Ukázkové řešení

1 Zadání

Uvažujme parciální diferenciální rovnici popisující chování znečištění vypuštěného do řeky
$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\,\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v\,\frac{\partial c}{\partial x}$$
kde $c(x,t)$ je koncentrace chemické látky, $D = 1.5\ \mathrm{m}^2/\mathrm{s}$ je disperzní koeficient a $v = 0.8\ \mathrm{m/s}$ je rychlost proudění řeky.

Zajímá nás jak se mění koncentrace znečištění v půlkilometrovém úseku řeky po dobu 5 minut. Na začátku a na konci vymezeného úseku řeky uvažujeme nulovou koncentraci znečištění.

Počáteční koncentrace znečištění je dána

$$c(x,0) = 0.1\ e^{-\frac{(x-50)^2}{200}}$$

Řešte tuto úlohu metodou sítí:

a) Odvoďte metodou Crank-Nicolsonové diferenční formuli pro obecné n a m.

b) Spočtěte řešení úlohy pro prostorový krok $h = 5\,\mathrm{m}$ a pro časový krok $k = 5\,\mathrm{s}$. Vykreslete grafy koncetrace znečištění v časech $t = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ minut a 3D graf řešení $c(x,t)$.

c) Spočtěte řešení úlohy pro prostorový krok $h = 10\,\mathrm{m}$ a pro časový krok $k = 5\,\mathrm{s}$. V řešení se vyskytnou nefyzikální oscilace (koncentrace bude záporná). Tomuto jevu se dá zabránit použijeme-li pro náhradu $\frac{\partial c}{\partial x}$ zpětnou diferenci místo centrální. Srovnejte tyto dvě řešení v čase $t = 5$ minut.

2 Řešení

a) Při řešení této úlohy pomocí Cranka–Nicolsonové formule (CN) vytvoříme nejdříve síť s uzly $[x_i, t_j]$, kde

$$
\begin{aligned}
0 &= x_0 < x_1 < \cdots < x_n = 500\,, \qquad & x_{i+1} = x_i + h\,,\ \text{kde } h = \tfrac{500}{n}\,,\\
0 &= t_0 < t_1 < \cdots < t_m = 300\,, \qquad & t_{j+1} = t_j + k\,,\ \text{kde } k = \tfrac{300}{m}\,.
\end{aligned}
$$

Přibližnou hodnotu řešení v uzlu $[x_i, t_j]$ budeme značit c_i^j, tedy

$$c_i^j \cong c(x_i, t_j)\,, \quad i = 0, \ldots, n\,,\ j = 0, 1, 2, \cdots, m.$$

Hodnoty v 0-té časové vrstvě dostaneme z počáteční podmínky

$$c_i^0 = c(x_i, 0) = 0.1\ e^{-\frac{(x(i)-50)^2}{200}}, \quad i = 0, \ldots, n\,.$$

Z okrajových podmínek dostáváme

$$c_0^j = c(0, t_j) = 0, \quad c_n^j = c(1, t_j) = 0, \quad j = 0, 1, \ldots, m-1\,.$$

Levou stranu parciální diferenciální rovnice nahradíme zpětnou diferencí. Pravou stranu budeme aproximovat tak, že zprůměrujeme aproximaci v $(j+1)$-ní časové vrstvě a aproximaci v j-té časové vrstvě. Pro aproximaci $\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$ použijeme centrální diferenci a pro aproximaci $\frac{\partial c}{\partial x}$ také centrální diferenci

Tedy

$$\frac{c_i^{j+1} - c_i^j}{k} = \frac{1}{2}\left(D\ \frac{c_{i-1}^{j+1} - 2c_i^{j+1} + c_{i+1}^{j+1}}{h^2} - v\ \frac{c_{i+1}^{j+1} - c_{i-1}^{j+1}}{2h} \right) +$$

$$+\frac{1}{2}\left(D\ \frac{c_{i-1}^{j} - 2c_i^{j} + c_{i+1}^{j}}{h^2} - v\ \frac{c_{i+1}^{j} - c_{i-1}^{j}}{2h} \right),\ j = 0, \ldots, m-1, i = 1, \ldots, n-1$$

Dále použijeme označení $\alpha = \frac{k}{h^2}$ a $\beta = \frac{k}{2h}$. Po úpravě dostáváme výslednou CN formuli pro výpočet hledaných hodnot v $(j+1)$-ním časovém kroku pro $i = 1, \ldots, n-1$:

$$\frac{1}{2}(-\alpha D - \beta v)c_{i-1}^{j+1} + (1 + \alpha D)c_i^{j+1} + \frac{1}{2}(-\alpha D + \beta v)c_{i+1}^{j+1} =$$

$$= \frac{1}{2}(\alpha D + \beta v)c_{i-1}^{j} + (1 - \alpha D)c_i^{j} + \frac{1}{2}(\alpha D - \beta v)c_{i+1}^{j}$$

Celá $(j+1)$-ní vrstva, tedy vektor $\boldsymbol{u}^{j+1} = \left(u_1^{j+1}, \dots, u_{n-1}^{j+1}\right)^\top$ se bude vyhodnocovat ze soustavy rovnic najednou. Řešení u_0 a u_n známe z okrajových podmínek. Soustavu můžeme zapsat maticově:

$$A\boldsymbol{u}^{j+1} = B\boldsymbol{u}^j$$

kde $\boldsymbol{u}^{j+1}$ je hledaný vektor v další časové vrstvě,

$$A = \begin{bmatrix} (1+\alpha D) & \frac{1}{2}(-\alpha D + \beta v) & 0 & \dots & 0 \\ \frac{1}{2}(-\alpha D - \beta v) & (1+\alpha D) & \frac{1}{2}(-\alpha D + \beta v) & \dots & 0 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & \dots & \frac{1}{2}(-\alpha D - \beta v) & (1+\alpha D) & \frac{1}{2}(-\alpha D + \beta v) \\ 0 & \dots & 0 & \frac{1}{2}(-\alpha D - \beta v) & (1+\alpha D) \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} (1-\alpha D) & \frac{1}{2}(\alpha D - \beta v) & 0 & \dots & 0 \\ \frac{1}{2}(\alpha D + \beta v) & (1-\alpha D) & \frac{1}{2}(\alpha D - \beta v) & \dots & 0 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & \dots & \frac{1}{2}(\alpha D + \beta v) & (1-\alpha D) & \frac{1}{2}(\alpha D - \beta v) \\ 0 & \dots & 0 & \frac{1}{2}(\alpha D + \beta v) & (1-\alpha D) \end{bmatrix}$$

c) Při použití zpětné diference pro aproximaci advekčního členu

$$\frac{\partial c}{\partial x} \cong \frac{c_i^{j+1} - c_{i-1}^{j+1}}{h}$$

dostaneme soustavu lineárních rovnic ve tvaru

$$(-\frac{1}{2}\alpha D - \beta v)\, c_{i-1}^{j+1} + (1 + \alpha D + \beta v)\, c_i^{j+1} - \frac{1}{2}\alpha D\, c_{i+1}^{j+1} =$$

$$= (\frac{1}{2}\alpha D + \beta v)\, c_{i-1}^{j} + (1 - \alpha D - \beta v)\, c_i^{j} + \frac{1}{2}\alpha D\, c_{i+1}^{j}, \quad i = 1, \dots, n-1$$

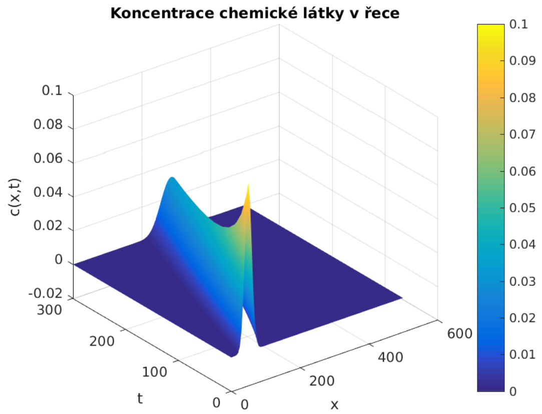
3 Řešení v matlabu

Matlab Code

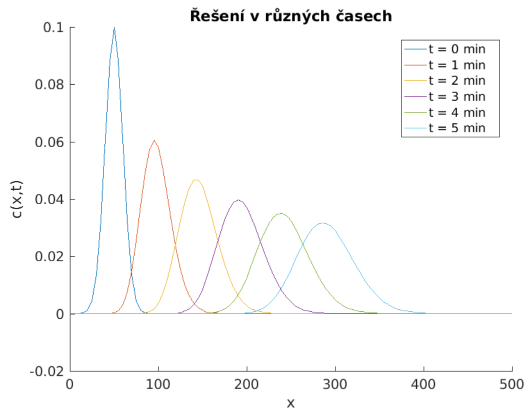
```
L = 500; % usek reky 500m
T = 300; % 5 minut
D = 1.5; % disperzni koeficient [m^2/s]
v = 0.8; % rychlost proudeni reky [m/s]

a = 0; b = L;

% sit v x:
n = 100;
h = (b-a)/n;
x = a:h:b;

% sit v t:
m = 60;
k = T/m;
t = (0:k:m*k)';

% koncentrace znecisteni
c1 = zeros(m+1,n+1); % s centralni formuli pro advekci
c2 = zeros(m+1,n+1); % se zpetnou formuli pro advekci

alpha = k/(h*h);
beta = k/(2*h);

% pocatecni podminka
for i = 1:n+1
    c1(1,i) = init_concentration(x(i));
    c2(1,i) = init_concentration(x(i));
end

% reseni na (j+1) casove vrstve
for j = 1:m
        % vypocet diagonal d1,d2,d3 a prave strany rhs
        for i = 2:n
            % centralni formule
            d1_c(i-1)  = 0.5 * (-alpha * D - beta * v);
```

```
            d2_c(i-1)  = 1 + alpha * D;
            d3_c(i-1)  = 0.5 * (-alpha * D + beta * v);
            rhs_c(i-1) = (1 - alpha * D) * c1(j,i) + 0.5 * (alpha * D + beta * v) * c1(j,i-1) + 0.5 * (alpha * D - beta * v) * c1(j,i+1);
           % zpetna formule
            d1_z(i-1)  = 0.5 * (-alpha * D - 2 * beta * v);
            d2_z(i-1)  = 1 + alpha * D + beta * v;
            d3_z(i-1)  = 0.5 * (-alpha * D);
            rhs_z(i-1) = (1 - alpha * D - beta * v) * c2(j,i) + 0.5 * (alpha * D + 2 * beta * v) * c2(j,i-1) + 0.5 * (alpha * D) * c2(j,i+1);
        end
        % reseni soustavy linearnich rovnic s tridiagonalni matici
        % reseni c ve vnitrnich uzlech site
        c_c = TriDiagonalSolve(d1_c,d2_c,d3_c,rhs_c);
        c_z = TriDiagonalSolve(d1_z,d2_z,d3_z,rhs_z);
        % v krajnich uzlech je reseni nulove
        for i = 2:n
          c1(j+1,i) = c_c(i-1);
          c2(j+1,i) = c_z(i-1);
        end
end
```

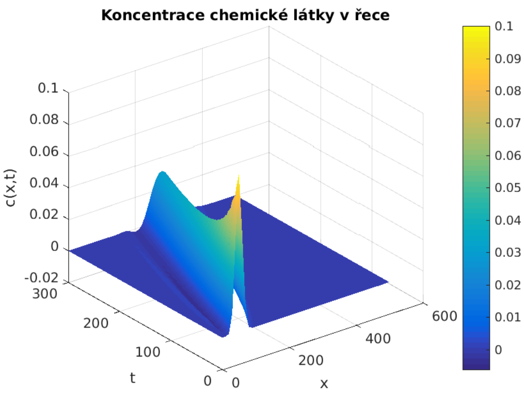
4 Výsledky



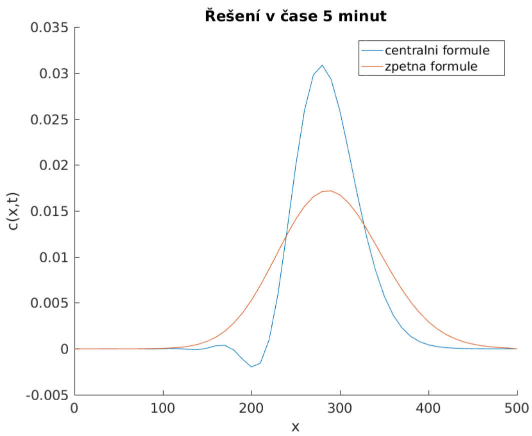
Obrázek 1: Řešení na síti s krokem $h = 5\text{m}$ a $k = 5\text{s}$ s použitím centrální formule pro aproximaci $\frac{\partial c}{\partial x}$.



Obrázek 2: Koncentrace chemické látky v časech $t = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ minut. Chemická látka se rozptyluje do okolí a pohybuje spolu s proudem řeky.



Obrázek 3: Řešení na síti s krokem $h = 10$m a $k = 5$s s použitím centrální formule pro aproximaci $\frac{\partial c}{\partial x}$. Prostorový krok je příliš velký a v řešení se vyskytují nefyzikální oscilace.



Obrázek 4: Srovnání řešení na síti s krokem $h = 10$m a $k = 5$s v čase 5 minut při použití centrální a zpětné formule. Při použití zpětné formule se vyhneme nefyzikálním oscilacím, ale řešení má menší přesnost.