

SLOVENSKÁ TECHNICKÁ UNIVERZITA V BRATISLAVE

Stavebná fakulta

Evidenčné číslo: SvF-5342-87812

Riešenie úloh anizotropickej difúzie na nerovnomerných výpočtových sieťach

Bakalárska práca

Študijný program: matematicko-počítačové modelovanie

Študijný odbor: 9.1.9. aplikovaná matematika

Školiace pracovisko: Katedra matematiky a deskriptívnej geometrie

Vedúci záverečnej práce: prof. RNDr. Karol Mikula, DrSc.

Bratislava 2019

Martin Bejdák



ZADANIE BAKALÁRSKEJ PRÁCE

Študent: **Martin Bejdák**
ID študenta: 87812
Študijný program: matematicko-počítačové modelovanie
Študijný odbor: 9.1.9. aplikovaná matematika
Vedúci práce: prof. RNDr. Karol Mikula, DrSc.

Názov práce: **Riešenie úloh anizotropickej difúzie na nerovnomerných
výpočtových sieťach**

Jazyk, v ktorom sa práca vypracuje: slovenský jazyk

Špecifikácia zadania:

Študent vytvorí algoritmy na riešenie úloh anizotropickej difúzie na všeobecných polygonálnych sieťach a implementuje ich pre nerovnomerné logicky štvoruholníkové siete v 2D a 3D. Bude tiež skúmať experimentálny rád konverencie metód pre skalárny aj maticový difúzny koeficient.

Riešenie zadania práce od: 01. 02. 2019

Dátum odovzdania práce: 02. 05. 2019

Martin Bejdák
študent

prof. RNDr. Radko Mesiar, DrSc.
vedúci pracoviska

prof. RNDr. Karol Mikula, DrSc.
garant študijného programu

Pod'akovanie

Svoje poďakovanie venujem vedúcemu práce prof. RNDr. Karolovi Mikulovi, DrSc za odbornú pomoc, usmernenie a cenné rady, ktoré mi vždy ochotne poskytol pri tvorbe tejto bakalárskej práce. Taktiež ďakujem svojej rodine a blízkym za podporu.

Čestné prehlásenie

Čestne vyhlasujem, že som bakalársku prácu Riešenie úloh anizotropickej difúzie na nerovnomerných výpočtových sieťach vypracoval samostatne s použitím uvedenej odbornej literatúry a s odbornou pomocou vedúceho práce.

Bratislava, 1. mája 2019

.....
Vlastnoručný podpis

Abstrakt:

Práca sa venuje odvodeniu numerických metód na riešenie parciálnych diferenciálnych rovníc anizotropickej a izotropickej difúzie. Využívame princípy metódy konečných objemov na nájdenie numerického riešenia anizotropickej Poissonovej rovnice v dvojdimenzionálnom a trojdimenzionálnom priestore s Dirichletovými okrajovými podmienkami. Riešenie hľadáme na nerovnomerných polygonálnych sieťach. Schéma je implementovaná na nerovnomerných logicky štvoruholníkových sieťach. Určíme jej experimentálny rád konverencie.

Kľúčové slová: numerické riešenie, nerovnomerná sieť, metóda konečných objemov, iterčná metóda, Poissonova rovnica, anizotropická difúzia

Abstract:

This work is focused on derivation of numerical methods for partial differential equations of anisotropic and isotropic diffusion. We are using principles of finite volume method to find numerical solution of anisotropic Poisson equation in two-dimensional and three-dimensional space domain with Dirichlet boundary condition. Solution is designed for general non-uniform polygonal grids. The scheme is implemented on non-uniform logically rectangular grids and its experimental order of convergence is determined.

Key words: numerical solution, non-uniform grid, finite volume method, iterative method, Poisson equation, anisotropic diffusion

Obsah

1	Úvod	7
2	Diskretizácia výpočtovej oblasti	10
3	Odvodenie numerickej schémy	12
3.1	Odvodenie numerickej schémy pre izotropickú difúziu	12
3.1.1	Rovnica na konečnom objeme	12
3.1.2	Bilancia normálových tokov	14
3.1.3	Globálna sústava rovníc	15
3.2	Odvodenie numerickej schémy pre anizotropickú difúziu	16
3.2.1	Rovnica na konečnom objeme	16
3.2.2	Bilancia normálových tokov	18
3.2.3	Globálna sústava rovníc	18
3.3	Výpočet gradientu	19
3.4	Iteračný algoritmus riešenia	19
4	Numerické experimenty	21
4.1	Výpočtová sieť	21
4.2	2D experimenty	23
4.3	3D experimenty	25
5	Záver	28
	Literatúra	29

1 Úvod

Motiváciou tejto práce je numerické riešenie úlohy popisujúcej anizotropickú difúziu. Táto úloha patrí medzi eliptické parciálne diferenciálne rovnice. Tie popisujú deje v rovnovážnom stave, ako napríklad stacionárne vedenie tepla, potenciál prúdenia kvapaliny, potenciál elektrostatického poľa stacionárneho prúdu alebo aj veľkosť ohybu membrány pod vplyvom sily [1].

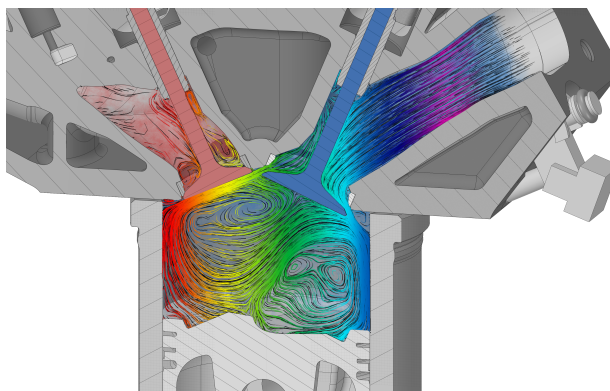
Hlavným cieľom je odvodenie numerickej schémy pre anizotropickú Poissonovu rovnicu v tvare

$$-\nabla \cdot (A(x)\nabla\phi) = g(x),$$

definovanú na ohraničenej oblasti Ω , s Dirichletovými okrajovými podmienkami.

Na riešenie tejto rovnice použijeme metódu konečných objemov [3]. Metóda konečných objemov je jedna z najpoužívanějších metód pre riešenie rovníc popisujúcich procesy v spojitom prostredí. Základnou myšlienkou je rozdelenie výpočtovej oblasti na konečné objemy. Pre každý konečný objem je zvolený reprezentačný bod. Diferenciálna rovnica je diskretizovaná na sústavu algebraických rovníc, kde neznáme sú hodnoty hľadanej funkcie v reprezentačných bodoch. Nájdené hodnoty sa potom použijú pre celý konečný objem, čím dostaneme po častiach konštantné riešenie.

Ďalšou motiváciou je spolupráca so spoločnosťou AVL List, GmbH, Graz [2]. AVL je najväčšia nezávislá spoločnosť zaoberajúca sa vývojom, simuláciou a testovaním hnacích systémov. Jedným zo zameraní spoločnosti je vývoj softvéru AVL Fire, určeného na simuláciu horenia paliva v spaľovacích motoroch (viď obrázok 1.1) a ďalšie naviazané úlohy. Cieľom spolupráce je nami navrhnutú metódu konečných objemov pre anizotropickú difúziu zapojiť do softvéru AVL Fire.

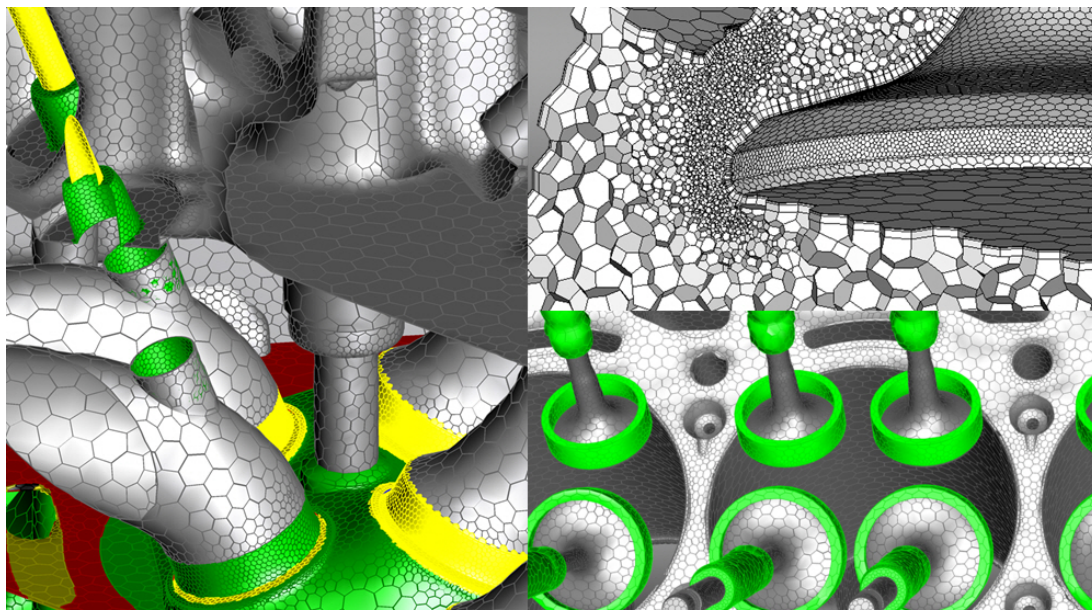


Obr. 1.1: Ukážka simulácie spaľovacieho motora v softvéri AVL FIRE

Pre využitie metódy konečných objemov je potrebné najprv rozdeliť výpočtovú oblasť na konečné objemy. Delenie výpočtovej oblasti je opísané v druhej kapitole. Pre potreby metódy pracujeme na nerovnomerných polygonálnych sieťach. Pre 3D úlohy je nutné steny konečných objemov rozdeliť na trojuholníky, pretože vo všeobecnosti steny konečných objemov nemajú presne definované ťažisko ani normálový vektor.

Tretia kapitola opisuje odvodenie numerickej schémy najprv pre jednoduchšiu izotropickú rovnicu, potom pre všeobecnejšiu anizotropickú rovnicu. Pre obe je najprv odvodená lokálna rovnica na konečnom objeme. Následne využitím bilancie normálových tokov sú jednotlivé lokálne rovnice prepojené do globálnej sústavy rovníc. Ďalej je v tretej kapitole odvodená aproximácia hodnoty gradientu neznámej funkcie v reprezentačných bodoch. V poslednej časti tejto kapitoly je opísaný celkový iteračný algoritmus na riešenie úlohy.

Výpočtové siete bývajú v praxi netriviálne, ako môžeme vidieť na obrázku 1.2. Keďže na takýchto všeobecných polygonálnych sieťach musí byť metóda testovaná už v prostredí AVL Fire, čo sa uskutoční v blízkej budúcnosti v spolupráci s kolegami z AVL, v práci sme zvolili implementáciu na nerovnomerných logicky štvoruholníkových sieťach, ktoré sú ľahko implementovateľné a vhodné na testovanie metódy. V štvrtej kapitole je preto najprv opísaný spôsob vytvorenia nerovnomerných logicky štvoruholníkových sietí, na ktorých testujeme odvodené schémy. Následne odhadujeme experimentálny rád konvergenzie pre jednotlivé typy funkcií v 2D/3D pre izotropickú aj anizotropickú úlohu.



Obr. 1.2: Ukážka diskretizácie motora

Pri odvodení numerickej metódy vychádzame najmä z prác [3, 4, 8]. Práca [3] predstavuje základné princípy odvodenia metódy konečných objemov s využitím Gauss-Ostrogradského vety pri integrácii parciálnej diferenciálnej rovnice na konečnom objeme. Práca [4] nás inšpirovala na zavedenie neznámych na stenách konečných objemov, ktoré vstupujú do bilancie tokov a výpočtu gradientu riešenia na konečnom objeme. Myšlienky

z práce [8] využívame pri projekcii reprezentačných bodov na normály k stenám konečných objemov a následné zostrojenie bilancie tokov pre všeobecné polygonálne siete a úlohy s anizotropiou. Naša práca tiež nadväzuje na práce [5, 6, 7]. Práce [6, 7] sa venujú návrhu metód konečných objemov pre riešenie rovníc advekcie a práca [5] riešeniu úloh izotropickej difúzie na polygonálnych sieťach. Všetky tri práce využívajú na aproximáciu riešenia na stene konečného objemu gradient numerického riešenia, ktorý je získaný metódou najmenších štvorcov, tzv. least-square gradient. V našej práci na tento účel využívame aproximáciu gradientu z Gauss-Ostrogradského vety, ktorá je veľmi prirodzená pre metódu konečných objemov a presnejšia pre určité typy sietí, a odvádzame metódu ako pre izotropickú tak aj pre anizotropickú difúziu. V prípade anizotropickej difúzie riešime novým spôsobom projekcie reprezentačných bodov, namiesto na normály k stenám konečných objemov, na priamky, zodpovedajúce anizotropii na jednotlivých konečných objemoch. Súhrnom môžeme povedať, že sme vytvorili novú metódu konečných objemov pre izotropickú aj anizotropickú difúziu na všeobecných polygonálnych sieťach, ktorá je druhého rádu presnosti a môže byť využitá v praktických aplikáciách, napríklad v priemyselných softvéroch.

2 Diskretizácia výpočtovej oblasti

Majme ohraničenú oblasť $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, kde $d=2$ alebo $d=3$. Oblasť Ω rozdelíme na nerovnomernú polygonálnu sieť, pozostávajúcu z konečných objemov Ω_p . Pre objemy Ω_p platí

$$\Omega = \bigcup_{p \in P} \Omega_p, \quad (2.1)$$

kde P je indexová množina všetkých konečných objemov Ω_p . Pre každý objem $\Omega_p, p \in P$, vyberieme reprezentačný bod a označíme ho x_p . Za reprezentačný bod x_p budeme brať ťažisko objemu Ω_p .

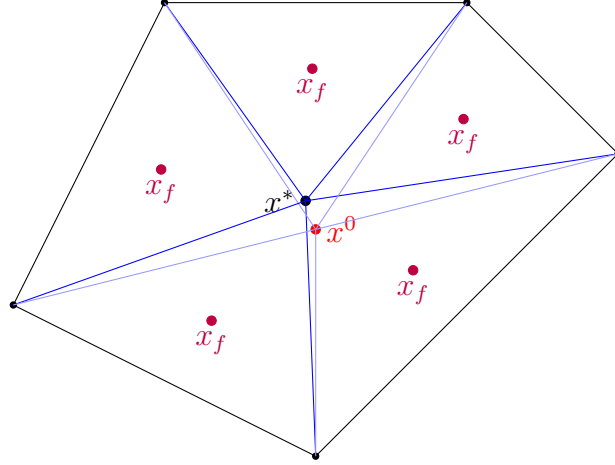
Nech E_p je množina všetkých stien (v 2D hrán, ďalej budeme používať len termím "steny") objemu Ω_p . Vo všeobecnosti v 3D nemôžeme predpokladať, že všetky steny v množine E_p sú rovinné. Preto ak stena nie je trojuholníková, tak ju rozložíme na trojuholníky.

Majme stenu α_f s vrcholmi $x_i, i = 1, \dots, r$. Pre jednoduchosť použijeme cyklické označenie vrcholov $x_{r+1} = x_1$. Vypočítame stred steny α_f ako vážený priemer

$$x^* = \frac{\sum_{i=1}^r |t_i| \bar{x}_i}{\sum_{i=1}^r |t_i|}, \quad (2.2)$$

kde $|t_i|$ je plocha trojuholníka t_i , pozostávajúceho z vrcholov x_i, x_{i+1} a $x^0 = \frac{1}{r} \sum_{j=1}^r x_j$. Bod $\bar{x}_i$ je ťažisko trojuholníka t_i . Takto vypočítaný bod x^* použijeme na rozdelenie steny α_f tak, že každý deliaci trojuholník tvoria dva susedné vrcholy steny α_f a stredový bod x^* . Potom nech množina E_p^* označuje množinu trojuholníkov e_f , ktoré vznikli rozložením všetkých stien v množine E_p . Ťažisko trojuholníka $e_f \in E_p^*$ označíme x_f .

Na obrázku 2.1 môžeme bledomodrou farbou vidieť znázornené trojuholníky t_i . Tmavomodrou farbou sú znázornené trojuholníky, ktoré použijeme na rozdelenie steny.

Obr. 2.1: Rozloženie steny na trojuholníky e_f

V 2D sú steny objemov úsečky a teda ťažisko x_f vieme nájsť jednoducho, steny nemusíme deliť. Množina E_p^* sa v tomto prípade rovná množine E_p .

Množinu E_p^* rozdelíme na steny, ktoré tvoria hranicu výpočtovej oblasti Ω a na vnútorné steny tak, že zavedieme indexové množiny

$$\begin{aligned} F_p &= \{f \in \mathbb{N}, e_f \in E_p^* \wedge e_f \notin \partial\Omega\}, \\ B_p &= \{b \in \mathbb{N}, e_b \in E_p^* \wedge e_b \in \partial\Omega\}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Množina F_p obsahuje indexy všetkých vnútorných stien objemu Ω_p a množina B_p obsahuje indexy stien, ktoré sú tiež hranicou výpočtovej oblasti Ω .

Ďalej nech n_{pf} je vonkajší normálový vektor k stene e_f , $f \in F_p \cup B_p$. Veľkosť vektora n_{pf} nech je rovná ploche steny e_f

$$|n_{pf}| = |e_f|. \quad (2.4)$$

3 Odvodenie numerickej schémy

V prvej časti tejto kapitoly najprv odvodíme metódu pre izotropickú difúziu, pričom vychádzame z práce [5]. Na rozdiel od [5] neuvažujeme gradient získaný metódou najmenších štvorcov, ale gradient získaný použitím Gauss-Ostrogradského vety. V druhej podkapitole odvádzame nami navrhnutú metódu pre anizotropickú difúziu. Tretia časť využíva princíp zavedenia neznámych na stenách konečných objemov z práce [4], ktoré sa využívajú v odvodení aproximácie gradientu hľadanej funkcie, ako aj pri bilancii normálových tokov. V poslednej časti tejto kapitoly je opísaný návrh algoritmu, ktorý spája metódy odvodené v predchádzajúcich častiach.

3.1 Odvodenie numerickej schémy pre izotropickú difúziu

3.1.1 Rovnica na konečnom objeme

Majme Poissonovu rovnicu

$$-\nabla \cdot (\lambda(x) \nabla \phi(x)) = g(x), x \in \Omega, \quad (3.1)$$

s Dirichletovou okrajovou podmienkou

$$\phi(x) = \phi_0(x), x \in \partial\Omega. \quad (3.2)$$

V odvádzaní tejto schémy budeme využívať princíp metódy konečných objemov a preto rovnicu (3.1) zintegrujeme cez objem Ω_p

$$-\int_{\Omega_p} \nabla \cdot (\lambda(x) \nabla \phi) dx = \int_{\Omega_p} g(x) dx. \quad (3.3)$$

Aplikovaním divergenčnej vety na ľavú stranu rovnice (3.3) prevedieme objemový integrál na plošný integrál

$$-\int_{\partial\Omega_p} \lambda(x) \nabla \phi \cdot \frac{n_{pf}}{|n_{pf}|} dS = \int_{\Omega_p} g(x) dx. \quad (3.4)$$

Objem Ω_p má polygonálnu hranicu takže môžeme rozdeliť integrál po hranici objemu na sumu integrálov po stenách objemu Ω_p

$$-\sum_{f \in F_p \cup B_p} \int_{e_f} \lambda(x) \nabla \phi \cdot \frac{n_{pf}}{|n_{pf}|} dS = \int_{\Omega_p} g(x) dx. \quad (3.5)$$

Funkcie $\lambda(x)$ a $g(x)$ nahradíme na celom objeme Ω_p ich hodnotami v reprezentačnom bode x_p

$$- \sum_{f \in F_p \cup B_p} \int_{e_f} \lambda_p \nabla \phi \cdot \frac{n_{pf}}{|n_{pf}|} dS = \int_{\Omega_p} g_p dx, \quad (3.6)$$

kde

$$\begin{aligned} \lambda_p &= \lambda(x_p), \\ g_p &= g(x_p). \end{aligned} \quad (3.7)$$

V ďalšom kroku aproximujeme deriváciu v smere normálového vektora n_{pf} . Aby sme mohli použiť túto aproximáciu potrebujeme aby reprezentačný bod objemu Ω_p ležal na priamke definovanej týmto vektorom. Pre všetky steny $e_f, f \in B_p \cup F_p$ zavedieme priamku

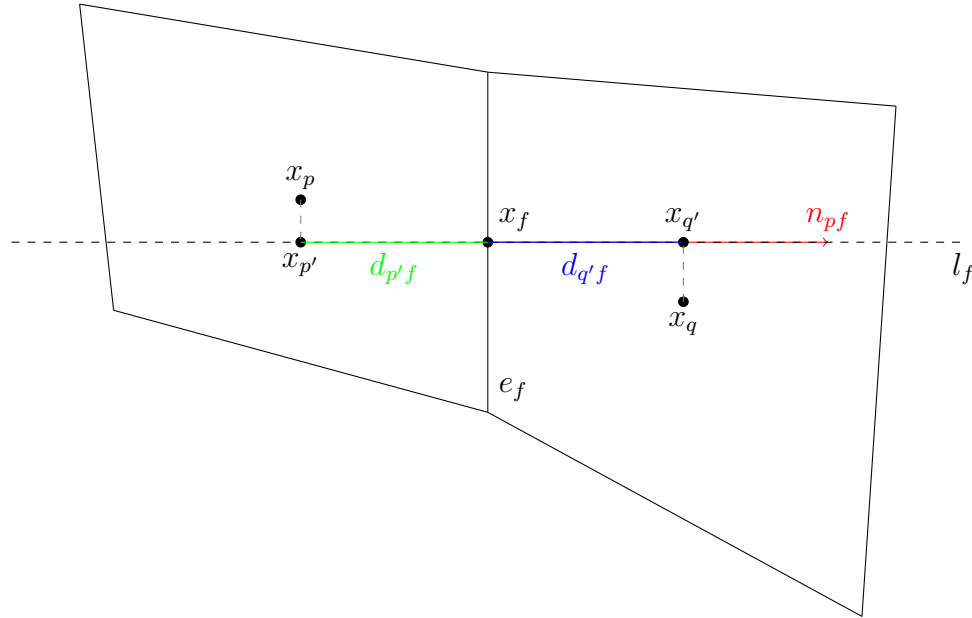
$$l_f(s) = x_f + n_{pf}s. \quad (3.8)$$

Pre objemy Ω_p a Ω_q , ktoré susedia so stenou e_f , nájdeme projekcie ich reprezentačných bodov na priamku l_f nasledovne

$$\begin{aligned} x_{p'} &= x_f - |d_{p'f}| \frac{n_{pf}}{|n_{pf}|}, \\ x_{q'} &= x_f + |d_{p'f}| \frac{n_{pf}}{|n_{pf}|}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

kde $|d_{p'f}|$ a $|d_{q'f}|$ sú vzdialenosti bodov $x_{p'}$ a $x_{q'}$ od bodu x_f , ktoré dostaneme vzťahom

$$\begin{aligned} d_{p'f} &= \left((x_f - x_p) \cdot \frac{n_{pf}}{|n_{pf}|} \right) \frac{n_{pf}}{|n_{pf}|} = \frac{n_{pf} \cdot (x_f - x_p)}{n_{pf} \cdot n_{pf}} n_{pf}, \\ d_{q'f} &= \left((x_f - x_q) \cdot \frac{n_{pf}}{|n_{pf}|} \right) \frac{n_{pf}}{|n_{pf}|} = \frac{n_{pf} \cdot (x_f - x_q)}{n_{pf} \cdot n_{pf}} n_{pf}. \end{aligned} \quad (3.10)$$



Obr. 3.1: Projekcie bodov x_p a x_q na priamku l_f definovanú vektorom n_{pf}

Projektované body $x_{p'}$ použijeme na aproximáciu $\nabla\phi$ v smere vektora n_{pf} nasledovne

$$\frac{n_{pf}}{|n_{pf}|} \cdot \nabla\phi \approx \frac{\phi_f - \phi_{p'}}{|d_{p'f}|}, \quad (3.11)$$

kde ϕ_f je hodnota neznámej funkcie $\phi(x)$ v bode x_f a $\phi_{p'}$ jej hodnota v bode $x_{p'}$. Dosadením (3.11) do (3.6) dostaneme

$$- \sum_{f \in F_p \cup B_p} \int_{e_f} \lambda_p \frac{\phi_f - \phi_{p'}}{|d_{p'f}|} dS = \int_{\Omega_p} g_p dx. \quad (3.12)$$

Integrál cez stenu e_f aproximujeme jej veľkosťou, ktorá je rovná veľkosti normálového vektora n_{pf} . Rovnako integrál cez objem Ω_p aproximujeme jeho veľkosťou

$$- \sum_{f \in F_p} \lambda_p \frac{\phi_f - \phi_{p'}}{|d_{p'f}|} |n_{pf}| = |\Omega_p| g_p. \quad (3.13)$$

Rovnica (3.13) s neznámymi ϕ_f a $\phi_{p'}$ platí pre všetky konečné objemy $\Omega_p, p \in F_p \cup B_p$. Potrebujeme previesť túto sústavu tak, aby neznáme boli hodnoty v reprezentačných bodoch $x_p, p \in P$. Využijeme bilanciu normálových tokov.

3.1.2 Bilancia normálových tokov

Majme objemy Ω_p a Ω_q , také že existuje stena e_f , ktorá patrí do E_p^* a zároveň do E_q^* . Správime bilanciu normálových tokov cez stenu e_f z konečného objemu Ω_p do Ω_q

$$-\lambda_p \nabla\phi \cdot n_{pf} = \lambda_q \nabla\phi \cdot n_{qf}. \quad (3.14)$$

Použijeme aproximáciu (3.11) na (3.14)

$$-\lambda_p \frac{\phi_f - \phi_{p'}}{|d_{p'f}|} |n_{pf}| = \lambda_q \frac{\phi_f - \phi_{q'}}{|d_{q'f}|} |n_{qf}|. \quad (3.15)$$

Z (3.15) vyjadrením ϕ_f dostaneme

$$\phi_f = \frac{\lambda_p |d_{q'f}| \phi_{p'} + \lambda_q |d_{p'f}| \phi_{q'}}{\lambda_p |d_{q'f}| + \lambda_q |d_{p'f}|}. \quad (3.16)$$

V rovnici (3.16) si môžeme všimnúť, že ϕ_f sme vyjadrili ako vážený priemer hodnôt $\phi_{p'}$ a $\phi_{q'}$. Na aproximáciu $\phi_{p'}$ použijeme Taylorov rozvoj v bode x_p

$$\phi_{p'} \approx \phi_p + \nabla\phi_p \cdot (x_{p'} - x_p) = \phi_p + \nabla\phi_p \cdot d_{pp'}, \quad (3.17)$$

kde $d_{pp'}$ označuje vektor z bodu x_p do bodu $x_{p'}$ a $\nabla\phi_p$ označuje hodnotu gradientu funkcie $\phi(x)$ v reprezentačnom bode x_p . Dosadením (3.17) do (3.16) za ϕ_p aj ϕ_q dostaneme

$$\phi_f = \frac{\lambda_p |d_{q'f}|}{\lambda_p |d_{q'f}| + \lambda_q |d_{p'f}|} (\phi_p + \nabla\phi_p \cdot d_{pp'}) + \frac{\lambda_q |d_{p'f}|}{\lambda_p |d_{q'f}| + \lambda_q |d_{p'f}|} (\phi_q + \nabla\phi_q \cdot d_{qq'}). \quad (3.18)$$

Potom

$$\begin{aligned}
\phi_f - \phi_{p'} &= \frac{\lambda_p |d_{q'f}| \phi_{p'} + \lambda_q |d_{p'f}| \phi_{q'}}{\lambda_p |d_{q'f}| + \lambda_q |d_{p'f}|} - \phi_{p'} \\
&= \frac{\lambda_p |d_{q'f}| \phi_{p'} + \lambda_q |d_{p'f}| \phi_{q'}}{\lambda_p |d_{q'f}| + \lambda_q |d_{p'f}|} - \frac{\lambda_p |d_{q'f}| \phi_{p'} + \lambda_q |d_{p'f}| \phi_{p'}}{\lambda_p |d_{q'f}| + \lambda_q |d_{p'f}|} \\
&= \frac{\lambda_q |d_{p'f}|}{\lambda_p |d_{q'f}| + \lambda_q |d_{p'f}|} (\phi_q + \nabla \phi_q \cdot d_{qq'} - \phi_p - \nabla \phi_p \cdot d_{pp'}).
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Rovnica (3.19) platí pre všetky steny $e_f, f \in F_p$, teda pre všetky vnútorné steny. Pre steny $e_b, b \in B_p$ môžeme na vyjadrenie hodnoty $\phi(x_b)$ použiť okrajovú podmienku

$$\phi_b - \phi_{p'} \approx \phi_0(x_b) - \phi_p - \nabla \phi_p \cdot d_{pp'}. \tag{3.20}$$

3.1.3 Globálna sústava rovníc

V ďalšom kroku rozdelíme sumu v rovnici (3.13) na sumu cez vnútorné a vonkajšie steny a dosadíme (3.19), (3.20)

$$\begin{aligned}
& - \sum_{f \in F_p} \lambda_p \frac{|n_{pf}|}{|d_{p'f}|} \frac{\lambda_q |d_{p'f}|}{\lambda_p |d_{q'f}| + \lambda_q |d_{p'f}|} (\phi_q - \phi_p + \nabla \phi_q \cdot d_{qq'} - \nabla \phi_p \cdot d_{pp'}) - \\
& - \sum_{b \in B_p} \lambda_p \frac{|n_{pb}|}{|d_{p'b}|} (\phi_b - \phi_p - \nabla \phi_p \cdot d_{pp'}) = |\Omega_p| g_p.
\end{aligned} \tag{3.21}$$

Upravíme tak aby neznáme hodnoty funkcie $\phi(x)$ v reprezentačných bodoch konečných objemov boli na ľavej strane, ostatné na pravej strane

$$\begin{aligned}
& \sum_{f \in F_p} R_{pf} (\phi_p - \phi_q) + \sum_{b \in B_p} K_{pb} \phi_p = \\
& = |\Omega_p| g_p + \sum_{f \in F_p} R_{pf} (\nabla \phi_q \cdot d_{qq'} - \nabla \phi_p \cdot d_{pp'}) + \sum_{b \in B_p} K_{pb} (\phi_b - \nabla \phi_p \cdot d_{pp'}),
\end{aligned} \tag{3.22}$$

kde

$$\begin{aligned}
R_{pf} &= \frac{\lambda_p \lambda_q |n_{pf}|}{\lambda_p |d_{q'f}| + \lambda_q |d_{p'f}|}, \\
K_{pb} &= \frac{\lambda_p |n_{pb}|}{|d_{p'b}|}.
\end{aligned} \tag{3.23}$$

3.2 Odvodenie numerickej schémy pre anizotropickú difúziu

3.2.1 Rovnica na konečnom objeme

Majme anizotropickú Poissonovu rovnicu

$$-\nabla \cdot (A(x)\nabla\phi) = g(x). \quad (3.24)$$

Rovnicu (3.24) prevedieme na tvar (3.4), integrovaním cez konečný objem Ω_p a aplikovaním divergenčnej vety na ľavú stranu rovnice

$$-\int_{\partial\Omega_p} \left(A(x)\nabla\phi \right) \cdot \frac{n_{pf}}{|n_{pf}|} dS = \int_{\Omega_p} g(x) dx. \quad (3.25)$$

Ďalej z vlastnosti symetrickej matice A môžeme vymeniť poradie skalárneho súčinu

$$-\int_{\partial\Omega_p} \left(A(x) \frac{n_{pf}}{|n_{pf}|} \right) \cdot \nabla\phi dS = \int_{\Omega_p} g(x) dx. \quad (3.26)$$

Rozdelíme integrál cez $\partial\Omega_p$ na sumu integrálov cez steny $e_f, f \in F_p \cup B_p$

$$-\sum_{f \in F_p \cup B_p} \int_{e_f} \left(A(x) \frac{n_{pf}}{|n_{pf}|} \right) \cdot \nabla\phi dS = \int_{\Omega_p} g_p dx, \quad (3.27)$$

ktoré ďalej aproximujeme do tvaru

$$-\sum_{f \in F_p \cup B_p} A_p n_{pf} \cdot \nabla\phi = |\Omega_p| g_p. \quad (3.28)$$

Rovnako ako v (3.11) aproximujeme deriváciu v smere. Pri anizotropickej difúzii projekcie reprezentatívnych bodov závisia aj od difúzneho koeficientu $A(x)$. Pre každú stenu potrebujeme dve priamky $l_{pf}(s)$ a $l_{qf}(s)$, na ktoré budeme projektovať reprezentatívne body x_p, x_q susediace s danou stenou e_f . Priamky majú tvar

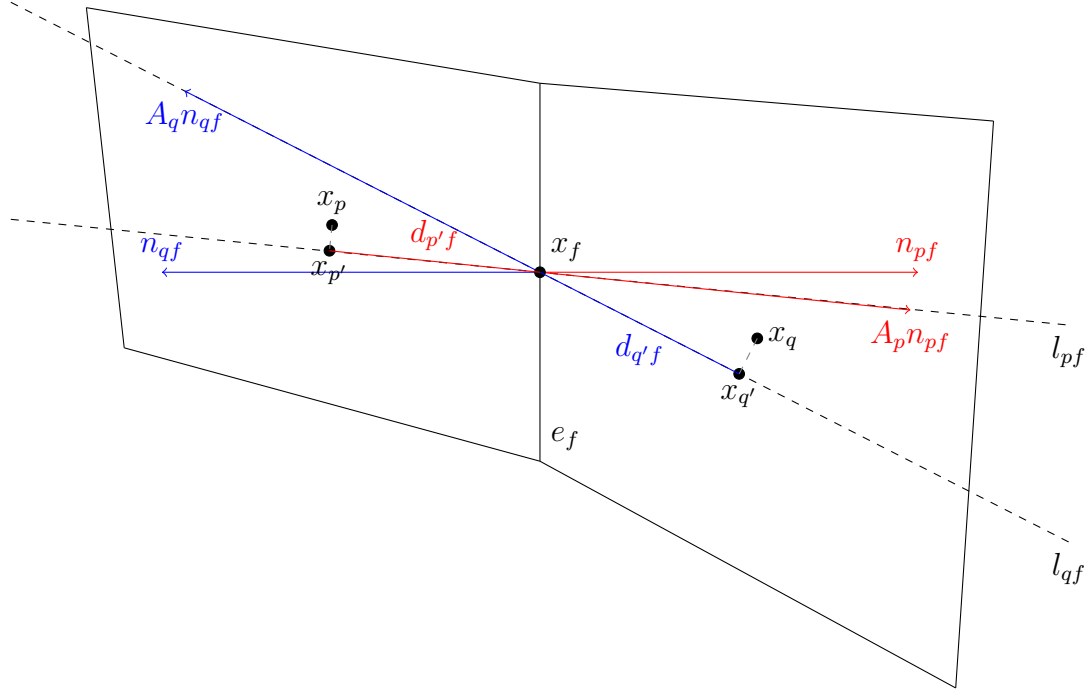
$$\begin{aligned} l_{pf}(s) &= x_f + A_p n_{pf} s, \\ l_{qf}(s) &= x_f + A_q n_{qf} s. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Projekcie reprezentatívnych bodov sú

$$\begin{aligned} x_{p'} &= x_f - |d_{p'f}| \frac{A_p n_{pf}}{|A_p n_{pf}|}, \\ x_{q'} &= x_f - |d_{q'f}| \frac{A_q n_{qf}}{|A_q n_{qf}|}, \end{aligned} \quad (3.30)$$

kde $d_{p'f}$ a $d_{q'f}$ sú dané vzťahom

$$\begin{aligned} d_{p'f} &= \left((x_f - x_p) \cdot \frac{A_p n_{pf}}{|A_p n_{pf}|} \right) \frac{A_p n_{pf}}{|A_p n_{pf}|} = \frac{A_p n_{pf} \cdot (x_f - x_p)}{A_p n_{pf} \cdot A_p n_{pf}} A_p n_{pf}, \\ d_{q'f} &= \left((x_f - x_q) \cdot \frac{A_q n_{qf}}{|A_q n_{qf}|} \right) \frac{A_q n_{qf}}{|A_q n_{qf}|} = \frac{A_q n_{qf} \cdot (x_f - x_q)}{A_q n_{qf} \cdot A_q n_{qf}} A_q n_{qf}. \end{aligned} \quad (3.31)$$



Obr. 3.2: Projekcie reprezantačných bodov x_p a x_q

V (3.28) aproximujeme deriváciu v smere vektora $A_p n_{pf}$ nasledovne

$$A_p n_{pf} \cdot \nabla \phi = |A_p n_{pf}| \frac{A_p n_{pf}}{|A_p n_{pf}|} \cdot \nabla \phi \approx |A_p n_{pf}| \frac{\phi_f - \phi_{p'}}{|d_{p'f}|}. \quad (3.32)$$

Do (3.28) dosadíme (3.32) a dostaneme

$$- \sum_{f \in F_p \cup B_p} |A_p n_{pf}| \frac{\phi_f - \phi_{p'}}{|d_{p'f}|} = |\Omega_p| g_p. \quad (3.33)$$

Túto sústavu potrebujeme previesť na sústavu rovníc s neznámymi ϕ_p a ϕ_q reprezentujúcimi aproximáciu riešenia funkcie ϕ v reprezantačných bodoch konečných objemov $\Omega_p, p \in P$. Potrebujeme teda vyjadriť ϕ_f a $\phi_{p'}$ pomocou ϕ_p , ϕ_q .

3.2.2 Bilancia normálových tokov

Bilancia normálových tokov cez stenu e_f z konečného objemu Ω_p do susedného objemu Ω_q je daná rovnicou

$$-A_p \nabla \phi \cdot n_{pf} = A_q \nabla \phi \cdot n_{qf}. \quad (3.34)$$

Použitím aproximácie (3.32) dostaneme

$$-|A_p n_{pf}| \frac{\phi_f - \phi_{p'}}{|d_{p'f}|} = |A_q n_{qf}| \frac{\phi_f - \phi_{q'}}{|d_{q'f}|}, \quad (3.35)$$

odkiaľ

$$\phi_f = \frac{|A_p n_{pf}| |d_{q'f}| \phi_{p'} + |A_q n_{qf}| |d_{p'f}| \phi_{q'}}{|A_p n_{pf}| |d_{q'f}| + |A_q n_{qf}| |d_{p'f}|}. \quad (3.36)$$

Na vyjadrenie hodnoty $\phi_{p'}$ použijeme aproximáciu Taylorovým polynómom prvého rádu rovnako ako v (3.20). Dosadením (3.20) do (3.36) dostaneme

$$\phi_f = \frac{|A_p n_{pf}| |d_{q'f}|}{|A_p n_{pf}| |d_{q'f}| + |A_q n_{qf}| |d_{p'f}|} (\phi_p + \nabla \phi_p \cdot d_{pp'}) + \frac{|A_q n_{qf}| |d_{p'f}|}{|A_p n_{pf}| |d_{q'f}| + |A_q n_{qf}| |d_{p'f}|} (\phi_q + \nabla \phi_q \cdot d_{qq'}). \quad (3.37)$$

Potom pre vnútorné steny $e_f, f \in F_p$ platí

$$\phi_f - \phi_{p'} = \frac{|A_q n_{qf}| |d_{p'f}|}{|A_p n_{pf}| |d_{q'f}| + |A_q n_{qf}| |d_{p'f}|} (\phi_q + \nabla \phi_q \cdot d_{qq'} - \phi_p - \nabla \phi_p \cdot d_{pp'}), \quad (3.38)$$

a pre steny $e_b, b \in B_p$ ktoré ležia na hranici $\partial\Omega$ platí

$$\phi_b - \phi_{p'} \approx \phi_b - \phi_p - \nabla \phi_p \cdot d_{pp'}. \quad (3.39)$$

3.2.3 Globálna sústava rovníc

Do rovnice (3.28) dosadíme (3.38) za $\phi_f - \phi_{p'}, f \in F_p$ a (3.39) za $\phi_b - \phi_{p'}, b \in B_p$

$$\begin{aligned} & - \sum_{f \in F_p} \frac{|A_p n_{pf}|}{|d_{p'f}|} \frac{|A_q n_{qf}| |d_{p'f}|}{|A_p n_{pf}| |d_{q'f}| + |A_q n_{qf}| |d_{p'f}|} (\phi_q - \phi_p + \nabla \phi_q \cdot d_{qq'} - \nabla \phi_p \cdot d_{pp'}) - \\ & - \sum_{b \in B_p} \frac{|A_p n_{pb}|}{|d_{p'b}|} (\phi_b - \phi_p - \nabla \phi_p \cdot d_{pp'}) = |\Omega_p| g_p. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Upravením (3.40) dostaneme výslednú schému pre anizotropickú difúziu

$$\begin{aligned} & \sum_{f \in F_p} R_{pf} (\phi_p - \phi_q) + \sum_{b \in B_p} K_{pb} \phi_p = \\ & = |\Omega_p| g_p + \sum_{f \in F_p} R_{pf} (\nabla \phi_q \cdot d_{qq'} - \nabla \phi_p \cdot d_{pp'}) + \sum_{b \in B_p} K_{pb} (\phi_b - \nabla \phi_p \cdot d_{pp'}), \end{aligned} \quad (3.41)$$

kde

$$\begin{aligned} R_{pf} &= \frac{|A_p n_{pf}| |A_q n_{qf}|}{|A_p n_{pf}| |d_{q'f}| + |A_q n_{qf}| |d_{p'f}|}, \\ K_{pb} &= \frac{|A_p n_{pb}|}{|d_{p'b}|}. \end{aligned} \quad (3.42)$$

Výsledná schéma (3.41) je zovšeobecnením schémy (3.22), kde difúzny tenzor je diagonálna matica

$$A(x) = \begin{bmatrix} \lambda(x) & 0 & 0 \\ 0 & \lambda(x) & 0 \\ 0 & 0 & \lambda(x) \end{bmatrix}. \quad (3.43)$$

3.3 Výpočet gradientu

V (3.22) a (3.41) sme dostali na pravej strane $\nabla \phi_p$ a $\nabla \phi_q$, ktoré sú tiež neznáme. Potrebujeme odvodiť vzťah na výpočet hodnoty gradientu v reprezentačných bodoch konečných objemov Ω_p . Odvodíme ho z Gauss-Ostrogradského vety

$$\int_{\Omega_p} \nabla \phi \, dx = \int_{\partial \Omega_p} \nabla \phi \frac{n_{pf}}{|n_{pf}|} \, dS. \quad (3.44)$$

Integrál po hranici objemu Ω_p rozdelíme na sumu integrálov cez steny $e_f, f \in F_p \cup B_p$

$$\int_{\Omega_p} \nabla \phi \, dx = \sum_{f \in F_p \cup B_p} \int_{e_f} \nabla \phi \frac{n_{pf}}{|n_{pf}|} \, dS. \quad (3.45)$$

Ďalej integrály aproximujeme na celej oblasti ich hodnotou v reprezentačnom bode danej oblasti vynásobenou veľkosťou danej oblasti

$$|\Omega_p| \nabla \phi_p = \sum_{f \in F_p} |e_f| \phi_f \frac{n_{pf}}{|n_{pf}|} + \sum_{b \in B_p} |e_b| \phi_0(x_b) \frac{n_{pb}}{|n_{pb}|}. \quad (3.46)$$

Potom

$$\nabla \phi_p = \frac{1}{|\Omega_p|} \left(\sum_{f \in F_p} \phi_f n_{pf} + \sum_{b \in B_p} \phi_0(x_b) n_{pb} \right). \quad (3.47)$$

3.4 Iteračný algoritmus riešenia

V tejto časti práce predstavíme riešenie nami odvodených numerických schém (3.41) a (3.22). Riešenie budeme hľadať iteračnou metódou. Algoritmus začína vypočítaním matice

ľavej strany, ktorá sa vo všetkých iteráciách nemení. V k -tej iterácii, $k = 1, 2, \dots$ budeme riešiť systém

$$\begin{aligned} \sum_{f \in F_p} R_{pf}(\phi_p^k - \phi_q^k) + \sum_{b \in B_p} K_{pb}\phi_p^k = \\ = |\Omega_p|g_p + \sum_{f \in F_p} R_{pf}(\nabla\phi_q^k \cdot d_{qq'} - \nabla\phi_p^k \cdot d_{pp'}) + \sum_{b \in B_p} K_{pb}(\phi_b - \nabla\phi_p^k \cdot d_{pp'}). \end{aligned} \quad (3.48)$$

Ako prvé vypočítame hodnotu

$$\phi_f^{k-1} = \frac{|A_p n_{pf}| |d_{q'f}|}{|A_p n_{pf}| |d_{q'f}| + |A_q n_{qf}| |d_{p'f}|} (\phi_p^{k-1} + \nabla\phi_p^{k-1} \cdot d_{pp'}) + \frac{|A_q n_{qf}| |d_{p'f}|}{|A_p n_{pf}| |d_{q'f}| + |A_q n_{qf}| |d_{p'f}|} (\phi_q^{k-1} + \nabla\phi_q^{k-1} \cdot d_{qq'}) \quad (3.49)$$

z ktorej potom dostaneme hodnotu gradientu

$$\nabla\phi_p^k = \frac{1}{|\Omega_p|} \left(\sum_{f \in F_p} \phi_f^{k-1} n_{pf} + \sum_{b \in B_p} \phi_b(x_b) n_{pb} \right). \quad (3.50)$$

Pre $k = 1$ použijeme hodnoty $\nabla\phi_p^0 = 0$ a $\phi_p^0 = 0$ pre všetky objemy. Gradient z (3.50) dosadíme do (3.48), čím dostaneme sústavu lineárnych rovníc.

V každej iterácii počítame L_2 normu starého a nového riešenia, aby sme zistili či nové riešenie nedokonvergovalo. Ak je L_2 norma menšia ako $threshold = 10^{-14}$ iterácie skončia. Nasledovný algoritmus popisuje hľadanie riešenia.

Algoritmus riešenia

Vypočítaj koeficienty R_{pf}, K_{pb}

Zostroj maticu ľavej strany

while dif > threshold **do**

Vypočítaj ϕ_f^{k-1}

Vypočítaj $\nabla\phi_p^{k-1}$

Nájdi pravú stranu

Vyrieš sústavu rovníc

dif $\leftarrow L_2$ norma starého a nového riešenia

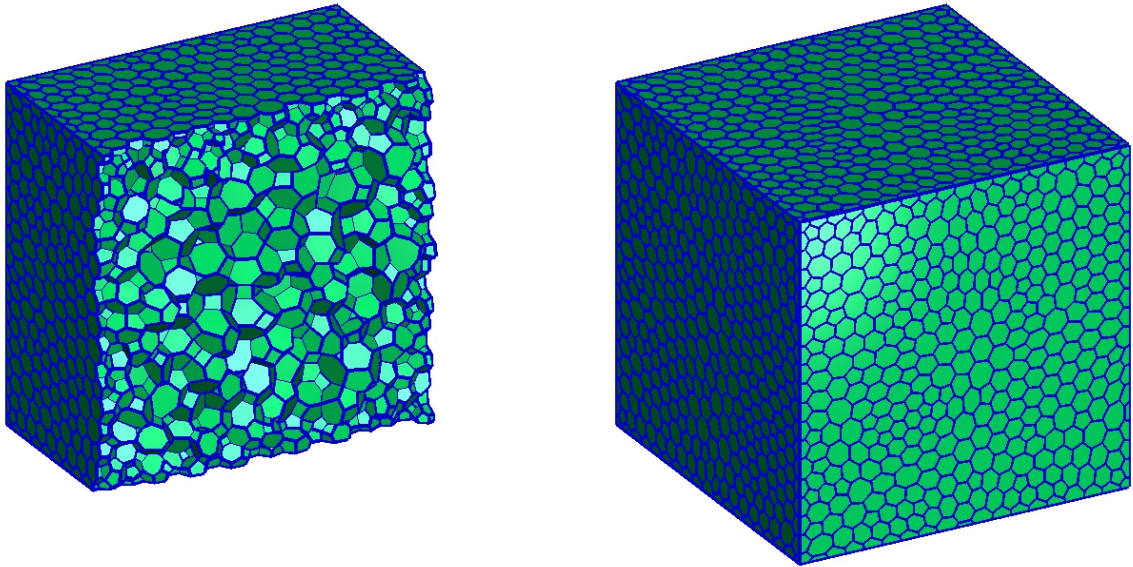
end

4 Numerické experimenty

Numerické metódy odvodené v tejto práci sme implementovali v programovacom jazyku C++. V tejto časti práce sa zameriame na testovanie týchto metód. Zvolíme rôzne typy funkcií, ktoré budú predstavovať presné riešenie. Ako okrajové podmienky použijeme presné riešenie na celej hranici. Na týchto modelových príkladoch budeme sledovať chyby numerického riešenia v L_2 norme. Taktiež budeme skúmať experimentálny rád konvergenzie (ďalej len EOC) pri zjemňovaní výpočtovej siete. V numerických experimentoch uvádzame aj počet iterácií potrebných na dokonvergovanie numerického riešenia.

4.1 Výpočtová sieť

Nerovnomerné polygonálne siete môžu byť vo všeobecnosti veľmi komplikované, viď obrázok 4.1. Ich vytvorenie pri reálnych príkladoch je väčšinou netriviálne. Preto budeme odvodené metódy testovať na simulovaných logicky štvoruholníkových sieťach. Príklady takýchto sietí sú znázornené na obrázkoch 4.2 a 4.3. Tvorbu výpočtovej siete uvedieme pre 3D prípad, v 2D sú siete vytvorené analogicky.



Obr. 4.1: Príklad komplikovanej polygonálnej siete

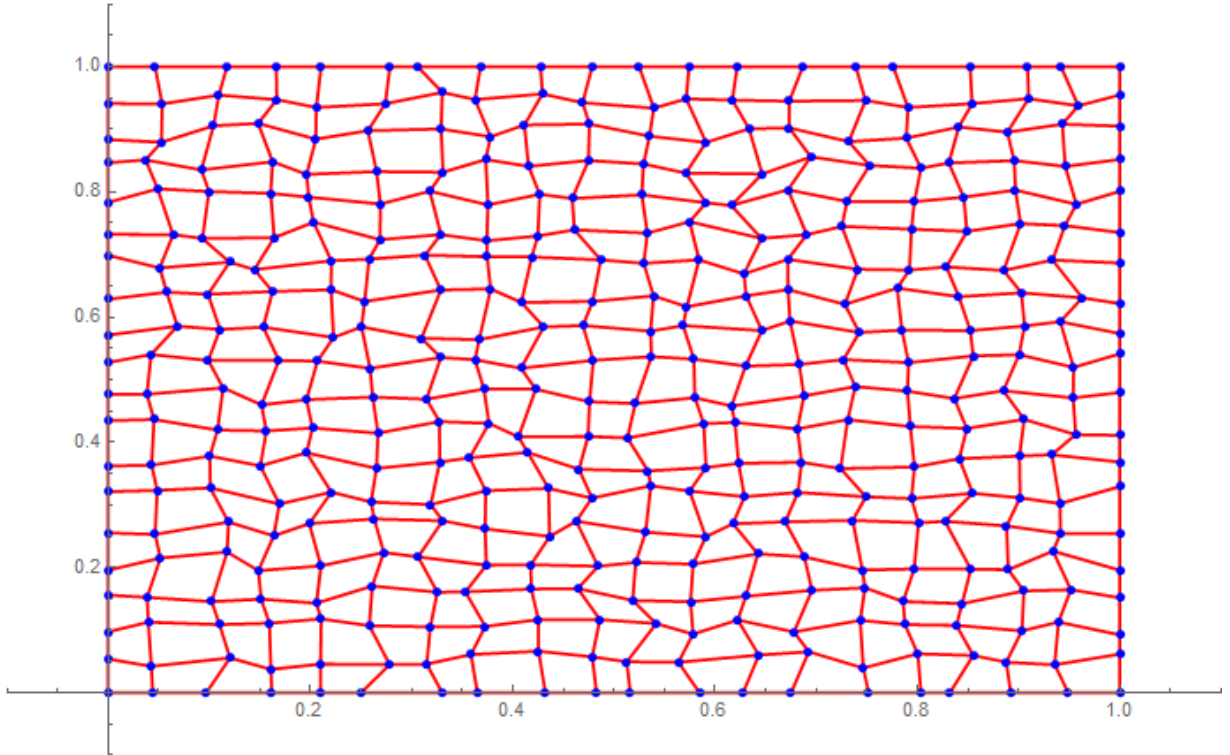
Nerovnomernú sieť vytvoríme z rovnomernej pripočítaním náhodného vektora ku každému bodu siete. Nech je daná výpočtová oblasť $\Omega = I_1 \times I_2 \times I_3$. Majme rovnomernú štvoruholníkovú sieť na oblasti Ω , kde n_x je počet konečných objemov v smere osi x , n_y v smere osi y a n_z v smere osi z . Potom dĺžky strán konečných objemov sú

$$dx = \frac{I_1}{n_x}, \quad dy = \frac{I_2}{n_y}, \quad dz = \frac{I_3}{n_z}. \quad (4.1)$$

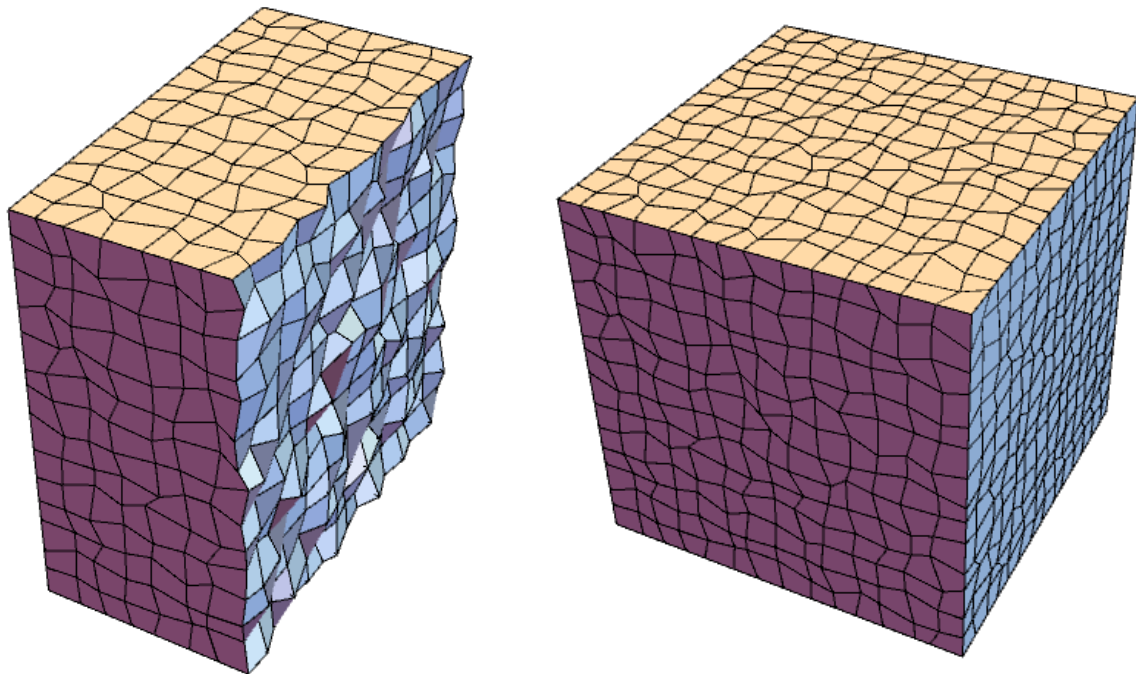
Ku všetkým bodom siete, ktoré netvoria hranicu oblasti Ω pripočítame náhodný vektor $v = (v_x, v_y, v_z)$. Pre vektor v musí platiť

$$\begin{aligned} -dx * randFactor &< v_x < dx * randFactor, \\ -dy * randFactor &< v_y < dy * randFactor, \\ -dz * randFactor &< v_z < dz * randFactor. \end{aligned} \quad (4.2)$$

kde *randFactor* vyjadruje maximálne o koľko percent dĺžky strany rovnomernej siete sa môže bod posunúť v každom smere. Toto číslo je z intervalu $[0, 0.4]$, aby sieť ostala logicky štvoruholníková. Pri väčšine numerických experimentov používame sieť s *randFactor* = 0.3. Body ležiace na hranici Ω posunieme tak aby sa zachoval interval $I_1 \times I_2 \times I_3$ oblasti Ω .



Obr. 4.2: Príklad nerovnomernej 2D siete na intervale $[0, 1] \times [0, 1]$, *randFactor* = 0.2



Obr. 4.3: Príklad nerovnormenej 3D siete na intervale $[0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$, $randFactor = 0.2$

4.2 2D experimenty

Majme lineárnu funkciu

$$\phi(x, y) = x + y. \quad (4.3)$$

V úlohe (3.1) použijeme ako neznámu funkciu (4.3). Túto úlohu budeme riešiť s nasledovnými koeficientami a pravými stranami

$$\lambda(x, y) = 1, \quad g(x, y) = 0, \quad (4.4)$$

$$\lambda(x, y) = x + y + 1, \quad g(x, y) = -2. \quad (4.5)$$

Pre koeficient (4.4) dostaneme výsledky v tabuľke 4.1.

Sieť	L2	EOC	Iter
18×22	2.84961e-15	-	15
36×44	1.38744e-15	-	16
72×88	2.64482e-15	-	16
144×196	5.98365e-15	-	24

Tabuľka 4.1: L_2 norma chyby pre riešenie úlohy (4.3) s koeficientom (4.4)

Keďže chyba okolo rádu 1×10^{-15} sa dá považovať za strojovú chybu, tak tabuľka 4.1 ukazuje, že metóda dáva presné riešenie pre lineárnu funkciu s konštantným koeficientom

λ . Riešenie pre túto úlohu je presné pretože funkciu λ nemusíme aproximovať a taktiež v aproximácii (3.11) dostávame pre lineárnu funkciu identitu.

Pre lineárnu funkciu (4.3) s koeficientom (4.5) dostaneme nasledujúcu tabuľku výsledkov

Sieť	L2	EOC	Iter
18×22	0.000391875	-	15
36×44	9.29827e-05	2.07536	17
72×88	2.2733e-05	2.03217	16
144×196	5.18235e-06	2.13311	28

Tabuľka 4.2: L_2 norma chyby pre riešenie úlohy (4.3) s koeficientom (4.5)

Tabuľka 4.2 naznačuje, že metóda by mohla byť druhého rádu presnosti.

Ďalej nech je daná funkcia

$$\phi(x, y) = \frac{x^2 + y^2}{2} \quad (4.6)$$

a difúzny koeficient

$$\lambda(x, y) = \sqrt{x^2 + y^2} + 1. \quad (4.7)$$

Dostávame pravú stranu

$$g(x, y) = -3\sqrt{x^2 + y^2} - 2 \quad (4.8)$$

Pre tieto funkcie dostaneme tabuľku 4.3.

Sieť	L2	EOC	Iter
18×22	0.000546886	-	21
36×44	0.000134424	2.02445	25
72×88	3.25881e-05	2.04437	26
144×196	7.39892e-06	2.13896	29

Tabuľka 4.3: L_2 norma chyby pre riešenie úlohy (4.6) s koeficientom (4.7)

Tabuľka 4.3 rovnako ako 4.2 ukazuje, že by sa malo jednať o metódu druhého rádu.

Ďalšie experimenty v tejto časti budú skúmať anizotropickú úlohu (3.24). Ako prvú vyskúšame lineárnu funkciu (4.3) s koeficientom

$$A(x, y) = \begin{bmatrix} 1 & 0.25 \\ 0.25 & 0.5 \end{bmatrix}, \quad (4.9)$$

pre ktoré dostaneme nulovú pravú stranu.

Sieť	L2	EOC	Iter
18×22	7.10025e-14	-	48
36×44	3.27728e-14	-	48
72×88	2.17758e-14	-	55
144×196	6.4413e-15	-	58

Tabuľka 4.4: L_2 norma chyby pre riešenie úlohy (4.3) s koeficientom (4.9)

Rovnako ako v neanizotropickom prípade, aj teraz sme dostali presné riešenie pre lineárnu funkciu.

Ďalej budeme skúmať rád konvergenzie na funkcii

$$\phi(x, y) = x^3 + y^3, \quad (4.10)$$

s anizotropickým koeficientom

$$A(x, y) = \begin{bmatrix} x + y + 1 & 0.5 \\ 0.5 & x + y + 1 \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

a pravou stranou

$$g(x, y) = -6x - 9x^2 - 6y - 9y^2 - 12xy. \quad (4.12)$$

Aj pre túto úlohu dostávame EOC približne rovné 2, zobrazené v tabuľke 4.5.

Sieť	L2	EOC	Iter
18×22	0.0018855	-	22
36×44	0.000466029	2.01646	26
72×88	0.000109484	2.0897	29
144×196	2.61786e-05	2.06426	35

Tabuľka 4.5: L_2 norma chyby pre riešenie úlohy (4.10) s koeficientom (4.11)

4.3 3D experimenty

Majme lineárnu funkciu

$$\phi(x, y, z) = x + y + z \quad (4.13)$$

a konštantný koeficient

$$\lambda(x, y, z) = 1. \quad (4.14)$$

Túto funkciu použijeme ako presné riešenie aj ako okrajovú podmienku pre diferenciálnu rovnicu (3.1), kde dostaneme nulovú pravú stranu.

Sieť	L2	EOC	Iter
$8 \times 10 \times 12$	3.08874e-15	-	15
$16 \times 20 \times 24$	4.19874e-15	-	15
$32 \times 40 \times 48$	6.99507e-15	-	15
$64 \times 80 \times 96$	3.60595e-15	-	15

Tabuľka 4.6: L_2 norma chyby pre riešenie úlohy (4.13) s koeficientom (4.14)

V ďalšom budeme riešiť rovnakú úlohu s funkciami

$$\phi(x, y, z) = e^{x+y+z} + z, \quad (4.15)$$

$$\lambda(x, y, z) = x^2 + 1, \quad (4.16)$$

$$g(x, y, z) = -2e^{x+y+z} - 3e^{x+y+z}(1 + x^2). \quad (4.17)$$

Sieť	L2	EOC	Iter
$8 \times 10 \times 12$	0.0172678	-	16
$16 \times 20 \times 24$	0.00404798	2.09281	15
$32 \times 40 \times 48$	0.00105313	1.94252	17
$64 \times 80 \times 96$	0.00026445	1.99362	18

Tabuľka 4.7: L_2 norma chyby pre riešenie úlohy (4.15) s koeficientom (4.16)

Ako posledný experiment uvidíme numerické riešenie anizotropickej úlohy (3.24). Najprv pre lineárnu funkciu (4.13) s anizotropickým koeficientom

$$A(x, y, z) = \begin{bmatrix} 1 & 0.1 & 0.05 \\ 0.1 & 1 & 0.1 \\ 0.05 & 0.1 & 1 \end{bmatrix}, \quad (4.18)$$

pravou stranou

$$g(x, y, z) = 0, \quad (4.19)$$

potom pre exponenciálnu funkciu (4.15) s koeficientom

$$A(x, y, z) = \begin{bmatrix} x+1 & 0.1 & 0.05 \\ 0.1 & y+1 & 0.1 \\ 0.05 & 0.1 & z+1 \end{bmatrix} \quad (4.20)$$

a pravou stranou

$$g(x, y, z) = -3.5e^{x+y+z} - e^{x+y+z}(1+x) - e^{x+y+z}(1+y) - e^{x+y+z}(1+z). \quad (4.21)$$

Dostaneme nasledovné L_2 chyby a EOC v tabuľkách 4.8 a 4.9.

Sieť	L2	EOC	Iter
$8 \times 10 \times 12$	5.95663e-15	-	27
$16 \times 20 \times 24$	1.32856e-14	-	25
$32 \times 40 \times 48$	1.16048e-14	-	27
$64 \times 80 \times 96$	1.02561e-14	-	28

Tabuľka 4.8: L_2 norma chyby pre riešenie úlohy (4.13) s koeficientom (4.18)

Sieť	L2	EOC	Iter
$8 \times 10 \times 12$	0.00245321	-	26
$16 \times 20 \times 24$	0.000561656	2.12691	29
$32 \times 40 \times 48$	0.00110697	2.05947	30
$64 \times 80 \times 96$	0.000269728	2.03704	29

Tabuľka 4.9: L_2 norma chyby pre riešenie úlohy (4.15) s koeficientom (4.20)

Na tabuľkách 4.6 a 4.8 vidíme, že pre lineárnu funkciu s konštantným koeficientom λ , alebo konštantným tenzorom A dostávame presné riešenie pre anizotropickú aj izotropickú úlohu. Tabuľky 4.7 a 4.9 potvrdzujú 2. rád presnosti metódy aj v 3D.

5 Záver

Zámerom práce bolo odvodiť numerickú schému na riešenie úlohy anizotropickej difúzie na nerovnomerných sieťach. V práci sme vychádzali z metódy konečných objemov. Ako prvé sme odvodili numerickú schému pre izotropickú difúziu, ktorú sme zovšeobecнили na anizotropickú. Pre potreby riešenia oboch numerických schém sme odvodili aproximáciu hodnoty gradientu neznámej funkcie na konečnom objeme. Pri aproximácii gradientu sme vychádzali z Gauss-Ostrogradského vety. Taktiež sme navrhli algoritmus riešenia odvodených numerických schém, ktorý sme implementovali v programovacom jazyku C++.

Numerické experimenty sme uskutočnili na simulovaných logicky štvoruholníkových sieťach. Tie ukázali, že ak je neznáma funkcia lineárna a difúzny koeficient konštantný, dostaneme našou metódou presné riešenie pre ľubovollnú výpočtovú sieť. Pre všetky iné testované funkcie sme pri zjemňovaní výpočtovej siete dostali experimentálny rád konvergenzie rovný dvom. Tieto výsledky sa zhodujú s experimentami vykonanými nami navrhnutou metódou v spoločnosti AVL na všeobecných polygonálnych sieťach, ktorých príklad je znázornený na obrázku 4.1.

Prínosom tejto práce je vytvorenie numerickej metódy na riešenie izotropickej a anizotropickej Poissonovej rovnice s Dirichletovými okrajovými podmienkami. Na rozdiel od predchádzajúcich prác využívame na aproximáciu gradientu riešenia Gauss-Ostrogradského vetu a kombinujeme výpočet gradientu a bilanciu tokov s riešením lineárneho systému iteračným spôsobom. Odvodená metóda by sa dala jednoducho zovšeobecniť na úlohu so zložitejšími okrajovými podmienkami.

Literatúra

- [1] Arsenin V. J., Matematická fyzika, Základné rovnice a špeciálne funkcie. ALFA, Bratislava, 1977
- [2] AVL, List, GmbH, Graz, <https://www.avl.com/web/guest/home>
- [3] Eymard R., Gallouet T., Herbin R., Finite volume methods. Handbook of numerical analysis. North Holland/Elsevier, Amsterdam, 2000
- [4] Eymard R., Handlovicova A., Mikula K., Study of a finite volume scheme for the regularised mean curvature flow level set equation, IMA Journal on Numerical Analysis, Vol. 31, pp. 813-846, 2011
- [5] Frolkovič P., Mikula K., Hahn J., Martin D., Basara B., Flux Balanced Approximation with Least-squares Gradient for Diffusion Equation on Polyhedral Mesh, submitted to journal Discrete and continuous dynamical systems, 2019
- [6] Hahn J., Mikula K., Frolkovic P., Basara B., Inflow-Based Gradient Finite Volume Method for a Propagation in a Normal Direction in a Polyhedron Mesh, Journal of Scientific Computing, Volume 72, Issue 1, pp 442–465, doi:10.1007/s10915-017-0364-4, 2017
- [7] Hrapková L., Inflow-implicit/outflow-explicit metódy riešenia parciálnych diferenciálnych rovníc na nerovnomerných sieťach. Diplomová práca, Bratislava, 2018
- [8] Niceno, B., A three dimensional finite volume method for incompressible Navier-Stokes equations on unstructured, staggered grids, European Conference on Computational Fluid Dynamics, ECCOMAS CFD, 2006