IMEX sémák reakció-diffúzió egyenletek numerikus megoldására

Izsák Ferenc
ELTE TTK Alkalmazott Analízis és Számításmatematikai Tanszék
Munkatársak: Faragó István és Szabó Tamás

FRK Szeminárium, BME,
Budapest, 2012. október 18.

Az előadás vázlata

- Reakció-diffúzió egyenletek

Az előadás vázlata

- Reakció-diffúzió egyenletek
  - Numerikus megoldásuk

Az előadás vázlata

- Reakció-diffúzió egyenletek
  - Numerikus megoldásuk
- Egy új IMEX módszer

Az előadás vázlata

- Reakció-diffúzió egyenletek
  - Numerikus megoldásuk
- Egy új IMEX módszer
  - Tulajdonságai

Az előadás vázlata

- Reakció-diffúzió egyenletek
  - Numerikus megoldásuk
- Egy új IMEX módszer
  - Tulajdonságai
- Alkalmazás

Az előadás vázlata

- Reakció-diffúzió egyenletek
  - Numerikus megoldásuk
- Egy új IMEX módszer
  - Tulajdonságai
- Alkalmazás
  - Egy numerikus kísérlet

Reakció-diffúzió egyenletek

- Általános alakjuk

$$\partial_t \mathbf{u}(t,\mathbf{x}) = \Delta \mathbf{u}(t,\mathbf{x}) + F(\mathbf{u}(t,\mathbf{x})),$$

ahol

Reakció-diffúzió egyenletek

- Általános alakjuk

$$\partial_t \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) = \Delta \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) + F(\mathbf{u}(t, \mathbf{x})),$$

ahol

- $\mathbf{u} : (0, T) \times \Omega \to \mathbb{R}^N$ az ismeretlen függvény

Reakció-diffúzió egyenletek

- Általános alakjuk

$$\partial_t \mathbf{u}(t,\mathbf{x}) = \Delta \mathbf{u}(t,\mathbf{x}) + F(\mathbf{u}(t,\mathbf{x})),$$

ahol

- $\mathbf{u} : (0, T) \times \Omega \to \mathbb{R}^N$ az ismeretlen függvény
  - komponensei: az egyes „anyagfajták” koncentrációi

Reakció-diffúzió egyenletek

- Általános alakjuk

$$\partial_t \mathbf{u}(t,\mathbf{x}) = \Delta \mathbf{u}(t,\mathbf{x}) + F(\mathbf{u}(t,\mathbf{x})),$$

ahol

- $\mathbf{u} : (0, T) \times \Omega \to \mathbb{R}^N$ az ismeretlen függvény
  - komponensei: az egyes „anyagfajták” koncentrációi
- $F : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ adott függvény (általában nemlineáris, a „reakciót” modellezi)

Reakció-diffúzió egyenletek

- Általános alakjuk

$$\partial_t \mathbf{u}(t,\mathbf{x}) = \Delta \mathbf{u}(t,\mathbf{x}) + F(\mathbf{u}(t,\mathbf{x})),$$

ahol

- $\mathbf{u} : (0, T) \times \Omega \to \mathbb{R}^N$ az ismeretlen függvény
  - komponensei: az egyes „anyagfajták” koncentrációi
- $F : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ adott függvény (általában nemlineáris, a „reakciót” modellezi)
- a fenti egyenletre vonatkozó feladathoz: kezdeti- és peremfeltételek

Reakció-diffúzió egyenletek

- Általános alakjuk

$$\partial_t \mathbf{u}(t,\mathbf{x}) = \Delta \mathbf{u}(t,\mathbf{x}) + F(\mathbf{u}(t,\mathbf{x})),$$

ahol

- $\mathbf{u} : (0, T) \times \Omega \to \mathbb{R}^N$ az ismeretlen függvény
  - komponensei: az egyes „anyagfajták" koncentrációi
- $F : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ adott függvény (általában nemlineáris, a „reakciót" modellezi)
- a fenti egyenletre vonatkozó feladathoz: kezdeti- és peremfeltételek
  - Neumann - peremfeltételek

Reakció-diffúzió egyenletek

- Általános alakjuk

$$\partial_t \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) = \Delta \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) + F(\mathbf{u}(t, \mathbf{x})),$$

ahol

- $\mathbf{u} : (0, T) \times \Omega \to \mathbb{R}^N$ az ismeretlen függvény
  - komponensei: az egyes „anyagfajták” koncentrációi
- $F : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ adott függvény (általában nemlineáris, a „reakciót” modellezi)
- a fenti egyenletre vonatkozó feladathoz: kezdeti- és peremfeltételek
  - Neumann - peremfeltételek

- Alkalmazás: kémiai reakciók, biokémiai folyamatok, populációdinamika

Megoldásuk - folytonos eset

- Csak akkor nem értelmezhető t-ben megoldás, ha előtte u nem korlátos.

Megoldásuk - folytonos eset

- Csak akkor nem értelmezhető t-ben megoldás, ha előtte u nem korlátos.
  - Ezt gyakran a modell tulajdonságai (pl. össz anyagmennyiség megmaradása + pozitivitás) miatt lehetetlen.

Megoldásuk - folytonos eset

- Csak akkor nem értelmezhető t-ben megoldás, ha előtte u nem korlátos.
  - Ezt gyakran a modell tulajdonságai (pl. össz anyagmennyiség megmaradása + pozitivitás) miatt lehetetlen.
- Cél: adott t esetén $u(t, \cdot)$ közelítése.

Numerikus megoldásuk - egy módszercsalád

- Véges differencia + vonalak módszere

Numerikus megoldásuk - egy módszercsalád

- Véges differencia + vonalak módszere
  - Időbeli diszkretizáció: t_j időpontok $\subset (0, T)$,
    térbeli diszkretizáció: $\mathbf{x}_k$ rácspontok $\subset \bar{\Omega}$, $\Omega_h = \cup\, \mathbf{x}_k$

Numerikus megoldásuk - egy módszercsalád

- Véges differencia + vonalak módszere
  - Időbeli diszkretizáció: t_j időpontok $\subset (0, T)$, térbeli diszkretizáció: $\mathbf{x}_k$ rácspontok $\subset \bar{\Omega}$, $\Omega_h = \cup\, \mathbf{x}_k$
  - Ismeretlenek: a fenti időponotokban az egyes rácspontokban felvett függvényértékek közelítései: $\mathbf{u}_k^j \approx \mathbf{u}(t_j, \mathbf{x}_k)$.

Numerikus megoldásuk - egy módszercsalád

- Véges differencia + vonalak módszere
  - Időbeli diszkretizáció: t_j időpontok $\subset (0, T)$, térbeli diszkretizáció: $\mathbf{x}_k$ rácspontok $\subset \bar{\Omega}$, $\Omega_h = \cup \mathbf{x}_k$
  - Ismeretlenek: a fenti időponotokban az egyes rácspontokban felvett függvényértékek közelítései: $\mathbf{u}_k^j \approx \mathbf{u}(t_j, \mathbf{x}_k)$.
  - A deriváltakat véges differenciákkal közelítjük.

Numerikus megoldásuk - egy módszercsalád

- Véges differencia + vonalak módszere
  - Időbeli diszkretizáció: t_j időpontok $\subset (0, T)$, térbeli diszkretizáció: $\mathbf{x}_k$ rácspontok $\subset \bar{\Omega}$, $\Omega_h = \cup \mathbf{x}_k$
  - Ismeretlenek: a fenti időponotokban az egyes rácspontokban felvett függvényértékek közelítései: $\mathbf{u}_k^j \approx \mathbf{u}(t_j, \mathbf{x}_k)$.
  - A deriváltakat véges differenciákkal közelítjük.
  - Egy adott időpontbeli értékeket „egyszerre” számítunk ki.

Numerikus megoldásuk - egy módszercsalád

- Véges differencia + vonalak módszere
  - Időbeli diszkretizáció: t_j időpontok $\subset (0, T)$, térbeli diszkretizáció: $\mathbf{x}_k$ rácspontok $\subset \bar{\Omega}$, $\Omega_h = \cup\, \mathbf{x}_k$
  - Ismeretlenek: a fenti időponotokban az egyes rácspontokban felvett függvényértékek közelítései: $\mathbf{u}_k^j \approx \mathbf{u}(t_j, \mathbf{x}_k)$.
  - A deriváltakat véges differenciákkal közelítjük.
  - Egy adott időpontbeli értékeket „egyszerre” számítunk ki.
  - Ismertek: kezdeti időpontbeli értékek, értékek a peremeken.

Numerikus megoldásuk - speciális eljárások.

- Explicit módszer

Numerikus megoldásuk - speciális eljárások.

- Explicit módszer
  - Rögz. j-re $\mathbf{u}_k^j$ értékeinek kiszámításához $\mathbf{u}_k^{j-1}$, $\mathbf{u}_k^{j-2}$ stb. értékeket használjuk (azokat expliciten megadjuk).

Numerikus megoldásuk - speciális eljárások.

- Explicit módszer
  - Rögz. j-re $\mathbf{u}_k^j$ értékeinek kiszámításához $\mathbf{u}_k^{j-1}$, $\mathbf{u}_k^{j-2}$ stb. értékeket használjuk (azokat expliciten megadjuk).
    - Előny: egyszerű, gyors(?).

Numerikus megoldásuk - speciális eljárások.

- Explicit módszer
  - Rögz. j-re $\mathbf{u}_k^j$ értékeinek kiszámításához $\mathbf{u}_k^{j-1}$, $\mathbf{u}_k^{j-2}$ stb. értékeket használjuk (azokat expliciten megadjuk).
    - Előny: egyszerű, gyors(?).
    - Hátrány: az időlépés hosszát korlátozni kell (gyakran csak kicsi lehet - lassú a szimuláció).

Numerikus megoldásuk - speciális eljárások.

- Explicit módszer
  - Rögz. j-re $\mathbf{u}_k^j$ értékeinek kiszámításához $\mathbf{u}_k^{j-1}$, $\mathbf{u}_k^{j-2}$ stb. értékeket használjuk (azokat expliciten megadjuk).
    - Előny: egyszerű, gyors(?).
    - Hátrány: az időlépés hosszát korlátozni kell (gyakran csak kicsi lehet - lassú a szimuláció).

- Egy példa - adott $g \in C(\Omega)$ esetén a

$$\begin{cases} \partial_t u(t,x,y) = \Delta_{x,y} u(t,x,y) + F(u(t,x,y)), & t \in (0,T),\ (x,y) \in \\ u(t,\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega \\ u(0,\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) \quad \mathbf{x} \in \Omega \end{cases}$$

feladat megoldásának közelítésére vonatkozó alábbi séma:

Numerikus megoldásuk - speciális eljárások - folytatás

- Az explicit séma:

$$\begin{cases} u_{k,l}^0 = g(x_k, y_l), \quad (x_k, y_l) \in \Omega_h \\ u_{k,l}^j = u_{k,l}^{j-1} + \frac{\delta}{h_x^2}(u_{k-1,l}^{j-1} - 2u_{k,l}^{j-1} + u_{k+1,l}^{j-1}) + \frac{\delta}{h_y^2}(u_{k,l-1}^{j-1} - 2u_{k,l}^{j-1} + u \\ \text{szomszédjai} : u_{k\pm1,l\pm1}^j \in \Omega_h. \end{cases}$$

a peremfeltételek figyelembevételével.

Numerikus megoldásuk - speciális eljárások - folytatás

- Az explicit séma:

$$\begin{cases} u_{k,l}^0 = g(x_k, y_l), \quad (x_k, y_l) \in \Omega_h \\ u_{k,l}^j = u_{k,l}^{j-1} + \frac{\delta}{h_x^2}(u_{k-1,l}^{j-1} - 2u_{k,l}^{j-1} + u_{k+1,l}^{j-1}) + \frac{\delta}{h_y^2}(u_{k,l-1}^{j-1} - 2u_{k,l}^{j-1} + u \\ \text{szomszédjai} : u_{k\pm1,l\pm1}^j \in \Omega_h. \end{cases}$$

  a peremfeltételek figyelembevételével.

- lineáris rendszert kapunk.

Numerikus megoldásuk - speciális eljárások - folytatás

- Az explicit séma:

$$\begin{cases} u_{k,l}^{0} = g(x_k, y_l), \quad (x_k, y_l) \in \Omega_h \\ u_{k,l}^{j} = u_{k,l}^{j-1} + \frac{\delta}{h_x^2}(u_{k-1,l}^{j-1} - 2u_{k,l}^{j-1} + u_{k+1,l}^{j-1}) + \frac{\delta}{h_y^2}(u_{k,l-1}^{j-1} - 2u_{k,l}^{j-1} + u \\ \text{szomszédjai} : u_{k\pm1,l\pm1}^{j} \in \Omega_h. \end{cases}$$

  a peremfeltételek figyelembevételével.

- lineáris rendszert kapunk.
  - Korlátozás: $\delta = \mathcal{O}(h^2)$.

Numerikus megoldásuk - speciális eljárások - folytatás

- Implicit módszer

Numerikus megoldásuk - speciális eljárások - folytatás

- Implicit módszer
  - Rögz. j-re $\mathbf{u}_k^j$ értékeinek kiszámításához $\mathbf{u}_k^j$ értékeket használjuk, azaz ezekre egy (nemlineáris!!) rendszert kapunk.

Numerikus megoldásuk - speciális eljárások - folytatás

- Implicit módszer
  - Rögz. j-re $\mathbf{u}_k^j$ értékeinek kiszámításához $\mathbf{u}_k^j$ értékeket használjuk, azaz ezekre egy (nemlineáris!!) rendszert kapunk.
    - Előny: megfelelő módszerrel az időlépés hosszát nem kell korlátozni.

Numerikus megoldásuk - speciális eljárások - folytatás

- Implicit módszer
  - Rögz. j-re $\mathbf{u}_k^j$ értékeinek kiszámításához $\mathbf{u}_k^j$ értékeket használjuk, azaz ezekre egy (nemlineáris!!) rendszert kapunk.
    - Előny: megfelelő módszerrel az időlépés hosszát nem kell korlátozni.
    - Hátrány: összetett, minden lépésben extra egyenletet kell megoldani (ennek megoldását közelíteni).

Numerikus megoldásuk - közelítés III.

- Implicit - explicit (IMEX) módszer

Numerikus megoldásuk - közelítés III.

- Implicit - explicit (IMEX) módszer
  - Rögz. j-re $\mathbf{u}_k^j$ értékeinek kiszámításához $\mathbf{u}_k^j$, $\mathbf{u}_k^{j-1}$ stb. értékeket használjuk a $\Delta\mathbf{u}$ tag közelítésében (azokban implicit).

Numerikus megoldásuk - közelítés III.

- Implicit - explicit (IMEX) módszer
  - Rögz. j-re $\mathbf{u}_k^j$ értékeinek kiszámításához $\mathbf{u}_k^j$, $\mathbf{u}_k^{j-1}$ stb. értékeket használjuk a $\Delta\mathbf{u}$ tag közelítésében (azokban implicit).
  - Rögz. j-re $\mathbf{u}_k^j$ értékeinek kiszámításához $\mathbf{u}_k^{j-1}$, $\mathbf{u}_k^{j-2}$ stb. értékeket használjuk az $F(\mathbf{u})$ tag közelítésében (azokban explicit).

Numerikus megoldásuk - közelítés III.

- Implicit - explicit (IMEX) módszer
  - Rögz. j-re $\mathbf{u}_k^j$ értékeinek kiszámításához $\mathbf{u}_k^j$, $\mathbf{u}_k^{j-1}$ stb. értékeket használjuk a $\Delta\mathbf{u}$ tag közelítésében (azokban implicit).
  - Rögz. j-re $\mathbf{u}_k^j$ értékeinek kiszámításához $\mathbf{u}_k^{j-1}$, $\mathbf{u}_k^{j-2}$ stb. értékeket használjuk az $F(\mathbf{u})$ tag közelítésében (azokban explicit).

  - Előny: az időlépés hosszára enyhébb korlát, és a minden lépésben megoldandó rendszer lineáris.

A vizsgált egyenlet és diszkretizációja I.

A vizsgált egyenlet 1 dimenzióban, 1 „anyagfajtával":

$$\begin{cases} \partial_t u(t,x) = p(t,x)\partial_x(q(t,x)\partial_x u(t,x)) + F(t,x,u(t,x)), & t \in (0,T), \\ u(0,x) = u_0(x), \quad x \in I \\ \partial_x u(t,h_l) = u_l(t),\ \partial_x u(t,h_r) = u_r(t), & t \in (0,T), \end{cases}$$

ahol

- $I = (h_l, h_r) \subset \mathbb{R}$

A vizsgált egyenlet és diszkretizációja I.

A vizsgált egyenlet 1 dimenzióban, 1 „anyagfajtával”:

$$\begin{cases} \partial_t u(t,x) = p(t,x)\partial_x(q(t,x)\partial_x u(t,x)) + F(t,x,u(t,x)), \quad t \in (0,T), \\ u(0,x) = u_0(x), \quad x \in I \\ \partial_x u(t,h_l) = u_l(t),\ \partial_x u(t,h_r) = u_r(t), \quad t \in (0,T), \end{cases}$$

ahol

- $I = (h_l, h_r) \subset \mathbb{R}$
- $p, q \in C^1([0,T] \times I)$ adott együtthatófüggvények

A vizsgált egyenlet és diszkretizációja I.

A vizsgált egyenlet 1 dimenzióban, 1 „anyagfajtával":

$$\begin{cases} \partial_t u(t,x) = p(t,x)\partial_x(q(t,x)\partial_x u(t,x)) + F(t,x,u(t,x)), & t \in (0,T), \\ u(0,x) = u_0(x), \quad x \in I \\ \partial_x u(t,h_l) = u_l(t),\ \partial_x u(t,h_r) = u_r(t), & t \in (0,T), \end{cases}$$

ahol

- $I = (h_l, h_r) \subset \mathbb{R}$
- $p, q \in C^1([0,T] \times I)$ adott együtthatófüggvények
- $F \in C^1([0,T] \times I \times \mathbb{R})$ a reakciót leíró függvény

A vizsgált egyenlet és diszkretizációja I.

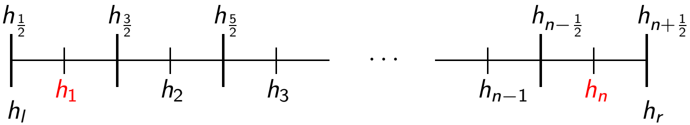
A vizsgált egyenlet 1 dimenzióban, 1 „anyagfajtával":

$$\begin{cases} \partial_t u(t,x) = p(t,x)\partial_x(q(t,x)\partial_x u(t,x)) + F(t,x,u(t,x)), & t \in (0,T), \\ u(0,x) = u_0(x), \quad x \in I \\ \partial_x u(t,h_l) = u_l(t),\ \partial_x u(t,h_r) = u_r(t), & t \in (0,T), \end{cases}$$

ahol

- $I = (h_l, h_r) \subset \mathbb{R}$
- $p, q \in C^1([0,T] \times I)$ adott együtthatófüggvények
- $F \in C^1([0,T] \times I \times \mathbb{R})$ a reakciót leíró függvény
- $u_l, u_r \in C^1[0,T]$ a Neumann-peremfeltételt megadó függvények.

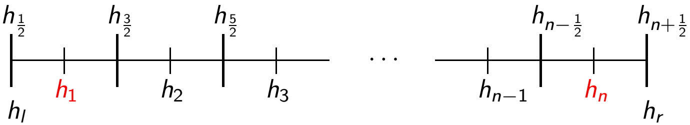
A vizsgált egyenlet és diszkretizációja II.



- Az ismeretlen értékek vektora a k-adik időlépésben:

$$\mathbf{u}^k = (u_1^k, u_2^k, \dots, u_n^k), \text{ ahol } u_j^k \approx u\,(t_k, h_j)$$

A vizsgált egyenlet és diszkretizációja II.

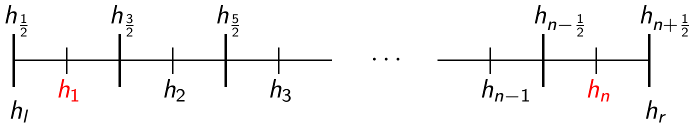


- Az ismeretlen értékek vektora a k-adik időlépésben:

$$\mathbf{u}^k = (u_1^k, u_2^k, \ldots, u_n^k), \text{ ahol } u_j^k \approx u(t_k, h_j)$$

- $h = h_{j+1} - h_j, \quad \tau = t_{k+1} - t_k$ - paraméterek

A vizsgált egyenlet és diszkretizációja II.

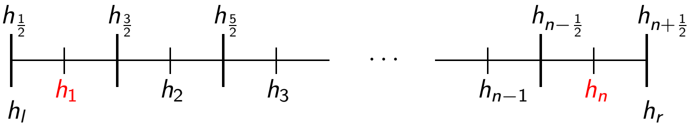


- Az ismeretlen értékek vektora a k-adik időlépésben:

$$\mathbf{u}^k = (u_1^k, u_2^k, \ldots, u_n^k), \text{ ahol } u_j^k \approx u(t_k, h_j)$$

- $h = h_{j+1} - h_j, \quad \tau = t_{k+1} - t_k$ - paraméterek
- $p_j^k = p(t_k, h_j)$ - az együtthatófüggvények

A vizsgált egyenlet és diszkretizációja II.



- Az ismeretlen értékek vektora a k-adik időlépésben:

$$\mathbf{u}^k = (u_1^k, u_2^k, \dots, u_n^k), \text{ ahol } u_j^k \approx u(t_k, h_j)$$

- $h = h_{j+1} - h_j, \quad \tau = t_{k+1} - t_k$ - paraméterek
- $p_j^k = p(t_k, h_j)$ - az együtthatófüggvények
- $\mathbf{F}(t_{k+1}, h, \mathbf{u}^k) = (F(t_{k+1}, h_1, u_1^k), \dots, F(t_{k+1}, h_n, u_n^k))^T$ - a reakciót leíró tagokból álló vektor a $k+1$-edik időlépésben.

A közelítő módszer

- $u_j^0 = u_0\left(h_j\right), \quad j = 1, 2, \ldots, n$ - az ismert kezdeti feltétellel.

A közelítő módszer

- $u_j^0 = u_0\left(h_j\right), \quad j = 1, 2, \ldots, n$ - az ismert kezdeti feltétellel.
- Az egyenlet két oldalának közelítése a „belső” pontokban:
$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau} = \frac{1}{h} p_j^{k+1}\left(q_{j+\frac{1}{2}}^{k+1}\frac{u_{j+1}^{k+1}-u_j^{k+1}}{h} - q_{j-\frac{1}{2}}^{k+1}\frac{u_j^{k+1}-u_{j-1}^{k+1}}{h}\right)$$
$$+F(t_{k+1}, h_j, u_j^k), \quad k = 0, 1, \ldots, N-1,\ j = 2, 3, \ldots, n-1.$$

A közelítő módszer

- $u_j^0 = u_0\left(h_j\right), \quad j = 1, 2, \ldots, n$ - az ismert kezdeti feltétellel.
- Az egyenlet két oldalának közelítése a „belső" pontokban:
$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\tau} = \frac{1}{h} p_j^{k+1} \left(q_{j+\frac{1}{2}}^{k+1} \frac{u_{j+1}^{k+1} - u_j^{k+1}}{h} - q_{j-\frac{1}{2}}^{k+1} \frac{u_j^{k+1} - u_{j-1}^{k+1}}{h} \right)$$
$$+F(t_{k+1}, h_j, u_j^k), \quad k = 0, 1, \ldots, N-1, \ j = 2, 3, \ldots, n-1.$$
- Az egyenlet két oldalának közelítése a bal perem mellett:
$$\frac{u_1^{k+1} - u_1^k}{\tau} =$$
$$\frac{1}{h} p_1^{k+1} \left(q_{\frac{3}{2}}^{k+1} \left(\frac{u_2^{k+1} - u_1^{k+1}}{h} + \frac{\frac{3}{23} u_2^{k+1} - \frac{2}{23} u_1^{k+1} - \frac{1}{23} u_3^{k+1}}{h} - \frac{1}{23} u_l(t_{k+1}) \right) \right.$$
$$\left. - q_{\frac{1}{2}}^{k+1} u_l(t_{k+1}) \right) + F(t_{k+1}, h_1, u_1^k), \quad k = 0, 1, \ldots, N-1.$$

A közelítő módszer (folyt.)

- Hasonlóan a jobb perem mellett:

A közelítő módszer (folyt.)

- Hasonlóan a jobb perem mellett: $\frac{u_n^{k+1}-u_n^k}{\tau} = \frac{1}{h} p_n^{k+1} \left(-q_{n-\frac{1}{2}}^{k+1} \left(\frac{u_n^{k+1}-u_{n-1}^{k+1}}{h} - \frac{\frac{3}{23} u_{n-1}^{k+1} - \frac{1}{23} u_{n-2}^{k+1} - \frac{2}{23} u_n^{k+1}}{h} - \frac{1}{23} u_r(t_{k+1}) \right) + q_{n+\frac{1}{2}}^{k+1} u_r(t_{k+1}) \right) + F(t_{k+1}, h_n, u_n^k), \quad k = 0, 1, \ldots, N-1.$

A közelítés pontossága

Lemma

A fenti közelítés az eredeti egyenlettel $\mathcal{O}(\tau) + \mathcal{O}(h^2)$ *rendben konzisztens,*

A közelítés pontossága

Lemma

A fenti közelítés az eredeti egyenlettel $\mathcal{O}(\tau) + \mathcal{O}(h^2)$ rendben konzisztens,

azaz

A közelítés pontossága

Lemma

A fenti közelítés az eredeti egyenlettel $\mathcal{O}(\tau) + \mathcal{O}(h^2)$ rendben konzisztens,

azaz

- ha r-szeresre sűrítjük az időbeli felosztást, akkor a bal oldal hibája r-edrészre csökken,

A közelítés pontossága

Lemma

A fenti közelítés az eredeti egyenlettel $\mathcal{O}(\tau) + \mathcal{O}(h^2)$ rendben konzisztens,

azaz

- ha r-szeresre sűrítjük az időbeli felosztást, akkor a bal oldal hibája r-edrészre csökken,
- ha r-szeresre sűrítjük a térbeli felosztást, akkor a jobb oldal hibája r^2-edrészre csökken.

Az időlépéshez megoldandó lineáris rendszer

A fenti módszer a következő alakba írható

Az időlépéshez megoldandó lineáris rendszer

A fenti módszer a következő alakba írható

$$\mathbf{u}^k = A_{k+1,h}\mathbf{u}^{k+1} - \tau\mathbf{F}(t, h, \mathbf{u}^k) + \mathbf{v}^{k+1}, \tag{1}$$

Az időléphez megoldandó lineáris rendszer

A fenti módszer a következő alakba írható

$$\mathbf{u}^k = A_{k+1,h}\mathbf{u}^{k+1} - \tau\mathbf{F}(t,h,\mathbf{u}^k) + \mathbf{v}^{k+1}, \qquad (1)$$

ahol

- $\mathbf{v}^k = (\frac{\tau}{h}p_1^k(q^k_{\frac{3}{2}} \cdot \frac{1}{23} \cdot u_l(t_k) + q^k_{\frac{1}{2}}u_l(t_k)), 0, \ldots, 0, -\frac{\tau}{h}p_n^k(q^k_{n-\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{23} \cdot u_r(t_k) + q^k_{n+\frac{1}{2}}u_r(t_k)))^T.$

Az időlépéshez megoldandó lineáris rendszer

A fenti módszer a következő alakba írható

$$\mathbf{u}^k = A_{k+1,h}\mathbf{u}^{k+1} - \tau \mathbf{F}(t, h, \mathbf{u}^k) + \mathbf{v}^{k+1}, \tag{1}$$

ahol

- $\mathbf{v}^k = (\frac{\tau}{h} p_1^k (q_{\frac{3}{2}}^k \cdot \frac{1}{23} \cdot u_l(t_k) + q_{\frac{1}{2}}^k u_l(t_k)), 0, \ldots, 0, -\frac{\tau}{h} p_n^k (q_{n-\frac{1}{2}}^k \cdot \frac{1}{23} \cdot u_r(t_k) + q_{n+\frac{1}{2}}^k u_r(t_k)))^T$.
- $r p_j^k q_{j-\frac{1}{2}}^k = c_j^k, \quad r p_j^k q_{j+\frac{1}{2}}^k = d_j^k, \quad r = \frac{\tau}{h^2},$

Az időlépéshez megoldandó lineáris rendszer(folyt.)

A rendszerben szereplő mátrix pedig ezekkel:

$$A_{k,h} = \begin{pmatrix} 1+\frac{25}{23}d_1^k & -\frac{26}{23}d_1^k & \frac{1}{23}d_1^k & 0 & \dots & 0 \\ -c_2^k & 1+c_2^k+d_2^k & -d_2^k & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -c_3^k & 1+c_3^k+d_3^k & -d_3^k & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & -c_{n-1}^k & 1+c_{n-1}^k+d_{n-1}^k & -d_{n-1}^k \\ 0 & \dots & 0 & \frac{1}{23}c_n^k & -\frac{26}{23}c_n^k & 1+\frac{25}{23}c_n^k \end{pmatrix}$$

További feltevések, állítások

- Feltevések:

$$\begin{aligned} 25d_2^k > 1 + c_2^k \Leftrightarrow rp_2(25q_{\frac{5}{2}} - q_{\frac{3}{2}}) > 1 \\ 25c_{n-1}^k > 1 + d_{n-1}^k \Leftrightarrow rp_{n-1}(25q_{n-\frac{1}{2}} - q_{n+\frac{1}{2}}) > 1 \end{aligned} \qquad (2)$$

További feltevések, állítások

- Feltevések:

$$
\begin{aligned}
25d_2^k > 1 + c_2^k &\Leftrightarrow rp_2(25q_{\frac{5}{2}} - q_{\frac{3}{2}}) > 1 \\
25c_{n-1}^k > 1 + d_{n-1}^k &\Leftrightarrow rp_{n-1}(25q_{n-\frac{1}{2}} - q_{n+\frac{1}{2}}) > 1
\end{aligned}
\tag{2}
$$

- Eredmények - a feltevések felhasználásával:

Lemma

Minden $h > 0$ és $k = 0, 1, \ldots, N$ esetén $\|A_{k,h}^{-1}\|_\infty = 1$.

További feltevések, állítások

- Feltevések:

$$25d_2^k > 1 + c_2^k \Leftrightarrow rp_2(25q_{\frac{5}{2}} - q_{\frac{3}{2}}) > 1$$
$$25c_{n-1}^k > 1 + d_{n-1}^k \Leftrightarrow rp_{n-1}(25q_{n-\frac{1}{2}} - q_{n+\frac{1}{2}}) > 1 \qquad (2)$$

- Eredmények - a feltevések felhasználásával:

Lemma

Minden $h > 0$ és $k = 0, 1, \ldots, N$ esetén $\|A_{k,h}^{-1}\|_\infty = 1$.

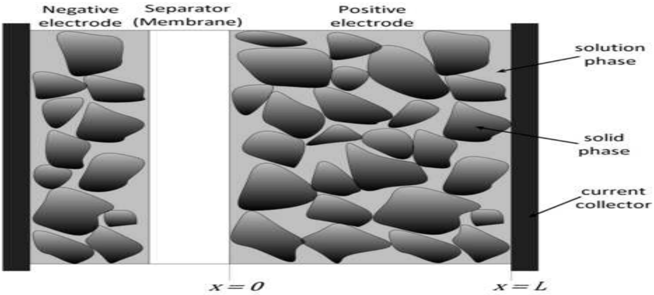
Tétel

Az előzőekben definiált véges differencia módszerrel kapott megoldás tart a valódi megoldáshoz:

$$\max_{j\in\{1,2,\ldots,n\}} \|u_j^N - u(T, h_j)\| = \mathcal{O}(\tau) + \mathcal{O}(h^2). \qquad (3)$$

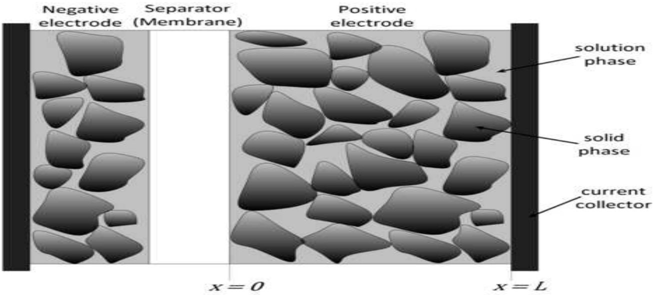
Üzemanyagcellák egy egyszerű modellje

- Egy dimenziós modellt tekintünk.



Üzemanyagcellák egy egyszerű modellje

- Egy dimenziós modellt tekintünk.
- A szilárd és folyékony fázist egyszerre vesszük figyelembe, mintha párhuzamosan lennének kötve.



Vizsgált mennyiségek

- Vizsgált mennyiségek egy üzemanyagcella-modellben:

Vizsgált mennyiségek

- Vizsgált mennyiségek egy üzemanyagcella-modellben:
  - $\phi_1(t,x), \phi_2(t,x)$: potenciál a szilárd és folyékony fázisban

Vizsgált mennyiségek

- Vizsgált mennyiségek egy üzemanyagcella-modellben:
  - $\phi_1(t,x), \phi_2(t,x)$: potenciál a szilárd és folyékony fázisban
  - $\eta = \phi_1 - \phi_2$: „hasznos” potenciál, túlfeszültség

Vizsgált mennyiségek

- Vizsgált mennyiségek egy üzemanyagcella-modellben:
  - $\phi_1(t,x), \phi_2(t,x)$: potenciál a szilárd és folyékony fázisban
  - $\eta = \phi_1 - \phi_2$: „hasznos” potenciál, túlfeszültség
  - $\sigma(t,x), \kappa(t,x)$: vezetési együtthatók a szilárd és folyékony fázisban

Vizsgált mennyiségek

- Vizsgált mennyiségek egy üzemanyagcella-modellben:
  - $\phi_1(t,x), \phi_2(t,x)$: potenciál a szilárd és folyékony fázisban
  - $\eta = \phi_1 - \phi_2$: „hasznos" potenciál, túlfeszültség
  - $\sigma(t,x), \kappa(t,x)$: vezetési együtthatók a szilárd és folyékony fázisban
  - $a(x)$, $C_{\mathrm{dl}}(x)$: további anyagi együtthatók.

Alapegyenletek

- Ohm-törvény és elektroneutralitás:

Alapegyenletek

- Ohm-törvény és elektroneutralitás:
  $-\partial_x[-\sigma\partial_x\phi_1] = -\partial_x i_1 = \partial_x i_2 = \partial_x[-\kappa\partial_x\phi_2]$

Alapegyenletek

- Ohm-törvény és elektroneutralitás:
  $-\partial_x[-\sigma\partial_x\phi_1] = -\partial_x i_1 = \partial_x i_2 = \partial_x[-\kappa\partial_x\phi_2]$
- Megmaradási törvény az áramokra:

Alapegyenletek

- Ohm-törvény és elektroneutralitás:
  $-\partial_x[-\sigma\partial_x\phi_1] = -\partial_x i_1 = \partial_x i_2 = \partial_x[-\kappa\partial_x\phi_2]$
- Megmaradási törvény az áramokra:
  $\partial_x(\kappa(x)\partial_x\phi_2(t,x)) =$
  $-a(x)C_{\mathrm{dl}}(x)\partial_t\eta(t,x) - a(x)i_0(x)g\left(\alpha\frac{F}{RT}\eta(t,x)\right).$

Alapegyenletek

- Ohm-törvény és elektroneutralitás:
  $-\partial_x[-\sigma\partial_x\phi_1] = -\partial_x i_1 = \partial_x i_2 = \partial_x[-\kappa\partial_x\phi_2]$
- Megmaradási törvény az áramokra:
  $\partial_x(\kappa(x)\partial_x\phi_2(t,x)) =$
  $-a(x)C_{\mathrm{dl}}(x)\partial_t\eta(t,x) - a(x)i_0(x)g\left(\alpha\frac{F}{RT}\eta(t,x)\right).$
- Lemma
  A fentiekből az η függvényre vonatkozó alábbi egyenlet kapható:

Alapegyenletek

- Ohm-törvény és elektroneutralitás:
  $-\partial_x[-\sigma\partial_x\phi_1] = -\partial_x i_1 = \partial_x i_2 = \partial_x[-\kappa\partial_x\phi_2]$
- Megmaradási törvény az áramokra:
  $\partial_x(\kappa(x)\partial_x\phi_2(t,x)) =$
  $-a(x)C_{\mathrm{dl}}(x)\partial_t\eta(t,x) - a(x)i_0(x)g\left(\alpha\frac{F}{RT}\eta(t,x)\right).$
- Lemma
  A fentiekből az η függvényre vonatkozó alábbi egyenlet kapható:
  $aC_{dl}\partial_t\eta(t,x) =$
  $\partial_x\left[\frac{\kappa\sigma}{\kappa+\sigma}\partial_x\eta(t,x)\right] - \partial_x\left(\frac{\kappa}{\kappa+\sigma}\right)I(t) - ai_0 g\left(\alpha\frac{F}{RT}\eta(t,x)\right).$

A tesztfeladat

- A vezetési együtthatók:

A tesztfeladat

- A vezetési együtthatók:
  $\kappa(t,x) = 0.002 - 0.001x$ és $\sigma(t,x) = 1.8 + 0.001x, \ x \in (0,1)$.

A tesztfeladat

- A vezetési együtthatók:
  $\kappa(t,x) = 0.002 - 0.001x$ és $\sigma(t,x) = 1.8 + 0.001x,\ x \in (0,1)$.

- A pontos megoldás:

$$\eta(t,x) = \frac{t^2}{4} \cdot \left(1 + \left(x - \frac{1801}{1803}\right)^2\right).$$

A tesztfeladat

- A vezetési együtthatók:
  $\kappa(t,x) = 0.002 - 0.001x$ és $\sigma(t,x) = 1.8 + 0.001x, \ x \in (0,1)$.

- A pontos megoldás:

$$\eta(t,x) = \frac{t^2}{4} \cdot \left(1 + \left(x - \frac{1801}{1803}\right)^2\right).$$

A tesztfeladat

- A vezetési együtthatók:
  $\kappa(t,x) = 0.002 - 0.001x$ és $\sigma(t,x) = 1.8 + 0.001x, \; x \in (0,1)$.

- A pontos megoldás:

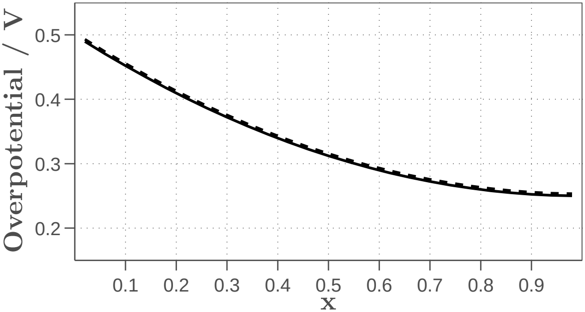
$$\eta(t,x) = \frac{t^2}{4} \cdot \left(1 + \left(x - \frac{1801}{1803}\right)^2\right).$$

- A peremfeltételek:

$$\partial_x \eta(t,0) = \frac{t^2}{2}\frac{1801}{1803} \qquad \partial_x \eta(t,1) = -\frac{t^2}{2}\left(1 - \frac{1801}{1803}\right).$$

A számítás eredménye

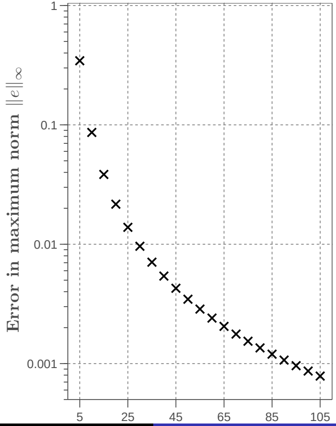
- A pontos megoldás (folytonos grafikon) és a numerikus közelítés.



ábra: Paraméterek: $T = 1, h = 0.04$ és $\tau = 0.01$.

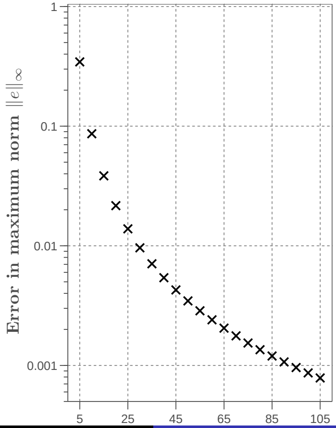
A számítás eredménye II.

- A $T = 1$ időpontban mért maximális eltérés (hiba) csökkenése a térbeli felosztás finomításával.



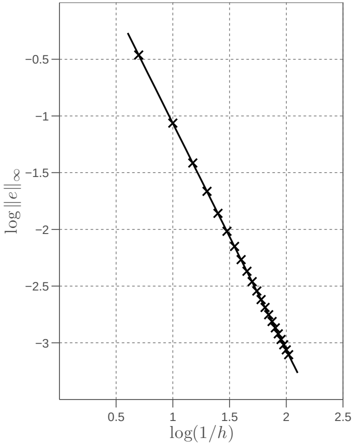
A számítás eredménye II.

- A $T = 1$ időpontban mért maximális eltérés (hiba) csökkenése a térbeli felosztás finomításával.



A számítás eredménye III.

- Az előzőekben vizsgált hiba csökkenése log-log skálán.



További problémák, kérdések

- Lehet/érdemes-e időben magasabb rendű módszert konstruálni?

További problémák, kérdések

- Lehet/érdemes-e időben magasabb rendű módszert konstruálni?
- Több dimenzióban és több „anyagfajta” esetére kiterjeszthető-e ez?

Köszönöm a figyelmet!

További problémák, kérdések

- Lehet/érdemes-e időben magasabb rendű módszert konstruálni?
- Több dimenzióban és több „anyagfajta” esetére kiterjeszthető-e ez?
  - Nem egyszerű: rendszert kapunk, mert nem sikerült egyetlen ismeretlennel leírni a rendszert.

Köszönöm a figyelmet!

További problémák, kérdések

- Lehet/érdemes-e időben magasabb rendű módszert konstruálni?
- Több dimenzióban és több „anyagfajta” esetére kiterjeszthető-e ez?
  - Nem egyszerű: rendszert kapunk, mert nem sikerült egyetlen ismeretlennel leírni a rendszert.
  - Az időlépéshez használt mátrix is jóval öszetettebb.

Köszönöm a figyelmet!