

## Dyskretyzacja członu adwekcyjnego: numeryczne oscylacje i sztuczna dyfuzja

Motywacja:  
Równanie Zuzanny

Uproszczenia:

Równanie transportu (paraboliczne równanie różniczkowe cząstkowe)

$$\frac{\partial}{\partial t} u + \underline{\beta} \cdot \nabla u - \nabla \cdot (\kappa(x, y, z) \nabla u) + a_0 u = f$$

Równanie eliptyczne zawierające składnik adwekcyjny (eliptyczne równanie różniczkowe cząstkowe)

$$\underline{\beta} \cdot \nabla u - \nabla \cdot (\kappa(x, y, z) \nabla u) + a_0 u = f$$

z warunkiem brzegowym

$$\kappa \frac{\partial u}{\partial n} + a_1 u = g \quad \text{na } \Gamma .$$

$\kappa$  – współczynnik dyfuzji, w ogólnym przypadku reprezentowany za pomocą macierzy;

wektor  $\underline{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \beta_3) \in (L^\infty(\Omega))^3$  – prędkość konwekcji

$a_0 \in L^\infty(\Omega)$  – skalarna funkcja

$f \in L^2(\Omega)$

$a_1, g$  – określone na  $\Gamma$ ;  $a_1 \in L^\infty(\Gamma)$ ,  $g \in L^2(\Gamma)$ .

Warunek brzegowy może zostać zdefiniowany w zależności od pola prędkości:

$u = g_-$  na  $\Gamma_-$

$u = g_+$  (lub  $\partial_n u = g_+$ ) na  $\Gamma_+$ .

$\Gamma_-$  oznacza brzeg wlotowy (ang. *inflow*), zaś  $\Gamma_+$  jest brzegiem wylotowym (ang. *outflow*):

$\Gamma_- = \{x \in \Gamma : \underline{\beta}(x) \cdot n(x) < 0\}$

$\Gamma_+ = \{x \in \Gamma : \underline{\beta}(x) \cdot n(x) \geq 0\}$ .

**Rozważmy równanie:**

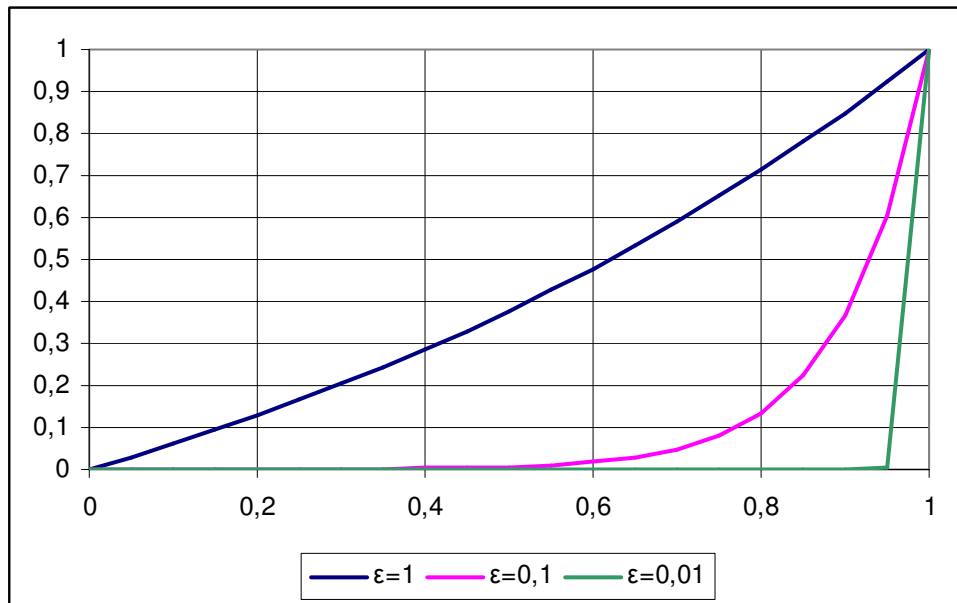
$$(*) \quad -\varepsilon \frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{du}{dx} = 0 \quad \text{w } (0, 1)$$

$$u(0) = 0, \quad u(1) = 1$$

Jest to równanie eliptyczne, zawierające członu adwekcyjny o ogólnej postaci  $\underline{\beta} \cdot \nabla u$ ; w rozważanym przykładzie  $\beta = 1$ .

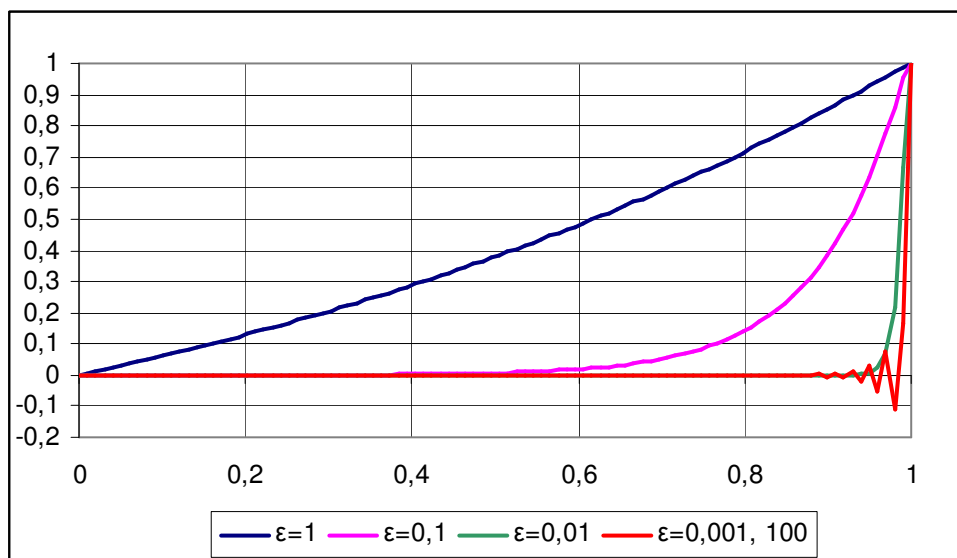
Rozwiązanie dokładne wyraża się wzorem:

$$u(x) = \frac{e^{x/\varepsilon} - 1}{e^{1/\varepsilon} - 1}$$



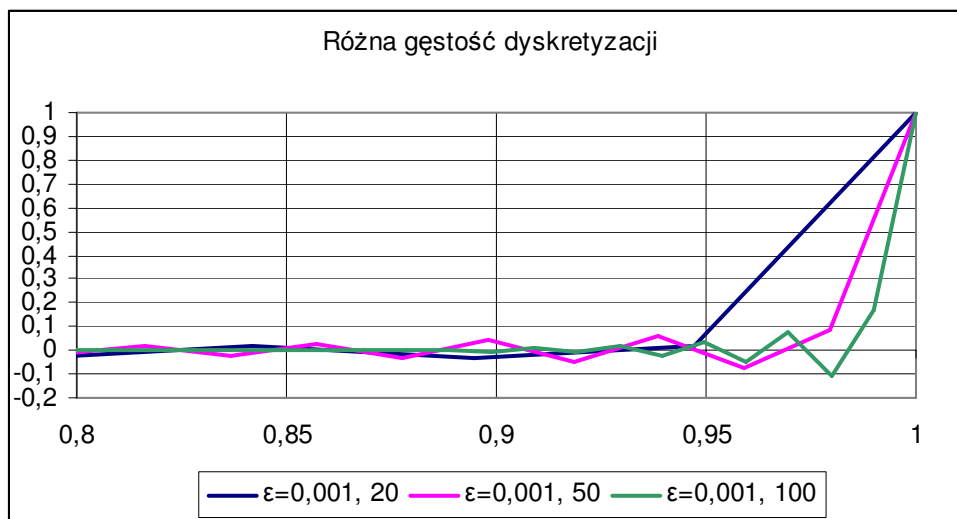
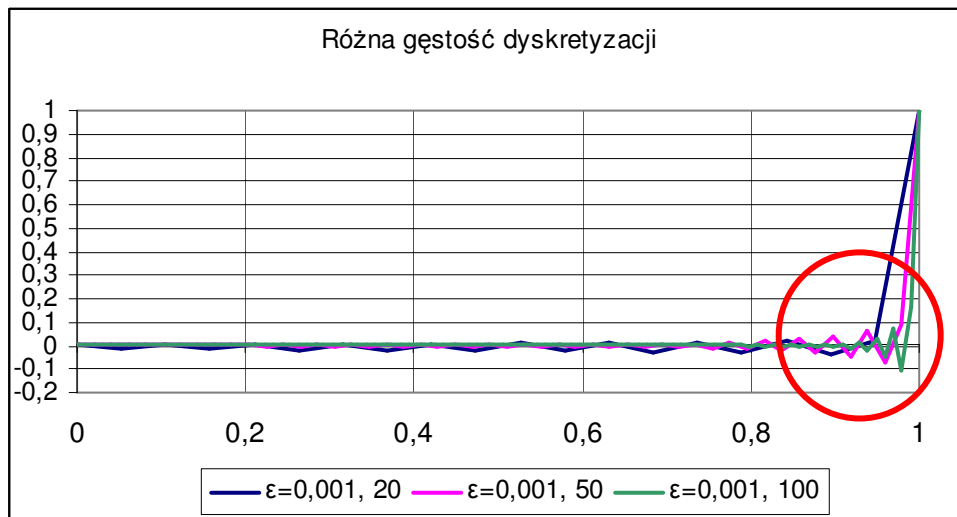
Im mniejsza jest wartość współczynnika dyfuzji  $\epsilon$ , tym mniejsza jest warstwa graniczna, której szerokość ma wartość rzędu  $\epsilon / \beta$ .

Rozwiązujemy je metodą standardową elementu skończonego.... i otrzymujemy:



Dla  $\epsilon \ll \beta$  (czyli u nas  $\epsilon \ll 1$ ) w rozwiązaniu przybliżonym wyznaczonym metodą elementu skończonego pojawiają się oscylacje.

Dla różnej gęstości dyskretyzacji rzecz ma się następująco:



Kiedy  $\varepsilon$  staje się małe, równanie przykładowe ‘prawie’ degeneruje się do równania pierwszego rzędu, dla którego warunek Dirichleta nałożony w końcowym punkcie przedziału jest nieadekwatny. Efekt jest taki, że numeryczne rozwiązanie jest ‘zanieczyszczone’ warunkiem brzegowym w  $x=1$ , co więcej to zanieczyszczenie propaguje się w głąb obszaru.

**Uwagi:**

Jeśli na brzegu  $x=1$  zadany jest warunek brzegowy Neumanna  $\frac{du}{dx} = 0$  to oscylacje nie występują.

Oscylacje pojawiają się gdy  $\frac{\beta h}{\varepsilon} \geq 2$ , gdzie  $h$  oznacza wielkość elementu. Wielkość  $\frac{\beta h}{\varepsilon}$  jest nazywana **komórkową liczbą Reynoldsa**.

Inne określenie dotyczy wielkości  $\frac{\beta h}{2\varepsilon}$ , nazywanej **liczbą Pecleta**.

## DLACZEGO???

### Sformułowanie wariacyjne

Znaleźć  $u \in H^1(\Omega)$  taką, że  $\forall \omega \in H^1(\Omega)$  zachodzi:

$$(**) \quad \int_{\Omega} (\varepsilon \nabla u)^T \cdot \nabla \omega \, d\underline{x} + \int_{\Omega} (\beta \cdot \nabla u) \omega \, d\underline{x} = \int_{\Omega} 0 \, \omega \, d\underline{x}$$

Zachodzi:

Jeśli  $u \in H^2(\Omega)$  to wtedy  $u$  jest rozwiązaniem zagadnienia (\*)  $\Leftrightarrow u$  jest rozwiązaniem zagadnienia wariacyjnego (\*\*).

Ze względu na brak symetrii w tym przypadku **nie istnieje równoważne sformułowanie w postaci zagadnienia minimalizacji funkcjonału.**

### Jeśli

wykorzysta się elementy  $P1$  (funkcje ciągłe, kawałkami liniowe, nazywane też funkcjami ‘kapeluszkowymi’),

oraz dodatkowo założy się, że elementy są równe, zaś węzły zostały ponumerowane w sposób naturalny, to otrzymuje się następujący układ równań liniowych:

$$(***) \quad A \xi = F,$$

gdzie:

$A$  jest macierzą trójdiagonalną o elementach:

$$\begin{bmatrix} \frac{2\varepsilon}{h} & -\frac{\varepsilon}{h} + \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ -\frac{\varepsilon}{h} - \frac{1}{2} & \frac{2\varepsilon}{h} & -\frac{\varepsilon}{h} + \frac{1}{2} & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & -\frac{\varepsilon}{h} - \frac{1}{2} & \frac{2\varepsilon}{h} \end{bmatrix},$$

gdzie  $h=1/M$ , a  $M$  oznacza liczbę elementów, na które został podzielony odcinek  $[0, 1]$ .

### Macierz $A$ nie jest symetryczna!!!

Oznacza to, że klasa metod, które mogą być wykorzystane do rozwiązania układu równań liniowych, znacznie się zawęża, w porównaniu z przypadkiem zagadnień symetrycznych. W szczególności nie można wykorzystać Metody Gradientów Sprzężonych.

Wektor  $F$  ma elementy:

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ \frac{\varepsilon}{h} - \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

Wg. A. Quarteroni, A. Valli, *Numerical Approximation of Partial Differential Equations*:  
 „Assuming that  $2\varepsilon \neq h$  it is easily seen that the solution of is given by:....”

$$\xi_j = u_h(x_j) = \frac{\left(\frac{1+Pe}{1-Pe}\right)^j - 1}{\left(\frac{1+Pe}{1-Pe}\right)^M - 1}, j=1, \dots, M-1,$$

gdzie:

$$Pe := \frac{bh}{2\varepsilon} \text{ nazywana jest liczbą Pecleta.}$$

Jeśli  $Pe > 1$ , to wtedy

$\frac{1+Pe}{1-Pe} < 0$  i w zależności od numeru węzła (parzysty – nieparzysty) pojawiają się **oscylacje**.

### Konwekcja vs. dyfuzja

Jakościowa natura rozważanego zagadnienia zależy od wzajemnej relacji między współczynnikiem dyfuzji i prędkością konwekcji (adwekcji).

Gdy  $K/|\beta|$  małe: w równaniu dominuje konwekcja, równanie nabiera charakteru równania hiperbolicznego.

W miarę jak wartość  $K/|\beta|$  wzrasta – równanie zmienia swój charakter z hiperbolicznego na eliptyczny.

Dla równań o dominującej dyfuzji obowiązuje to, co dotąd powiedziano w odniesieniu do równań eliptycznych, bowiem czynnik konwekcyjny jest zdominowany przez człon dyfuzyjny.

Można byłoby rozważać tzw. zagadnienie zredukowane, czyli przypadek skrajny z  $K=0$ .

$$\underline{\beta} \cdot \nabla u + a_0 u = f \text{ w } \Omega$$

$$u = g_- \text{ na } \Gamma_-$$

(Uwaga, warunek brzegowy jest zadany tylko na wlocie).

Jest to zagadnienie hiperboliczne, którego nie będziemy teraz omawiać, warto jednak wspomnieć, że:

brak dyfuzji sprawia, że informacja jest propagowana ‘ostro’ wzdłuż linii prądu od brzegu wlotowego do wylotu. W szczególności, jeśli w pewnym punkcie  $\underline{x}$  należącym do brzegu  $\Gamma_-$  występuje nieciągłość danych wejściowych, to rozwiązanie będzie nieciągłe wzdłuż całej linii prądu wychodzącej z  $\underline{x}$ .

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \text{ w } \Omega = [0,1] \times [0,1]$$

$$\underline{\beta} = (1,0)$$

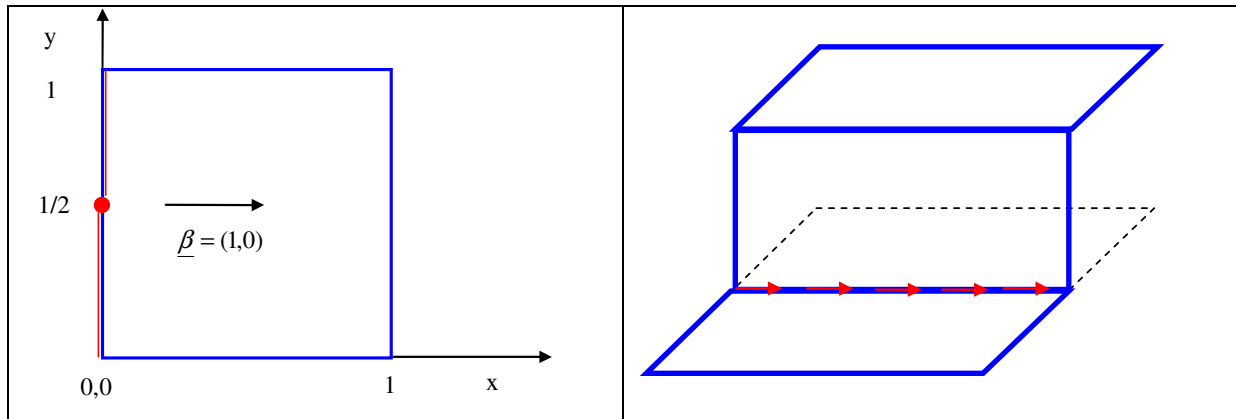
Warunek brzegowy:

$$u(0, y) = \begin{cases} 0, & 0 < y < 1/2 \\ 1, & 1/2 \leq y < 1 \end{cases}$$

Rozwiązanie:

$$u(x, y) = \begin{cases} 0, & 0 < y < 1/2, \quad 0 < x < 1 \\ 1, & 1/2 \leq y < 1, \quad 0 < x < 1 \end{cases}$$

posiada nieciągłość wzdłuż linii prądu  $(x, y) = (x, 1/2)$ .



Trudności pojawiają się również w przypadku gdy  $K/|\beta| \neq 0$  ale jest małe. Obecność dyfuzji sprawia, że rozwiązanie jest ciągłe, zaś ‘nieciągłość’ jest w wyniku jej działania ‘rozmywana’.

Jeśli na brzegu wylotowym  $\Gamma_+$  założy się warunek Dirichleta, to wtedy najczęściej rozwiązanie zagadnienia posiada warstwę brzegową (ang. *boundary layer*) w sąsiedztwie  $\Gamma_+$  o szerokości  $O(K)$  ze względu na szybką zmianę rozwiązania wymuszoną przez działanie warunku brzegowego na  $\Gamma_+$ .

### Walka z oscylacjami

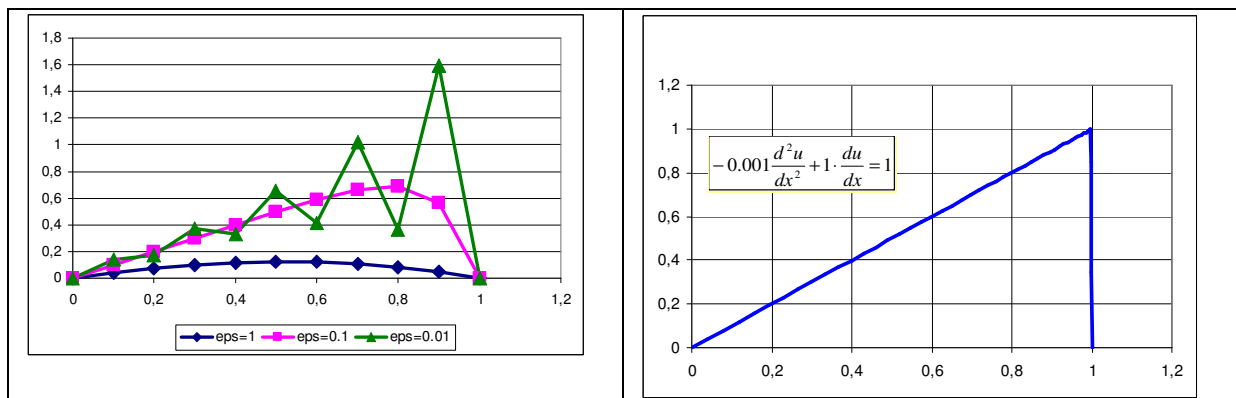
- **Zwiększenie liczby węzłów**, tak aby zapewnić spełnienie warunku  $Pe < 0$ .
- **Lokalne zagęszczenie dyskretyzacji w sąsiedztwie frontu.**

Skoro problemy wynikają z dużego skoku rozwiązania, należy się spodziewać, że zagęszczenie siatki w sąsiedztwie punktu  $x=1$  powinno przynieść poprawę rozwiązania przybliżonego.

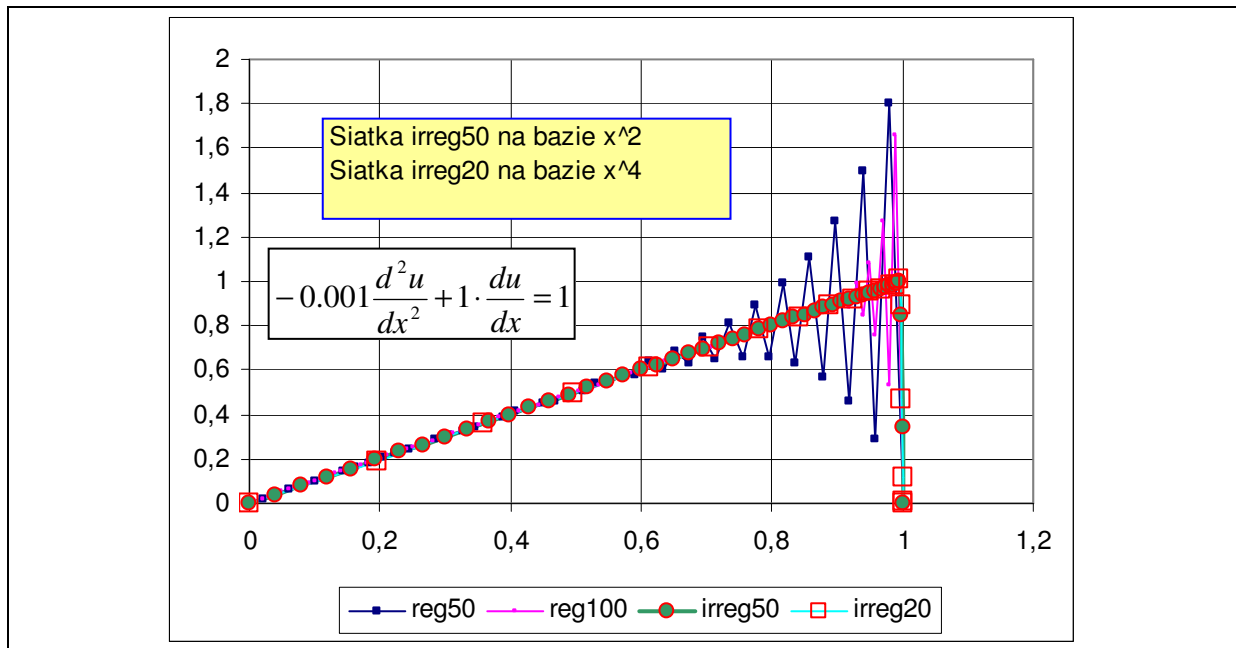
**UWAGA:** W dalszym ciągu prezentowane są wyniki uzyskane dla zagadnienia:

$$-\varepsilon \frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{du}{dx} = 1 \text{ w } (0, 1)$$

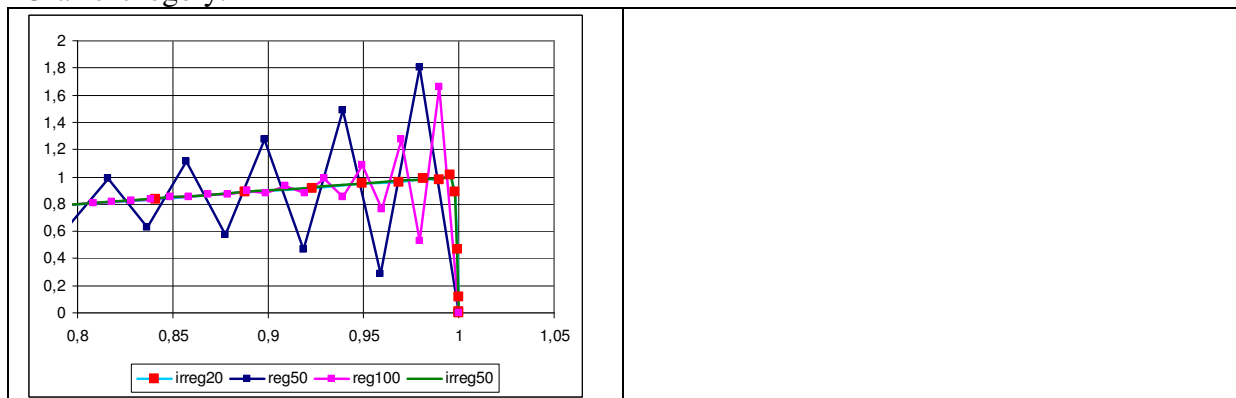
$$u(0) = 0, \quad u(1) = 0$$



Wykorzystanie zmodyfikowanej dyskretyzacji przynosi widoczną poprawę:



Oraz szczegóły:



- **Metody typu ‘upwind’ – metoda Petrova-Galerkina**

- **Metody typu ‘upwind’ – metoda Petrova-Galerkina**

Metody typu ‘upwind’ zmierzają do tego, aby w dyskretyzacji członu adwekcyjnego w większym stopniu wykorzystać informacje nadchodzące z przepływem. Tymczasem standardowe funkcje bazowe, na przykład typu ‘kapeluszowego’, są symetryczne względem ‘swojego’ węzła. Pomysł: należy zaburzyć tę symetrię.

Typowa ‘zgodna z prądem’ procedura elementu skończonego może być interpretowana jako metoda ważonych residuów, w której funkcje testowe nie są takie same jak funkcje próbne (wagowe), ale posiadają pewne obciążenie zgodne z przepływem. Takie sformułowanie nosi nazwę sformułowania *Petrova-Galerkina*.

Aproksymacja Petrova-Galerkina dla zagadnienia z przykładu jest następująca:

Znaleźć  $u_h \in H_h^1(\Omega)$  taką, że dla każdej funkcji  $\omega_h \in \hat{H}_h^1(\Omega)$  zachodzi

$$\int_{\Omega} \varepsilon \frac{du_h}{dx} \frac{d\omega_h}{dx} dx + \int_{\Omega} \frac{du_h}{dx} \omega_h dx = \int_{\Omega} 1 \cdot \omega_h dx$$

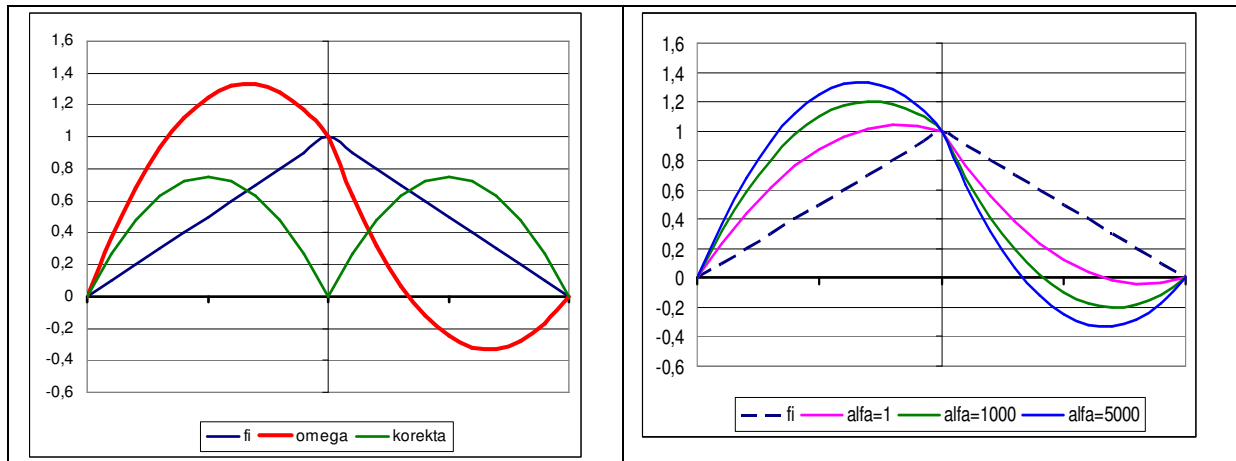
W sformułowaniu Petrova-Galerkina przestrzenie  $H_h^1(\Omega)$  i  $\hat{H}_h^1(\Omega)$  są różne, ale każda z nich zawiera się w przestrzeni rozwiązań dokładnych  $H^1(\Omega)$ .

Konstrukcja przestrzeni  $H_h^1(\Omega)$  i  $\hat{H}_h^1(\Omega)$

Funkcje bazowe  $\varphi_i \in H_h^1(\Omega)$  są standardowymi funkcjami kapeluszowymi.

Cały *trick* kryje się w konstrukcji funkcji wagowych  $\omega_i \in \hat{H}_h^1(\Omega)$ , które powstają poprzez dodanie lub odjęcie funkcji kwadratowej znikającej w węzłach do/od funkcji  $\varphi_i$ .

Idee przedstawiają poniższe rysunki:

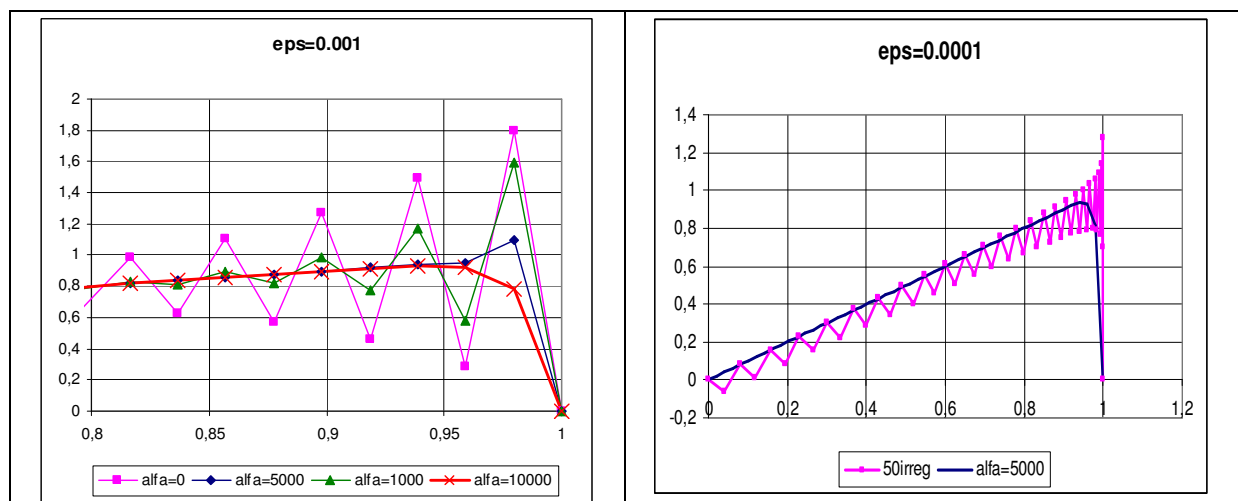
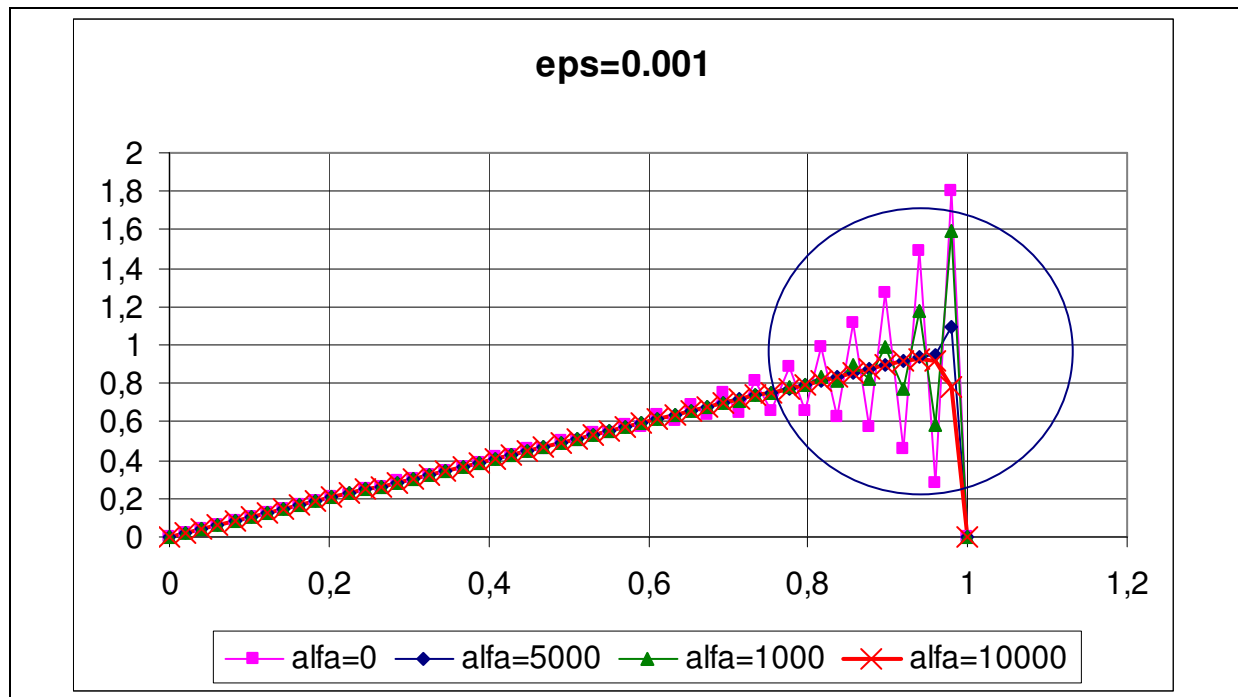


$$\omega_i(x) = \begin{cases} \varphi_i(x) + \frac{\alpha}{h} N\left(\frac{x-x_{i-1}}{h}\right) & \text{jeśli } x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ \varphi_i(x) - \frac{\alpha}{h} N\left(\frac{x_{i+1}-x}{h}\right) & \text{jeśli } x_i \leq x < x_{i+1} \end{cases}$$

gdzie  $N(\xi) = 3\xi(1-\xi)$ .

Parametr  $\alpha$  ma taki sam znak jak  $\beta$  (prędkość konwekcji), a zatem funkcje wagowe są skierowane zgodnie z prądem (ang. *upwind*).

Wyniki obliczeń wykorzystujących metodę Petrova-Galerkina do rozwiązania zadania przykładowego są przedstawione poniżej:



Uzyskane wyniki pokazują, że istnieje możliwość pozbycia się oscylacji. Jednakże, nawet gołym okiem widać, że rozwiązanie numeryczne jest ‘wygładzone’ w porównaniu z rozwiązaniem dokładnym. ‘Winę’ ponosi sztuczna dyfuzja (*artificial diffusion*), nazywana też *numeryczną lepkością (numerical viscosity)*

Wyjaśnienia tego faktu dostarcza metoda różnic skończonych:

**Uwaga na temat działania metody różnic skończonych**

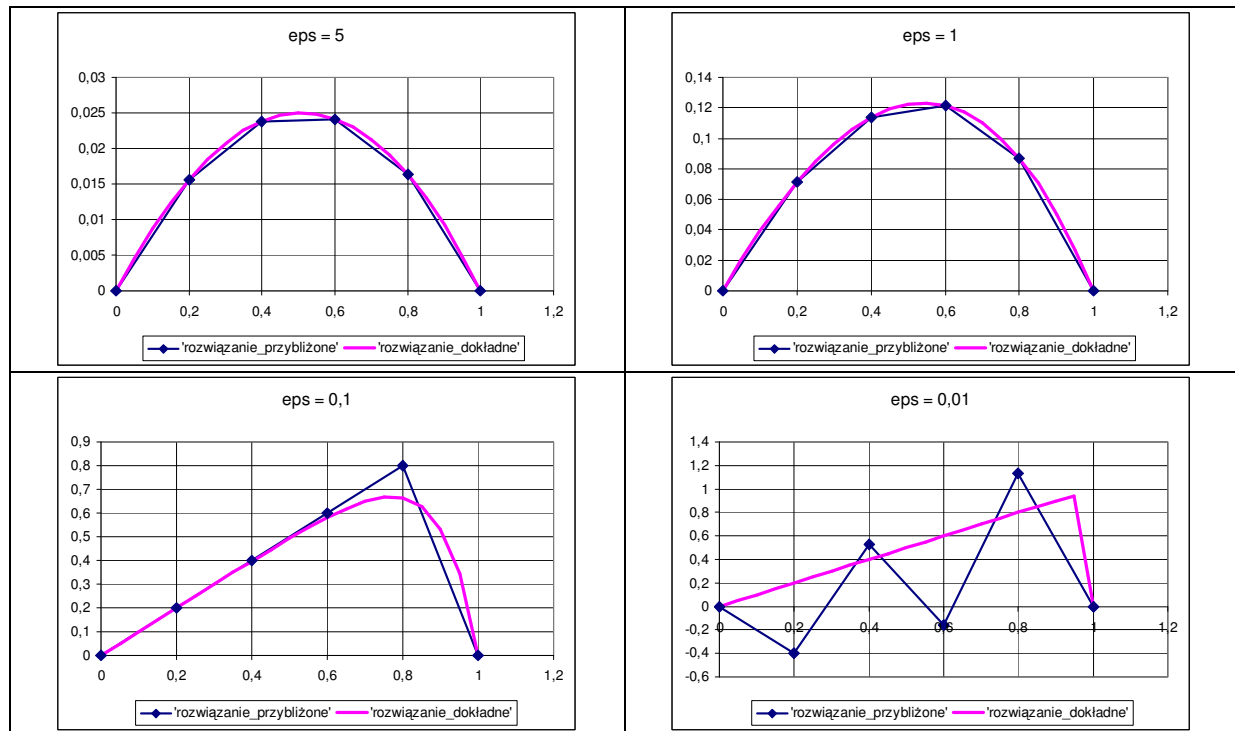
- Dyskretyzacja członu dyfuzyjnego:

$$-\varepsilon \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2}$$

- Dyskretyzacja pierwszej pochodnej – kilka sposobów

Schemat centralny rzędu drugiego  $\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h}$  można traktować jako odpowiednik 'symetrycznej' aproksymacji metodą elementu skończonego. Efektem jego działania są również oscylacje...

Wyniki uzyskane dla różnych wartości  $\varepsilon$  są następujące:



Wyjaśnienie: w miarę jak  $\varepsilon$  zbliża się do zera w warstwie granicznej zagadnienia ciągłego pochodna  $\frac{du}{dx}$  przyjmuje dowolnie duże wartości podczas gdy sama funkcja  $u$  pozostaje ograniczona. Z drugiej strony ustalona siatka nie daje możliwości reprezentowania dowolnie dużych wartości gradientu.

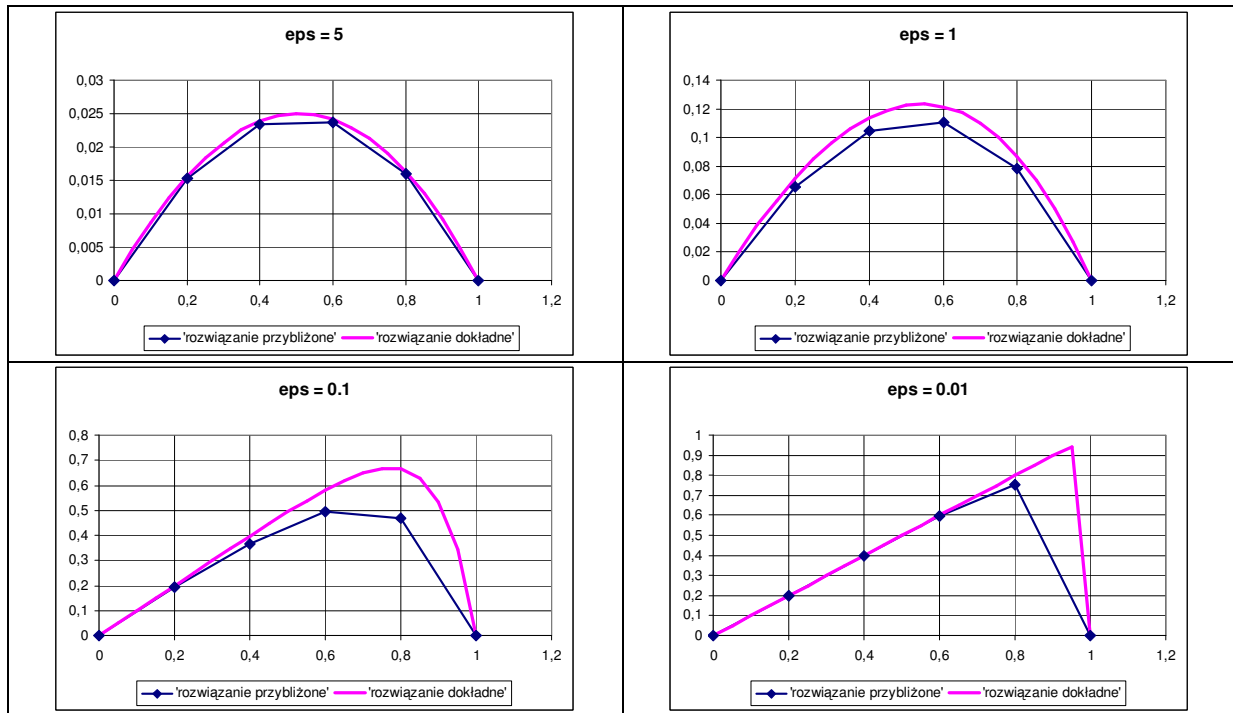
Remedium: wykorzystanie schematu jednostronnego zgodnego z kierunkiem przepływu – tak aby wykorzystywać informacje dopływające.

$$\frac{u_i - u_{i-1}}{h} \text{ gdy } \beta > 0, \text{ oraz}$$

$$\frac{u_{i+1} - u_i}{h} \text{ gdy } \beta < 0.$$

Bez względu na wartości  $\varepsilon$ ,  $\beta$ ,  $h$  oscylacje nie występują. Należy zwrócić uwagę na fakt, że dla małych  $\varepsilon$  rozwiązanie zagadnienia praktycznie nie zależy od warunku na brzegu wyjściowym ( $u$  na jest to  $x=1$ ).

Po zastąpieniu centralnego schematu aproksymującego czynnik adwekcyjny schematem lewostronnym. Tak wyglądają wyniki:



Schemat ‘upwind’ można interpretować jako aproksymację Petrowa-Galerkina.

### Podsumowanie

Dyskretyzacja składnika adwekcyjnego  $\underline{\beta} \cdot \nabla u$

- Jest przyczyną otrzymania niesymetrycznego układu równań;
- Powoduje mnóstwo kłopotów natury numerycznej. Z tym problemem spotkamy się ponownie omawiając zagadnienia związane z równaniami parabolicznymi.
- Zastosowanie standardowych metod (np. Galerkin) w przypadku gdy dominuje człon adwekcyjny powoduje występowanie niefizycznych oscylacji w sąsiedztwie frontów.
- Próby ich zwalczania najczęściej są przyczyną zbyt dużej, w porównaniu z fizyczną, dyfuzji, w wyniku której następuje ‘rozmazywianie’ (ang. *smear*) ostrych frontów i nieciągłości rozwiązania.