισμός (t,x)→(s,ξ), ώστε $\hat{s}//\vec{a} \quad (\hat{\xi}\perp\vec{a})$

Μετασχηματισμός στροφής κατά γωνία $\theta=\arctan(\sqrt{1+u^2})$

$$\begin{pmatrix}s\\ \xi\end{pmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 1/u\\ -u & 1\end{bmatrix}\begin{pmatrix}t\\ x\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}t+x/u\\ -tu+x\end{pmatrix}$$

Κανόνας αλυσίδας

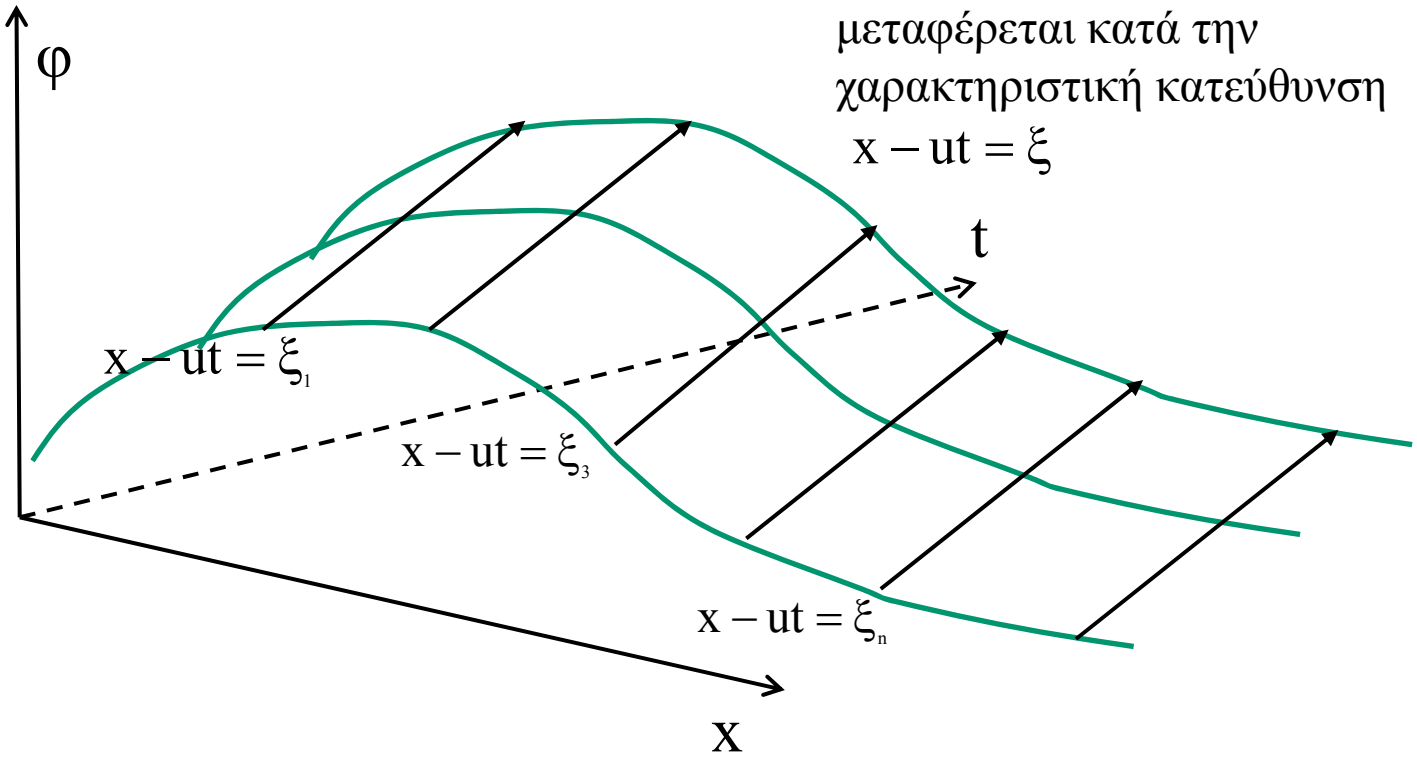
$$\frac{\partial\phi}{\partial t}=\frac{\partial\phi}{\partial s}\frac{\partial s}{\partial t}+\frac{\partial\phi}{\partial\xi}\frac{\partial\xi}{\partial t} \quad (a)$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial x}=\frac{\partial\phi}{\partial s}\frac{\partial s}{\partial x}+\frac{\partial\phi}{\partial\xi}\frac{\partial\xi}{\partial x} \quad (b)$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}+u\frac{\partial\phi}{\partial x}=0\xrightarrow{(\alpha),(\beta)}\left.\frac{\partial\phi}{\partial s}\right|_{\xi}=0\rightarrow\phi=\phi(\xi)$$

$\rightarrow\phi=\phi(x-ut)=f(x-ut)$: Η λύση σε οποιαδήποτε θέση (x,t) προκύπτει από την $f(x_0)$ όπου $x_0=\xi=x-ut$

Η λύση αποτελεί κύμα που μεταφέρεται κατά την χαρακτηριστική κατεύθυνση $x - ut = \xi$



Η κυματική εξίσωση 2ης τάξης έχει μία επί πλέον χαρακτηριστική καμπύλη

c: Ταχύτητα Κύματος

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0 \qquad \begin{array}{l} x - ct = \xi \\ x + ct = \eta \end{array}$$

Επίλυση Κυματικής με Αναπτύγματα Ιδιοσυναρτήσεων

Κυματική Εξίσωση με περιοδικές συνοριακές συνθήκες:

$$\frac{\partial\phi^2}{\partial t^2} - c^2\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} = 0 \quad \phi(t,x) = T(t)X(x) \rightarrow \frac{\dot{T}}{c^2T} = \frac{X''}{X} = -\lambda \rightarrow \begin{cases} X'' + \lambda X = 0 \\ \ddot{T} + \lambda c^2 T = 0 \end{cases}$$

$$\phi\left(x=0,t\right) = \phi\left(x=L,t\right), \quad \phi\left(x,t=0\right) = f(x), \quad \frac{\partial\phi}{\partial x}\left(x,t=0\right) = g(x)$$

$\lambda_m = k^2_m \geq 0$ δίνει ιδιοτιμές στην x διεύθυνση και τις αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις

$$\rightarrow \quad X_m = A_m e^{ik_m x} + B_m e^{-ik_m x} \qquad k_m = \frac{2\pi m}{L} \geq 0$$

$$\rightarrow \quad T_m = C_m e^{i\omega_m t} + D_m e^{-i\omega_m t} \qquad \omega_m = k_m c$$

$$\phi(t,x) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} E_m e^{i(k_m x - \omega_m t)} + F_m e^{i(k_m x + \omega_m t)} \qquad \omega_m = ck_m \longleftarrow$$

Σχέση διασποράς για την συναγωγή

- Οι Em και Fm αποτελούν συνδυασμό των αρχικών σταθερών Am, Bm, Cm, Dm, και των συζυγών τους και υπολογίζονται με βάση τις δύο αρχικές συνθήκες, ενώ η περιοδικότητα είναι ενσωματωμένη στις ημιτονοειδείς ιδιοσυναρτήσεις
- Οι δύο παραπάνω λύσεις που περιέχονται στην απειροσειρά αντιπροσωπεύουν κύματα που διαδίδονται στις δύο χαρακτηριστικές διευθύνσεις της κυματικής εξίσωσης

  Ένα που διαδίδεται προς τα δεξιά πάνω στην ευθεία $k_m x - \omega_m t$=Σταθερά και

  Ένα που διαδίδεται προς τα αριστερά πάνω στην ευθεία $k_m x + \omega_m t$=Σταθερά

- Εναλλακτικά, και για οποιοδήποτε γραμμικό πρόβλημα σε καρτεσιανή γεωμετρία, μπορούμε εξ'αρχής να υποθέσουμε μία λύση εκθετικής μορφής όπως παρακάτω και να τη αντικαταστήσουμε στην μερική διαφορική εξίσωση προκειμένου να βρούμε την σχέση διασποράς, $\omega_m=\omega_m(k_m)$

$$\phi_m(x,t) \sim e^{i(k_m x-\omega_m t)} \quad k_m = \frac{2\pi m}{L} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

- Για παράδειγμα αντικαθιστώντας στην κυματική παίρνουμε

$$e^{i(k_m x-\omega_m t)}\left[\left(-i\omega_m\right)^2 - c^2\left(ik_m\right)^2\right] = 0 \rightarrow -\omega_m^2 + \left(k_m c\right)^2 = 0 \rightarrow \omega_m = \pm k_m c$$

- Ανακτώντας έτσι την σχέση διασποράς, $\omega_m=\pm ck_m$, και για τα δύο διαδιδόμενα κύματα καθώς και την λύση με την μορφή δύο απειροσειρών για κάθε μία από της λύσεις της σχέσης διασποράς
- Η σχέση διασποράς περιέχει πληροφορία για την φύση του προβλήματος που επιλύουμε καθώς και για την εξέλιξή του με τον χρόνο και αναλόγως της μορφής του ω, πραγματικός ή θετικός/αρνητικός φανταστικός αριθμός μπορούμε να μιλάμε για πρόβλημα διάδοσης κύματος, για διάχυση, για ευστάθεια, αστάθεια κτλπ
- Την αριθμητική σχέση διασποράς θα αναζητήσουμε και για τα αριθμητικά σχήματα που θα χρησιμοποιήσουμε προκειμένου να προβλέψουμε την ευστάθειά τους στην χρονική ολοκλήρωση

Χρησιμοποιώντας την ίδια προσέγγιση για την κυματική εξίσωση 1ης τάξης έχουμε

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}+u\frac{\partial\phi}{\partial x}=0\xrightarrow{\phi_m(x,t)\sim e^{i(k_m x-\omega_m t)}}e^{i(k_m x-\omega_m t)}\left(-i\omega_m+iuk_m\right)=0\rightarrow\omega_m=uk_m$$

Ανακτώντας έτσι το κύμα που διαδίδεται προς τα δεξιά με σχέση διασποράς $\omega_m=ck_m$
Η συνολική λύση δίδεται πάλι από έναν γραμμικό συνδυασμό όλων των κυματομορφών $\varphi_m(x,t)$

$$\phi(t,x)=\sum_{m=-\infty}^{+\infty}\phi_m\left(x,t\right)=\sum_{m=-\infty}^{+\infty}C_m e^{i(k_m x-\omega_m t)}\qquad\omega_m=ck_m$$

Η επίδραση της σχέσης διασποράς φαίνεται και στην συνάρτηση απόκρισης κάθε μιας από τις κυματομορφές

$$R_m\left(x,t\right)=\frac{\phi_m\left(x,t+\Delta t\right)}{\phi_m\left(x,t\right)}=\frac{e^{i(k_m x-\omega_m t-\omega_m\Delta t)}}{e^{i(k_m x-\omega_m t)}}=e^{-i\omega_m\Delta t}=e^{-is_m}$$

$$\xrightarrow[\omega_m=uk_m]{\text{Σχέση Διασποράς}}R_m\left(x,t\right)=e^{-iuk_m\Delta t}=e^{-iuk_m\Delta x\Delta t/\Delta x}\xrightarrow[a_m=k_m\Delta x]{Cr=\frac{u\Delta t}{\Delta x}}$$

$$R_m\left(x,t\right)=e^{-ia_m Cr}\qquad a_m=k_m\Delta x,\ s_m=\omega_m\Delta t$$

Η μορφή αυτή της συνάρτησης απόκρισης ισχύει για κάθε γραμμικό πρόβλημα και η σχέση διασποράς καθορίζει το κατά πόσον η πάροδος του χρόνου επηρεάζει το πλάτος ή την φάση της κυματομορφής ή και τα δύο

- Τα a_m και s_m αποτελούν αριθμητική εκδοχή του κυματαριθμού και της ιδιοσυχνότητας και χρησιμοποιούνται ευρέως στην ανάλυση ευστάθειας αριθμητικών σχημάτων
- Η ιδιοσυχνότητα ω_m και το αριθμητικό της ανάλογο s_m είναι εν γένει μιγαδικοί αριθμοί των οποίων το μιγαδικό μέρος παρέχει πληροφορία για την χρονική εξέλιξη του φαινομένου
- Το πλάτος και η φάση της συνάρτησης απόκρισης παρέχουν τις ίδιες πληροφορίες για την συμπεριφορά της επίλυσης της μερικής διαφορικής εξίσωσης και στην ουσία ανακτούν την σχέση διασποράς

- Η συνάρτηση απόκρισης R_m είναι επίσης εν γένει μιγαδικός αριθμός και για την ανάλυσή της ορίζουμε την εικόνα πλάτους, που είναι το μέτρο της R_m, και την εικόνα φάσης, που είναι ο λόγος του ορίσματός της προς το όρισμα της συνάρτησης απόκρισης της εξίσωσης συναγωγής $Cr\ a_m$

Εικόνα Πλάτους : $\left|R_m\right| = \left|e^{-i\omega_m \Delta t}\right| = \left|e^{\omega_{m,i}\Delta t} e^{-i\omega_{m,r}\Delta t}\right| = e^{\omega_{m,i}\Delta t} = e^{s_{m,i}}$

$$\omega_m = \omega_{m,r} + i\omega_{m,i}$$
$$s_m = s_{m,r} + is_{m,i}$$

- Για την εξίσωση συναγωγής η εικόνα πλάτους είναι 1 αφού το ω_m είναι πραγματικός αριθμός και συνεπώς $\omega_{m,i}=0$
- Προκειμένου να αποφευχθεί η συνεχής αύξηση του πλάτους της φ_m και ο απειρισμός της λύσης θέλουμε η εικόνα πλάτους να είναι ≤ 1 ή αλλιώς θέλουμε $s_{m,i}<0$

Εικόνα Φάσης : $Q_R\left(a_m\right) = \dfrac{-\arg\left(R_m\right)}{a_m Cr} = \dfrac{-\arctan\left(\dfrac{\mathrm{Im}\left(R_m\right)}{\mathrm{Re}\left(R_m\right)}\right)}{a_m Cr} = \dfrac{\omega_{m,r}\Delta t}{a_m Cr} = \dfrac{s_{m,r}}{a_m Cr}$

- Για την εξίσωση συναγωγής η εικόνα φάσης είναι 1 αφού σύμφωνα με την σχέση διασποράς $\omega_m=\omega_{m,r}=uk_m$ και συνεπώς $\omega_{m,r}\Delta t=s_m=a_m Cr$ και τελικά $Q_m=1$
- Η εικόνα πλάτους και η εικόνα φάσης χρησιμοποιούνται εκτενώς για την ανάλυση αριθμητικών σχημάτων και από τα παραπάνω καθίσταται ασαφές ότι στην ουσία η αριθμητική ανάλυση ευστάθειας είναι μία προσπάθεια να βρεθεί η σχέση διασποράς του αριθμητικού σχήματος
- Μάλιστα η ανάλυση αυτή αφορά κάθε μία από τις κυματομορφές που εμπλέκονται στην περιγραφή της λύσης με την μορφή της απειροσειράς

Ανάλυση Ευστάθειας Αριθμητικού Σχήματος κατά von Neumann

Για την μελέτη ευστάθειας ενός αριθμητικού σχήματος λαμβάνουμε υπόψη τα εξής:

Ακριβής Λύση ΜΔΕ, φ, - Ακριβής Λύση ΑΣ, φ_A, = Σφάλμα Αποκοπής (ΣΑ)

Υπολογιστική Λύση ΑΣ, φ_{num} - Ακριβής Λύση ΑΣ, φ_A, = Υπολογιστικό Λάθος, ε

- Η αριθμητική λύση, φ_A, καθώς και το αριθμητικό λάθος, ε, ικανοποιούν την ίδια γραμμική εξίσωση διαφορών (αριθμητικό σχήμα) που προκύπτει από την διακριτοποίηση γραμμικών μερικών διαφορικών εξισώσεων
- Μάλιστα για μεγάλο αριθμό κόμβων στο πλέγμα μπορούν να περιγραφούν από απειροσειρές της ίδιας μορφής που χαρακτηηρίζονται από την ίδια συνάρτηση απόκρισης

$$\phi(t,x) = \sum_{m=-M/2}^{+M/2} \phi_m(x,t) = \sum_{m=-M/2}^{+M/2} \zeta_m e^{i(k_m x - \omega_m t)} = \sum_{m=-M/2}^{+M/2} \zeta_m e^{i(k_m j\Delta x - \omega_m n\Delta t)} = \sum_{m=-M/2}^{+M/2} \xi_m^n e^{ia_m j}$$

$$\varepsilon(t,x) = \sum_{m=-M/2}^{+M/2} \varepsilon_m(x,t) = \sum_{m=-M/2}^{+M/2} c_m e^{i(k_m x - \omega_m t)} = \sum_{m=-M/2}^{+M/2} c_m e^{i(k_m j\Delta x - \omega_m n\Delta t)} = \sum_{m=-M/2}^{+M/2} d_m^n e^{ia_m j}$$

Για πλήρη σειρά Fourier $k_m=2m\pi/L$, $m=\pm 0, \pm 1, \pm 2 \ldots\ldots \pm \infty$, όπου L το διάστημα ορισμού του x

Όμως για την αριθμητική επίλυση το πεπερασμένο μήκος πλέγματος δεν επιτρέπει την συμμετοχή κυματομορφών οσοδήποτε μικρού μήκους κυματος

- $k=0$ αντιστοιχεί στην σταθερή συνάρτηση και δεν επηρεάζει την ευστάθεια
- αν χρησιμοποιήσουμε M διαστήματα, $L=M\Delta x$, τότε $1\leq m\leq M/2$ είναι αποδεκτοί κυματαριθμοί που αντιστοιχούν σε κύματα μήκους από L έως $2\Delta x$

Κυματαριθμός $k_m=2m\pi/L$, $a_m=k_m\Delta x$ μήκος κύματος $\lambda_m=2\pi/k_m$

m=1, μέγιστο μήκος κύματος	$k_1=2\pi/L$ $\lambda_1=2\pi/k_1=L$	$a_1=2\pi\Delta x/(M\Delta x)$ $a_1=2\pi/M$ $\lim_{M\to\infty} a_1 = 0$
m, ενδεικτική περίπτωση	$k_m=2\pi m/L$ $\lambda_m=2\pi/k_m=L/m$	$a_m=2\pi m\Delta x/(M\Delta x)$ $a_m=2\pi m/M$
m=M/2, ελάχιστο μήκος κύματος ή συχνότητα Nyquist	$k_{M/2}=2\pi M/(2L)$ $\lambda_{M/2}=2L/M=2\Delta x$	$a_{M/2}=2\pi M\Delta x/(2L)$ $a_{M/2}=\pi$

- Μήκη κύματος μικρότερα του $2\Delta x$ δεν είναι εφικτό να υπολογισθούν λόγω του πεπερασμένου μεγέθους του πλέγματος
- Χρειαζόμαστε την αριθμητική σχέση διασποράς, $s_m=s_m(a_m)$ για $0\leq a_m\leq\pi$

- Η διαφορά μεταξύ αριθμητικής και υπολογιστικής λύσης προκύπτει διότι φ_{num} κρατάει πεπερασμένο αριθμό σημαντικών ψηφίων, 6 για απλή και 15 για διπλή ακρίβεια και συνεπώς έχει δικό της σφάλμα αποκοπής στο οποίο συνυπάρχουν όλες οι δυνατές κυματομορφές

- Έτσι αν αρχικά, t=0, η φ χαρακτηρίζεται από μία κυματοσυνάρτηση κάποιου m, π.χ. Είναι $\varphi_6(x,t)=\varphi_6(j,n)$ τότε ενώ σύμφωνα με την αναλυτική και αριθμητική λύση θα παρέμενε πάντα αυτή, ο υπολογιστής παράγει και άλλες μέσω του δικού του σφάλματος αποκοπής

- Μας ενδιαφέρει η εξέλιξη κάθε μίας εξ αυτών των κυματομορφών που υπάρχουν στο υπολογιστικό λάθος καθώς αυξάνεται ο αριθμός των χρονικών βημάτων τα οποία υλοποιούνται κατά την αριθμητική επίλυση του εν λόγω αριθμητικού σχήματος

- Για την ανάλυση του αριθμητικού σχήματος εισάγουμε την έννοια του παράγοντα ενίσχυσης A_m ο οποίος ορίζεται ως εξής

$$A_m(x,t)=\frac{\varepsilon_m(x,t+\Delta t)}{\varepsilon_m(x,t)}=\frac{e^{i(a_m j-s_m n-s_m)}}{e^{i(a_m j-s_m n)}}=e^{-is_m}$$

Εναλλακτικά:

$$A_m(x,t)=\frac{\varepsilon_m(x,t+\Delta t)}{\varepsilon_m(x,t)}=\frac{\xi_m^{n+1}e^{ia_m j}}{\xi_m^{n}e^{ia_m j}}=\frac{\xi_m^{n+1}}{\xi_m^{n}}$$

- Ο παράγοντας ενίσχυσης A_m είναι επίσης μιγαδικός αριθμός εν γένει και για την μελέτη του ορίζουμε την εικόνα πλάτους και την εικόνα φάσης του κατ' αναλογία με την συνάρτηση απόκρισης R_m

Εικόνα Πλάτους : $\left|A_m\right| = \left|\frac{\xi_m^{n+1}}{\xi_m^n}\right| = \left|e^{-is_m}\right| = \left|e^{s_{m,i}} e^{-is_{m,r}}\right| = e^{\omega_{m,i}\Delta t} = e^{s_{m,i}}$

$$\omega_m = \omega_{m,r} + i\omega_{m,i}$$
$$s_m = s_{m,r} + is_{m,i}$$

Για την αποφυγή ασταθειών θέλουμε $\left|A_m\right| = \left|\frac{\xi_m^{n+1}}{\xi_m^n}\right| < 1 \leftrightarrow s_{m,i} < 0$ για κάθε κυματομορφή m

Εικόνα Φάσης : $Q_A\left(a_m\right) = \frac{-\arg\left(A_m\right)}{a_m Cr} = \frac{-\arctan\left(\frac{\mathrm{Im}\left(A_m\right)}{\mathrm{Re}\left(A_m\right)}\right)}{a_m Cr} = \frac{s_{m,r}}{a_m Cr}$

- Η ανάλυση της συμπεριφοράς των αριθμητικών σχημάτων αφορά κυρίως τον υπολογισμό της εικόνας πλάτους και της εικόνας φάσης και συνιστά κατ' ουσίαν την εύρεση της αριθμητικής σχέσης διασποράς που αποτελεί αλλοίωση της αντίστοιχης αναλυτικής σχέσης διασποράς $s_m=s_m(a_m)$ από το χρησιμοποιούμενο αριθμητικό σχήμα
- Ενδιαφέρει η αποτίμηση αυτή για κάθε δυνατή κυματομορφή m από όσες επιτρέπονται με βάση την πλεγματοποίηση
- Η διαφορά μεταξύ της εικόνας πλάτους της συνάρτησης απόκρισης και του παράγοντα ενίσχυσης συνιστά σφάλμα πλάτους,

$\left|R_m\right| \neq \left|A_m\right| \rightarrow$ Σφάλμα πλάτους

Εξάρτηση του σφάλματος από τον κυματαριθμό $\rightarrow$ Παραμόρφωση πλάτους

Αριθμητική διάχυση ή αντιδιάχυση αν $\left|A_m\right| < 1$ ή $\left|A_m\right| > 0$, αντίστοιχα

- Η διαφορά μεταξύ της εικόνας φάσης της συνάρτησης απόκρισης και του παράγοντα ενίσχυσης συνιστά σφάλμα φάσης,

$$Q_R(a_m) \neq Q_A(a_m) \rightarrow \text{Σφάλμα φάσης}$$

Εξάρτηση του σφάλματος από τον κυματαριθμό $\rightarrow$ Παραμόρφωση φάσης

Παραμόρφωση φάσης $\rightarrow$ Αριθμητική διασπορά

$Q_A(a_m) > Q_R(a_m) \rightarrow$ Η αριθμητική φάση είναι πιό γρήγορη της ακριβούς λύσης

$Q_A(a_m) < Q_R(a_m) \rightarrow$ Η αριθμητική φάση είναι πιό αργή της ακριβούς λύσης

Ανάλυση Ευστάθειας Εξίσωσης Συναγωγής

$$\text{ΜΔΕ} \longrightarrow \frac{\partial\phi}{\partial t} + u\frac{\partial\phi}{\partial t} = 0 \quad \phi(x=0,t) = \phi(x=L,t), \quad \phi(x,t=0) = \sin\left(\frac{2\pi m}{L}x\right)$$

Η αναλυτική λύση είναι φ(x,t)=sin[(2πm/L)(x-ut)]

Αριθμητικό Σχήμα FTBS ακρίβειας O(Δt,Δx)

$$\longrightarrow \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} + u\frac{\phi_j^n - \phi_{j-1}^n}{\Delta x} = 0 \xrightarrow{Cr \equiv \frac{u\Delta t}{\Delta x}} \phi_j^{n+1} = \phi_j^n(1-Cr) + Cr\phi_{j-1}^n$$

Η λύση που θα προκύψει υπολογιστικά, $\hat{\phi}(j,n)$, από την επίλυση του αριθμητικού σχήματος διατηρεί πεπερασμένο αριθμό σημαντικών ψηφίων.

Ορίζουμε το σφάλμα $\varepsilon_j^n = \hat{\phi}_j^n - \phi_j^n$ λόγω αυτής της αποκοπής και αντικαθιστούμε στο παραπάνω αριθμητικό σχήμα

$$\hat{\phi}_j^{n+1} - \hat{\phi}_j^n(1-Cr) - Cr\hat{\phi}_{j-1}^n = 0 \xrightarrow{\hat{\phi}_j^n = \phi_j^n + \varepsilon_j^n} \phi_j^{n+1} + \varepsilon_j^{n+1} = \phi_j^n(1-Cr) + \varepsilon_j^n(1-Cr) + Cr\phi_{j-1}^n + Cr\varepsilon_{j-1}^n \rightarrow$$

$$\cancel{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n(1-Cr) - Cr\phi_{j-1}^n} + \varepsilon_j^{n+1} - \varepsilon_j^n(1-Cr) - Cr\varepsilon_{j-1}^n = 0 \rightarrow \varepsilon_j^{n+1} = \varepsilon_j^n(1-Cr) + Cr\varepsilon_{j-1}^n$$

Συνεπώς το αριθμητικό σφάλμα ικανοποιεί την ίδια εξίσωση διαφορών με την αριθμητική λύση

$$\varepsilon_j^{n+1} = \varepsilon_j^n \left(1 - Cr\right) + Cr\varepsilon_{j-1}^n$$

Η παραπάνω εξίσωση είναι γραμμική και, για μεγάλο αριθμό κόμβων M στην x κατεύθυνση, η λύση της μπορεί να αναπαρασταθεί με πεπερασμένη σειρά Fourier

$$\varepsilon(t,x) = \sum_{k=-M/2}^{k=M/2} \varepsilon_m = \sum_{k=-M/2}^{k=M/2} \xi_m^{n+1} e^{ikx} = \sum_{k=-M/2}^{k=M/2} \zeta_m e^{-s_m n} e^{ia_m j}, \qquad 0 \le a_m = k\Delta x \le \pi$$

Αν αντικαταστήσουμε το παραπάνω ανάπτυγμα Fourier στο αριθμητικό σχήμα, λόγω της γραμμικότητάς του κάθε όρος ε_m μπορεί να εξετασθεί ξεχωριστά καθώς ικανοποιεί το παραπάνω σχήμα

Αντικαθιστώντας την ε_m στο αριθμητικό σχήμα FTBS βρίσκουμε τον σχετικό παράγοντα ενίσχυσης

$$\xi_m^{n+1} e^{ia_m j} = \xi_m^n e^{ia_m j}(1 - Cr) + \xi_m^n e^{ia_m (j-1)} Cr \rightarrow A_m = \frac{\xi_m^{n+1}}{\xi_m^n} = 1 - Cr + Cre^{-ia_m}$$

$$A_m = \frac{\xi_m^{n+1}}{\xi_m^n} = 1 - Cr + Cr\cos a_m - iCr\sin a_m$$

Σκοπός είναι η εύρεση της αριθμητικής σχέσης διασποράς $s_m = s_m(a_m)$ σαν συνάρτηση των παραμέτρων του προβλήματος, a_m, Cr

Αρχικά υπολογίζουμε την εικόνα πλάτους του παραπάνω σχήματος

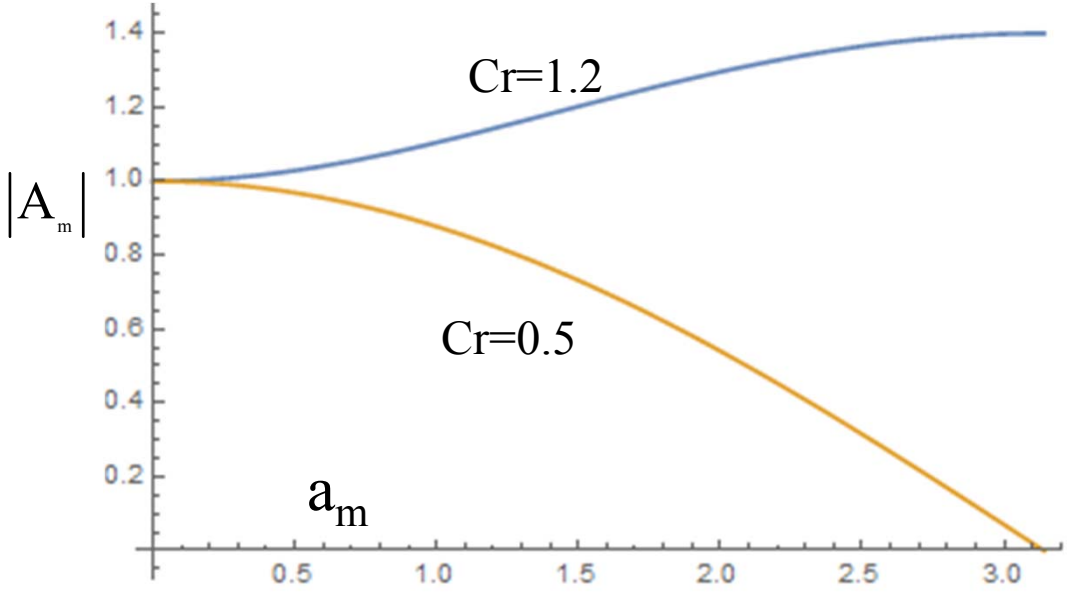
$$\left|A_m\right| = \sqrt{\left(1 - Cr + Cr\cos a_m\right)^2 + Cr^2 \sin^2 a_m} \rightarrow$$

$$\left|A_m\right| = \sqrt{\left(1 - Cr\right)^2 + 2\left(1 - Cr\right)Cr\cos a_m + Cr^2\cos^2 a_m + Cr^2 \sin^2 a_m}$$

$$|A_m| = \sqrt{(1-Cr)^2 + 2(1-Cr)Cr\cos a_m + Cr^2} = \sqrt{1 + 2Cr(Cr-1)(1-\cos a_m)}$$

Για ευστάθεια θα πρέπει $|A_m| < 1 \rightarrow 1 + 2Cr(Cr-1)(1-\cos a_m) < 1 \rightarrow$

$2Cr(Cr-1)(1-\cos a_m) < 0 \xrightarrow{1>\cos a_m} Cr < 1$ Κριτήριο Fredrichs – Courant – Levy

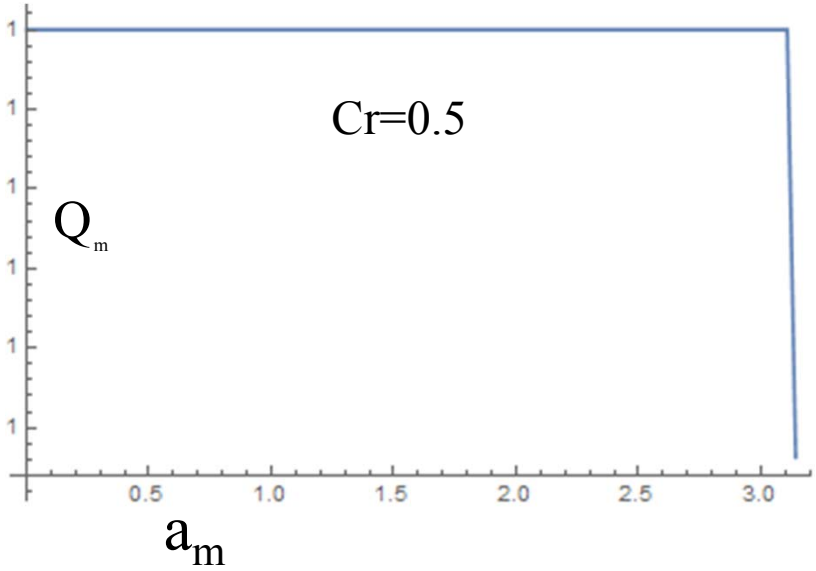


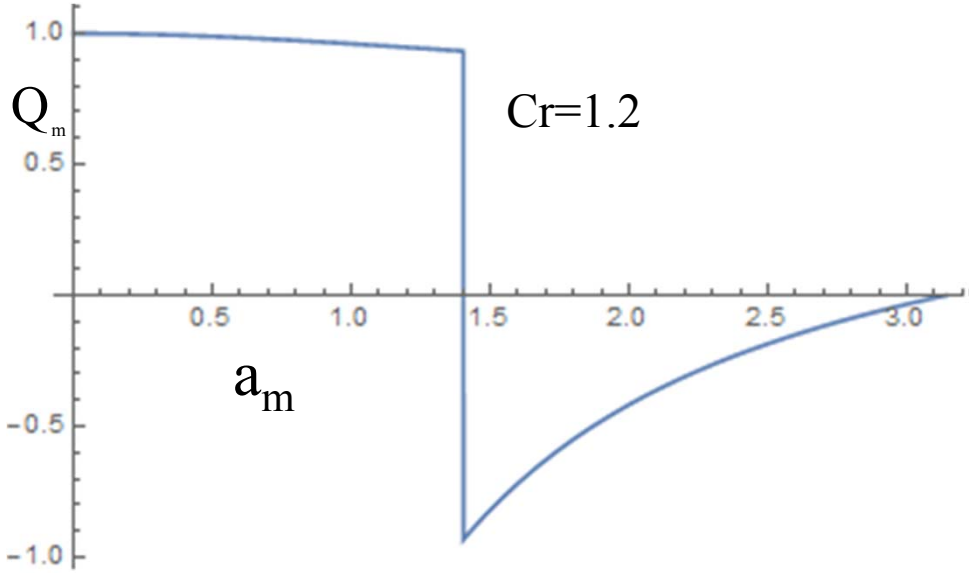
$$a_m = k_m \Delta x = \frac{2\pi m \Delta x}{L} = \frac{2\pi m}{M}, \quad 0 < a_m < \pi$$

Η περίπτωση Cr=0.5 είναι ευσταθής

- Για την περίπτωση που Cr=1.2 το σχήμα είναι ασταθές για a_m>0.5 όπου η εικόνα πλάτους ξεπερνάει αισθητά το 1
- Μάλιστα για την περίπτωση που π.χ. M=200 οι ιδιομορφές οι μεγαλύτερες του 15 αναμένεται να ενισχυθούν σημαντικά με την πάροδο των χρονικών βημάτων
- Οι ιδιομορφές μικρού μήκους κύματος, m~100, ενισχύονται περισσότερο από όλες, πράγμα που προοιωνίζεται την εμφάνιση Zig-zag στις προσομοιώσεις

Εικόνα φάσης



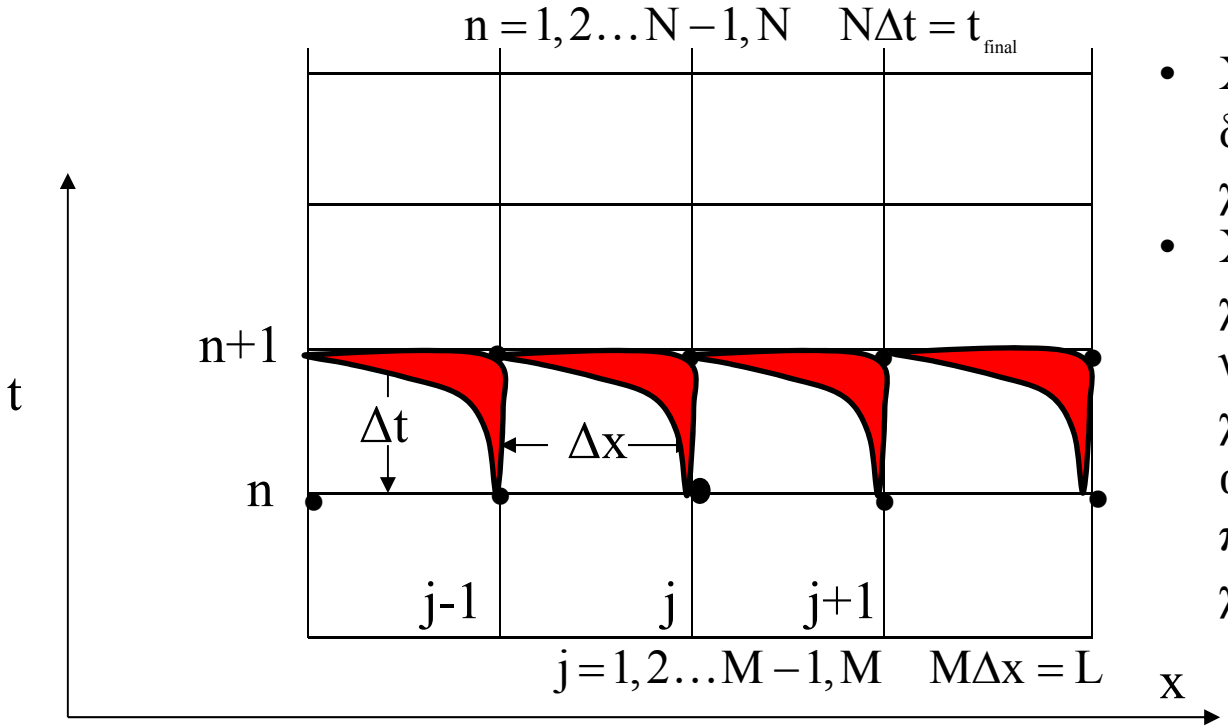


Όσο μεγαλώνει ο Cr μειώνεται ο κυματαριθμός πέραν του οποίου η εικόνα φάσης εμφανίζει καθυστέρηση σε σχέση με την ακριβή λύση

Επίλυση με Χρήση Άρρητου Σχήματος

$$\frac{\phi_j^{n+1}-\phi_j^n}{\Delta t}+u\frac{\phi_j^{n+1}-\phi_{j-1}^{n+1}}{\Delta x}=0 \rightarrow \phi_j^{n+1}\left(1+Cr\right)-Cr\phi_j^{n+1}=\phi_j^n \qquad \phi_1^n=\phi_{M+1}^n \quad \phi_j^0=f\left(x_j\right)$$

- Άρρητα σχήματα χρησιμοποιούν τιμές από την καινούργια χρονική στιγμή για την διακριτοποίηση των χωρικών παραγώγων
- Έχουν την ιδιαιτερότητα ότι εμπλέκουν πολλές από τις νέες τιμές της άγνωστης συνάρτησης και συνεπώς απαιτούν την αντιστροφή πίνακα για τον υπολογισμό τους
- Το εν λόγω σχήμα εμπλέκει δύο νέες και μία παλιά τιμή σε κάθε εξίσωση για την ανανέωση της τιμής σε μία θέση



- Χρήση της 11α για την διακριτοποίηση της χρονικής παραγώγου
- Χρειάζεται παραγώγιση της χωρικής παραγώγου στην νέα χρονική στιγμή με χρήση συνδυασμένου αναπτύγματος Taylor ως προς τον χρόνο και τον χώρο

- **Ανάπτυγμα Taylor για δύο μεταβλητές**

$$\phi\left(x_0+\Delta x, y_0+\Delta y\right)=\sum_{\substack{0\le \ell,m\le n\\ \ell+m\le n}}^{\infty}\frac{1}{\ell!m!}\frac{\partial^{\ell+m}\phi\left(x_0,y_0\right)}{\partial x^{\ell}\partial y^{m}}\Delta x^{\ell}\Delta y^{m}+E_h,\quad E_h\le\frac{C}{\left(n+1\right)!}\left(\left|\Delta x\right|+\left|\Delta y\right|\right)^{n+1}\leftarrow \text{Υπόλοιπο}$$

$$\phi\left(x_o+\Delta x, y_o+\Delta y\right)=\phi\left(x_o,y_o\right)+\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_{x_0}^{y_0}\Delta x+\left.\frac{\partial\phi}{\partial y}\right|_{x_0}^{y_0}\Delta y+\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_{x_0}^{y_0}\frac{\Delta x^2}{2!}+\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\right|_{x_0}^{y_0}\frac{\Delta y^2}{2!}+\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial y}\right|_{x_0}^{y_0}\frac{\Delta x\Delta y}{1!1!}+$$

$$+\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_{x_0}^{y_0}\frac{\Delta x^3}{3!}+\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial y^3}\right|_{x_0}^{y_0}\frac{\Delta y^3}{3!}+\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^2\partial y}\right|_{x_0}^{y_0}\frac{\Delta x^2\Delta y}{2!1!}+\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x\partial y}\right|_{x_0}^{y_0}\frac{\Delta x\Delta y^2}{1!2!}+O\left(\left|\Delta x\right|+\left|\Delta y\right|\right)^4$$

- Για την εξαγωγή της παραπάνω σχέσης αλλά και γενικότερων σχέσων που διατηρούν περισσότερους όρους στο ανάπτυγμα χρησιμοποιούμε την εξής διαδικασία

  Εισάγουμε την μεταβλητή s έτσι ώστε: $\phi\left(x,y\right)=\left(x_0+s\Delta x, y_0+s\Delta y\right)\equiv\phi\left(s\right)$

- Δημιουργούμε το ανάπτυγμα Taylor της φ(s) γύρω από την τιμή s=0 θέτοντας Δs=1, και επανεισάγουμε τις x, y κάνοντας χρήση του κανόνα της αλυσίδας

$$\phi\left(s\right)=\phi\left(0\right)+\left.\frac{d\phi}{ds}\right|_0\Delta s+\left.\frac{d^2\phi}{ds^2}\right|_0\frac{\Delta s^2}{2}+\left.\frac{d^3\phi}{ds^3}\right|_0\frac{\Delta s^3}{6}+O\left(\Delta s^4\right),\qquad x=x_0+s\Delta x,\quad y=y_0+s\Delta y$$

$$\phi\left(0\right)=\phi\left(x_0,y_0\right),\quad \frac{d\phi}{ds}=\frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{dx}{ds}+\frac{\partial\phi}{\partial y}\frac{dy}{ds}=\frac{\partial\phi}{\partial x}\Delta x+\frac{\partial\phi}{\partial y}\Delta y$$

$$\frac{d^2\phi}{ds^2}=\frac{d}{ds}\left(\frac{d\phi}{ds}\right)=\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\Delta x+\frac{\partial\phi}{\partial y}\Delta y\right)\frac{dx}{ds}+\frac{d}{dy}\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\Delta x+\frac{\partial\phi}{\partial y}\Delta y\right)\frac{dy}{ds}=$$

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\Delta x^2+\frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial y}\Delta y\Delta x+\frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial y}\Delta y\Delta x+\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\Delta y^2=\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\Delta x^2+2\frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial y}\Delta y\Delta x+\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\Delta y^2$$

Προχωρούμε ανάλογα για τις ανώτερης τάξης παραγώγους και αντικαθιστώντας στο ανάπτυγμα ως προς s ανακτούμε το αρχικό ανάπτυγμα της φ ως προς τις x, y

- Επανερχόμενοι στο αριθμητικό σχήμα που θέλουμε να μελετήσουμε έχουμε, χρησιμοιώντας συμβολισμό με διακριτές μεταβλητές για συντομία, i.e. $x_j=j\Delta x$, $t_n=n\Delta t$, και με βάση το πλεγματικό σημείο j, n :

$$\left.\frac{\partial\phi}{\partial t}\right|_j^n=\frac{\phi_j^{n+1}-\phi_j^n}{\Delta t}-\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}\right|_j^n\frac{\Delta t}{2}-\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial t^3}\right|_j^n\frac{\Delta t^2}{3!}-\left.\frac{\partial^4\phi}{\partial t^4}\right|_j^n\frac{\Delta t^3}{4!}+O\left(\Delta t^4\right)\qquad(11\alpha)$$

$$\phi_j^{n+1}=\phi_j^n+\left.\frac{\partial\phi}{\partial t}\right|_j^n\Delta t+\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}\right|_j^n\frac{\Delta t^2}{2}+\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial t^3}\right|_j^n\frac{\Delta t^3}{3!}+\left.\frac{\partial^4\phi}{\partial t^4}\right|_j^n\frac{\Delta t^4}{4!}+O\left(\Delta t^5\right)\quad(12\alpha)$$

$$\phi_{j-1}^{n+1}=\phi_j^n+\left.\frac{\partial\phi}{\partial t}\right|_j^n\Delta t-\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_j^n\Delta x+\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}\right|_j^n\frac{\Delta t^2}{2}+\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_j^n\frac{\Delta x^2}{2}-\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial t\partial x}\right|_j^n\Delta t\Delta x+$$

$$\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial t^3}\right|_j^n\frac{\Delta t^3}{6}-\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial t^2\partial x}\right|_j^n\frac{\Delta t^2\Delta x}{2}+\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial t\partial x^2}\right|_j^n\frac{\Delta t\Delta x^2}{2}-\left.\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right|_j^n\frac{\Delta x^3}{6}+O\left(\left|\Delta t\right|+\left|\Delta x\right|\right)^4\qquad(12\beta)$$

$$(12\alpha)-(12\beta)\rightarrow \phi_j^{n+1}-\phi_{j-1}^{n+1}=\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_j^n \Delta x+\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial t\partial x}\right|_j^n \Delta t\Delta x-\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_j^n \frac{\Delta x^2}{2}+O\left(|\Delta x|+|\Delta t|\right)^3 \rightarrow$$

$$\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_j^n=\frac{\phi_j^{n+1}-\phi_{j-1}^{n+1}}{\Delta x}-\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial t\partial x}\right|_j^n \Delta t+\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_j^n \frac{\Delta x}{2}+O\left(|\Delta x|+|\Delta y|\right)^2 \qquad (13)$$

1η Τροποποιημένη Εξίσωση

Σφάλμα Αποκοπής

$$\boxed{(11\alpha)+u\times(13)\rightarrow \frac{\partial\phi}{\partial t}+u\frac{\partial\phi}{\partial x}=-\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}\frac{\Delta t}{2}-\frac{\partial^3\phi}{\partial t^3}\frac{\Delta t^2}{3!}+\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\frac{u\Delta x}{2}-\frac{\partial^2\phi}{\partial t\partial x}u\Delta t+O\left(|\Delta t|+|\Delta x|\right)^2}+$$

$$\text{ΜΔΕ}\rightarrow=0 \qquad +\frac{\phi_j^{n+1}-\phi_j^{n+1}}{\Delta t}+u\frac{\phi_j^{n+1}-\phi_{j-1}^{n+1}}{\Delta x}=0 \quad \leftarrow \text{Αριθμητικό Σχήμα}$$

- Πρόκειται για άρρητο συνεπές σχήμα με ακρίβεια O(Δx)+O(Δt)
- Για την 2η Τροποποιημένη εξίσωση υπολογίζουμε τις χρονικές παραγώγους μέσω των χωρικών παραγώγων με χρήση της αρχικής μερικής διαφορικής εξίσωσης, για απλούστευση, και έχουμε

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}=u^2\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2},\quad \frac{\partial^3\phi}{\partial t^3}=-u^3\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3},\quad \frac{\partial^2\phi}{\partial t\partial x}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)=\frac{\partial}{\partial x}\left(-u\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)=-u\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}$$

- Αντικαθιστώντας στην 1η Τροποποιημένη Εξίσωση παίρνουμε την παρακάτω 2η Τροποποιημένη της Μερικής Διαφορικής Εξίσωσης

$$\boxed{\frac{\partial\phi}{\partial t}+u\frac{\partial\phi}{\partial x}=\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\left(\frac{u\Delta x}{2}-\frac{u^2\Delta t}{2}+u^2\Delta t\right)+\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\frac{u^3\Delta t^2}{3!}+O\left(|\Delta t|+|\Delta x|\right)^2}$$

- Σύμφωνα με την 2η Τροποποιημένη Εξίσωση το εν λόγω άρρητο σχήμα, Fully Implicit Euler, είναι πάντα ευσταθές και χαρακτηρίζεται κυρίως από σφάλμα πλάτους, αφού η αριθμητική διάχυση που εισάγει είναι πάντα θετική και δεν επιτρέπει ενίσχυση καθώς προχωράει η αριθμητική ολοκλήρωση με τον αριθμό των χρονικών βημάτων
- Για πιό αυστηρή αντιμετώπιση του θέματος της ευστάθειας προχωρούμε στην πιό λεπτομερειακή ανάλυση κατά von Neumann
- Για τον σκοπό αυτό θέτουμε για μία τυχαία κυματομορφή που υπεισέρχεται στο υπολογιστικό σφάλμα αποκοπής, ε, $\varepsilon_{m,j}^{n} \approx \xi_m^n e^{ia_m j}$ και αντικαθιστούμε στο αριθμητικό σχήμα, το οποίο αυτή επίσης ικανοποιεί λόγω της γραμμικότητας του προβλήματος,

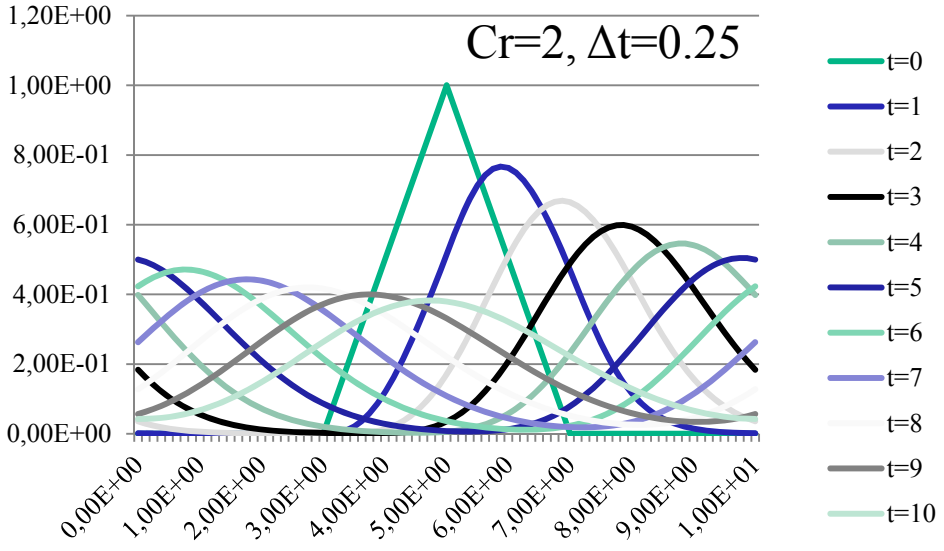
$$\frac{\varepsilon_{m,j}^{n+1}-\varepsilon_{m,j}^{n+1}}{\Delta t}+u\frac{\varepsilon_{m,j}^{n+1}-\varepsilon_{m,j-1}^{n+1}}{\Delta x}=0 \xrightarrow{\varepsilon_{m,j}^{n}\approx\xi_m^n e^{ia_m j}} \xi_m^{n+1}e^{ia_m j}-\xi_m^{n}e^{ia_m j}+Cr\left(\xi_m^{n+1}e^{ia_m j}-\xi_m^{n+1}e^{ia_m (j-1)}\right)=0 \rightarrow$$

$$\frac{\xi_m^{n+1}}{\xi_m^{n}}+Cr\frac{\xi_m^{n+1}}{\xi_m^{n}}\left(1-e^{-ia_m}\right)=1 \rightarrow A_m\left[1+Cr\left(1-e^{-ia_m}\right)\right]=1 \rightarrow A_m=\frac{1}{1+Cr\left(1-e^{-ia_m}\right)} \rightarrow$$

$$A_m=\frac{1}{1+Cr\left(1-\cos a_m\right)+iCr\sin a_m} \quad \leftarrow \quad \text{Παράγοντας Ενίσχυσης}$$

$$\left|A_m\right|=\frac{1}{\sqrt{\left[1+Cr\left(1-\cos a_m\right)\right]^2+Cr^2\sin^2 a_m}}<1 \quad \forall Cr, a_m>0$$

- Η εικόνα πλάτους του παράγοντα ενίσχυσης προβλέπει πάντα ευστάθεια ασχέτως της τιμής του αριθμού Courant, σε συμφωνία με τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων



Αριθμητική επίλυση του άρρητου σχήματος για Cr=2, Δt=0.25 και Δx=0.5

- Το άρρητο αριθμητικό σχήμα αγγυάται ευστάθεια ακόμα και για Cr>1
- Όμως, γιά σχετικά αραιό πλέγμα (80 διαστήματα), έχει αρκετή αριθμητική διάχυση
- Χρειάζεται πύκνωση για να απιτύχει ικανοποιητική ακρίβεια μετά από σημαντικό αριθμό χρονικών βημάτων

Υλοποίηση Αριθμητικής Επίλυσης Άρρητου Σχήματος

$$\frac{\phi_j^{n+1}-\phi_j^{n+1}}{\Delta t}+u\frac{\phi_j^{n+1}-\phi_{j-1}^{n+1}}{\Delta x}=0\rightarrow\phi_j^{n+1}\left(1+Cr\right)-\phi_{j-1}^{n+1}Cr=\phi_j^n \qquad Cr=\frac{u\Delta t}{\Delta x}$$

Για υλοποίηση Thomas ορίζουμε : $AP_j=1+Cr \quad AW_j=Cr \quad AE_j=0 \quad b_J=\phi_j^n$

$$AP_j\phi_j^{n+1}-AW_j\phi_{j-1}^{n+1}-AE_J\phi_{j+1}^{n+1}=b_j \qquad (14) \qquad j=2,3\ldots M+1, \quad M:\text{Αριθμός διαστημάτων}$$

Περιοδικές Συνοριακές Συνθήκες & Αρχική

$\forall$ χρονικό βήμα $n:\phi_1^n=\phi_{M+1}^n \quad \leftarrow$ Περιοδικότητα

$n=0:\phi_j^0=f\left(x_j\right) \quad \leftarrow$ Αρχική συνθήκη

- Λόγω περιοδικότητας λύνουμε για M αγνώστους, δηλαδή τις τιμές της φ για j=2 έως M+1 κάνοντας χρήση της Εξ(14) γιά κάθε έναν από τους αγνώστους

Όμως για j=2: $\phi_{2-1}^n=\phi_1^n=\phi_{M+1}^n$ και η πρώτη εξίσωση παίρνει την μορφή

$j=2, \quad AP_2\phi_2^{n+1}-AW_2\phi_{M+1}^{n+1}=b_2=\phi_2^n$ προκειμένου να μην αυξηθεί ο αριθμός των αγνώστων

Συνεπώς καταστρέφεται η τριδιαγώνια μορφή του πίνακα και χρειάζεται προσοχή στην διαδικασία επίλυσης όπου υπάρχουν δύο επιλογές (α) απ' ευθείας αντιστροφή και (β) επίλυση σταθεροποίηση συντελεστών και επαναληπτική διαδικασία

Α) Το πρόβλημα προς επίλυση έχει την παρακάτω μητροειδή μορφή και συνεπώς απαιτείται δημιουργία πλήρους πίνακα, με ότι συνεπάγεται αυτό από πλευράς αποθηκευτικής μνήμης, και πλήρη αντιστροφή κάνοντας χρήση απαλοιφής Gauss ή παραγοντοποίησης LU, με ότι συνεπάγεται αυτό από πλευράς χρήσης χρόνου CPU

$$\begin{bmatrix} 1+Cr & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -Cr \\ -Cr & 1+Cr & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -Cr & 1+Cr & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -Cr & 1+Cr & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -Cr & 1+Cr & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -Cr & 1+Cr \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_2^{n+1} \\ \phi_3^{n+1} \\ \phi_4^{n+1} \\ \vdots \\ \phi_{M-1}^{n+1} \\ \phi_M^{n+1} \\ \phi_{M+1}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_2^{n} \\ \phi_3^{n} \\ \phi_4^{n} \\ \vdots \\ \phi_{M-1}^{n} \\ \phi_M^{n} \\ \phi_{M+1}^{n} \end{bmatrix}$$

Για τον σκοπό αυτό υπάρχουν έτοιμες υπορουτίνες που αντιστρέφουν έναν πλήρη πίνακα ο οποίος θα έχει προηγουμένως κατασκευασθεί κατάλληλα

Β) Εναλλακτικά και προκειμένου να αποφευχθεί η διασικασία απ’ευθείας αντιστροφής προτείνεται να εκτιμηθεί η καινούργια τιμή του τελευταίου κόμβου φ_{M+1} αντικαθιστώντας την με την παλιά της τιμή ώστε να λυθεί μία αλληλουχία τριδιαγώνιων προβλημάτων μέχρι τελικής σύγκλισης

Έτσι το πρόβλημα σε μητροειδή μορφή παίρνει την μορφή

$$\begin{bmatrix} 1+Cr & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -Cr & 1+Cr & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -Cr & 1+Cr & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -Cr & 1+Cr & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -Cr & 1+Cr & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -Cr & 1+Cr \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_2^{n+1,k+1} \\ \phi_3^{n+1,k+1} \\ \phi_4^{n+1,k+1} \\ \vdots \\ \phi_{M-1}^{n+1,k+1} \\ \phi_M^{n+1,k+1} \\ \phi_{M+1}^{n+1,k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_2^n + Cr\phi_{M+1}^{n+1,k} \\ \phi_3^n \\ \phi_4^n \\ \vdots \\ \phi_{M-1}^n \\ \phi_M^n \\ \phi_{M+1}^n \end{bmatrix}$$

- Όπου τώρα η συνεισφορά της καινούργιας τιμής του τελευταίου κόμβου στην εξίσωση που αντιστοιχεί στον δεύτερο κόμβο εκτιμάται με βάση την παλιά και μετατίθεται στο δεξί μέλος όπου μπαίνουν οι γνωστές ποσότητες
- Τώρα υλοποιείται επαναληπτική διαδικασία όπου σε κάθε νέα επανάληψη, k+1, επιλύεται ένα τριδιαγώνιο πρόβλημα και εκτιμάται η καινούργια τιμή του $\phi_{M+1}^{n+1,k+1}$
- Έτσι εκτιμάται το άνυσμα των αγνώστων επαναλύεται το πρόβλημα και η διαδικασία συνεχίζεται μέχρι οι τιμές των φ μεταξύ δύο διαδοχικών επαναλήψεων να προσεγγίσουν κατά λιγότερο ενός προαποφασισμένου λάθους, π.χ. με βάση την Ευκλείδεια νόρμα, οπότε και θεωρείται ότι έχει επιτευχθεί σύγκλιση και η διαδικασία συνεχίζεται για το επόμενο χρονικό βήμα.
- Η διαδικασία αυτή αναμένεται να συγκλίνει σχετικά γρήγορα λόγω της διαγώνιας υπεροχής του τριδιαγώνιου πίνακα που προκύπτει, και πολλές φορές κρίνεται προτιμητέα σε σχέση με την απ' ευθείας αντιστροφή

Πινακοειδής Μορφή Προβλήματος

$$
\begin{array}{r}
j=2 \\ j=3 \\ j=4 \\ \\ \\ j=M \\ j=M+1
\end{array}
\begin{bmatrix}
AP_2 & -AE_2 & & & & 0 & 0 \\
-AW_3 & AP_3 & -AE_3 & & & 0 & 0 \\
 & -AW_4 & AP_4 & -AE_4 & & & \\
 & & & & & & \\
 & & & & & & \\
0 & 0 & & & -AW_M & AP_M & -AE_M \\
0 & 0 & & & & -AW_{M+1} & AP_{M+1}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
\phi_2^{n+1} \\ \phi_3^{n+1} \\ \phi_4^{n+1} \\ \\ \\ \phi_M^{n+1} \\ \phi_{M+1}^{n+1}
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ \\ \\ b_M \\ b_{M+1}
\end{bmatrix}
$$

- Τριδιαγώνιος Πίνακας Ζώνης,
- Επίλυση με Αλγόριθμο Thomas αντί για απαλοιφή Gauss για μεγαλύτερη ταχύτητα επίλυσης
- Η απαλοιφή Gauss απαιτεί περίπου M^3 πράξεις ενώ ο Thomas M για την αντιστροφή
- Αλγόριθμος Thomas: Έστω $\phi_j = P_j \phi_{j+1} + Q_j$ (15) $j = 2, \ldots M+1, \quad P_{M+1} = 0$
- Χρειάζεται να βρούμε τα P_j, Q_j

$$(15) \rightarrow \phi_{j-1} = P_{j-1}\phi_j + Q_{j-1} \qquad (16) \quad j = 3,\ldots M+2$$

$$(14) \xrightarrow{(16)} \phi_j = \phi_{j+1}\frac{AE_j}{AP_j - AW_jP_{j-1}} + \frac{b_j + AW_jQ_{j-1}}{AP_j - AW_jP_{j-1}} \xrightarrow{(15)}$$

$$P_j = \frac{AE_j}{AP_j - AW_jP_{j-1}}, \quad Q_j = \frac{b_j + AW_jQ_{j-1}}{AP_j - AW_jP_{j-1}} \qquad j = 2,\ldots M+1, \qquad (17) \longleftarrow$$ Αναδρομική σχέση

- Αλγόριθμος
  - Υπολογισμός των AP_j, AE_j, AW_j για j=2 έως M+1 από την (14)
  - Υπολογισμός των $P_2=AE_2/AP_2$, $Q_2= b_2/AP_2$
  - Υπολογισμός των P_j και Q_j για j=3 έως M+1 από την αναδρομική σχέση (17)
  - Υπολογισμός του $\varphi_{M+1}=Q_{M+1}$ ($P_{M+1}=0$)
  - Υπολογισμός των φ_j, από j=M έως 2, από την αναδρομική σχέση (15)