

UNIVERZITA PALACKÉHO V OLOMOUCI
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA
KATEDRA MATEMATICKÉ ANALÝZY A APLIKACÍ MATEMATIKY

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Rovnice difuze



Vedoucí bakalářské práce:
RNDr. Tomáš Fůrst, Ph.D.
Rok odevzdání: 2011

Vypracovala:
Adéla Tománková
MAP, III. ročník

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem vytvořila tuto bakalářskou práci samostatně pod vedením pana Tomáše Fürsta výhradně s použitím uvedené literatury.

V Olomouci dne 21. dubna 2011

Poděkování

Na tomto místě bych chtěla poděkovat především svému vedoucímu bakalářské práce, panu Tomáši Fürstovi, za čas, který mi věnoval, a za cenné rady a připomínky. Také bych ráda poděkovala své rodině a příteli, že mě po celou dobu studia podporovali.

Obsah

Použité značení	4
Úvod	5
1 Pár slov k difuzi	6
2 Odvození rovnice difuze	7
3 Analytické řešení rovnice difuze v \mathbb{R}	13
3.1 Fourierovy řady	14
3.2 Separace proměnných	15
4 Numerické řešení rovnice difuze – metoda sítí	22
4.1 Explicitní metoda	23
4.1.1 Explicitní metoda pro jednu prostorovou proměnnou	23
4.1.2 Analytické řešení versus Explicitní metoda v jedné dimenzi	25
4.1.3 Explicitní metoda pro více prostorových proměnných	25
4.2 Implicitní metoda	27
4.2.1 Implicitní metoda pro jednu prostorovou proměnnou	27
4.2.2 Analytické řešení versus Implicitní metoda v jedné dimenzi	28
4.2.3 Implicitní metoda pro více prostorových proměnných	29
4.3 Crankovo - Nicolsonovo schéma	30
Závěr	31
Literatura	33

Použité značení

\mathbb{N}	množina všech přirozených čísel
\mathbb{N}_0	množina všech přirozených čísel včetně nuly
\mathbb{R}	množina všech reálných čísel
\mathbb{R}^n	n -rozměrný prostor
$C(\Omega)$	třída spojitých funkcí na množině Ω
$C^1(\Omega)$	třída spojitých a spojitě diferencovatelných funkcí na množině Ω
\mathbf{F}, \mathbf{n}	prvky \mathbb{R}^n
$\mathbf{F} \cdot \mathbf{n}$	skalární součin vektorů \mathbf{F} a \mathbf{n}
$\int f(x) dx$	Riemannův intergál funkce f
$\iint f(x, y) dS$	Lebesgueův plošný integrál funkce f
$\iiint f(x, y, z) dV$	Lebesgueův objemový integrál funkce f
$\partial\Omega$	hranice množiny Ω
$\bar{\Omega}$	uzávěr množiny Ω
\square	konec důkazu
\diamond	konec příkladu

Úvod

V této práci bych se chtěla zabývat rovnicí difuze, která spadá do oblasti parciálních diferenciálních rovnic. Je to velmi široké a složité téma, proto se omezím na jeho nejjednodušší část a tento text bude pouze určitým úvodem do matematického modelu difuze.

V první části bych se chtěla zabývat tím, jak přejít od reality k matematickému modelu, tedy podrobně odvodit rovnici difuze. Další část by se měla týkat toho, jak analyticky vyjádřit řešení této rovnice v jedné dimenzi s různými okrajovými podmínkami separací proměnných neboli Fourierovou metodou a uvést vlastní příklady, jejichž řešení budu zobrazovat v Matlabu jako grafy i animace. Přirozeně bude následovat numerické řešení. Pro tyto účely jsem si vybrala metodu sítí, na kterou bych se chtěla podívat ve více variantách. Nejprve si vyzkouším tuto metodu v jedné prostorové proměnné a řešení se pokusím srovnat s již nalezeným analytickým řešením v příkladech z předchozí části práce a zjistit, jestli vybraná metoda vhodně aproximuje analytické řešení. Numericky budeme řešit rovnici difuze i ve vícedimenzionálním prostoru.

Hlavním cílem a přínosem této práce budou vlastní kódy v Matlabu, pomocí kterých si bude moci uživatel po zadání počátečních podmínek zobrazit graf numerického řešení rovnice difuze a animaci, kde bude vidět, jak se řešení mění s časem.

1. Pár slov k difuzi

Difuze je fyzikální děj, při kterém dochází k vzájemnému prolínání částic jedné látky mezi částice druhé látky v důsledku rozdílných koncentrací. Říkáme, že tyto látky difundují. Částice látky se pohybují tak, aby byla koncentrace dané látky stejná ve všech bodech oblasti, kde difuze probíhá, tedy aby nastala rovnováha.

Proces difuze se odehrává na základě náhodných pohybů molekul (tzv. Brownův pohyb) a jejich srážek. Tento pohyb je chaotický a nikdy nemůžeme říci, kde se která částice látky bude v určitém čase nacházet. Dá se však vypočítat, jaká bude její přibližná vzdálenost od původní polohy. Tento problém vyřešili Albert Einstein a Marian Smoluchowski na počátku 20. století (dle [7]). Matematický model samovolného chaotického pohybu částic se nazývá „náhodná procházka“.

Nejprve se vědci domnívali, že difuze je záležitostí pouze tekutin. Může však probíhat nejen v kapalinách a plynech, ale i v pevných látkách. Její rychlost je ovlivněna řadou faktorů. Závisí na střední volné dráze částic (proto je difuze v plynech rychlejší než v kapalinách), na teplotě látek a v kapalinách na jejich rozpustnosti. V pevných látkách můžeme mluvit o tzv. tepelné difuzi, ke které dochází nyní na základě jiných „koncentrací tepla“. V tomto případě je faktorem ovlivňujícím rychlost difuze, tedy rychlost „transportu“ tepla, tepelná vodivost (každý si jistě představí, co se děje, když zahříváme jeden konec kovové tyče).

Příkladem difuze je osmóza, kdy látky o různých koncentracích difundují přes polopropustnou membránu, nebo jednoduše příprava čaje, při které látky sáčku čaje difundují do horké vody. Následující text bude pojednávat o toku látek určitou oblastí, ale stejně tak bychom mohli hovořit o tepelném toku, stačilo by zaměnit některé pojmy, které jsou však analogické. V další kapitole odvodíme rovnici difuze, která vypadá z matematického hlediska naprosto stejně jako rovnice vedení tepla.

2. Odvození rovnice difuze

Pro odvození rovnice difuze potřebujeme zavést několik pojmů a vět.

Definice 2.1. Nechť $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ je reálná funkce diferencovatelná v bodě $\mathbf{x}_0 = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$. Vektor

$$\nabla f(\mathbf{x}_0) = \left(\frac{\partial f(\mathbf{x}_0)}{\partial x_1}, \frac{\partial f(\mathbf{x}_0)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f(\mathbf{x}_0)}{\partial x_n} \right)$$

nazveme **gradientem funkce f v bodě \mathbf{x}_0** .

Gradient funkce f v bodě \mathbf{x}_0 vyjadřuje směr největšího růstu funkce f v tomto bodě. Je to vektor, který je kolmý na vrstevnici grafu funkce f v bodě \mathbf{x}_0 . Je tedy jistou analogií k derivaci v bodě reálné funkce jedné reálné proměnné.

Definice 2.2. Nechť $\mathbf{F} = (f_1, \dots, f_n) : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n$ je vektorové pole spojitě diferencovatelné v bodě \mathbf{x}_0 . Číslo

$$\operatorname{div} \mathbf{F}(\mathbf{x}_0) = \frac{\partial f_1(\mathbf{x}_0)}{\partial x_1} + \dots + \frac{\partial f_n(\mathbf{x}_0)}{\partial x_n}$$

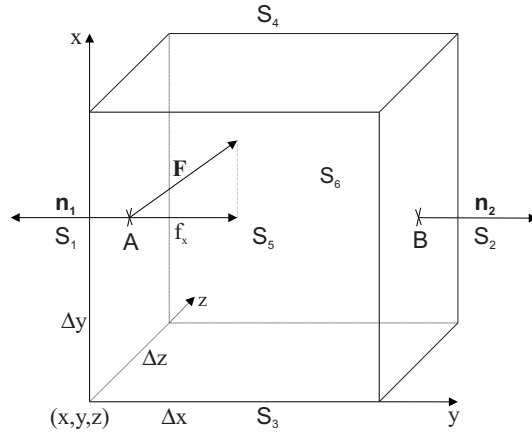
nazveme **divergencí vektorového pole \mathbf{F} v bodě \mathbf{x}_0** .

Divergence vektorového pole vyjadřuje velikost zdroje vektorového pole.

Definice 2.3. Difusní tok je množství látky $[kg]$, které projde jednotkou plochy $[m^2]$ za jednotku času $[s]$. Difusní tok budeme značit \mathbf{J} a jeho jednotkou je $kg m^{-2} s^{-1}$.

Velmi důležitým stavebním kamenem pro odvození rovnice difuze je Gaussova věta. Její důkaz je uveden v literatuře (například reference [4], str. 389), takže si ukážeme jen její odvození, které nám zároveň pomůže pochopit její smysl – fyzikální význam věty.

Mějme omezenou oblast $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, kterou si rozdělíme na nekonečně mnoho infinitezimálních krychlí. Budeme počítat tok vektorového pole $\mathbf{F} = (f_x, f_y, f_z)$ ven z jedné z těchto krychlí. K tomu postačí sečíst toky přes šest jednotlivých



Obrázek 1: Krychle

stěn krychle. Uvažujme souřadnicový systém s počátkem v bodě (x, y, z) (jeden z vrcholů krychle), osy pak opisují 3 hrany krychle o délkách Δx , Δy a Δz , viz. Obrázek 1. Stěnu tvořenou body (x, y, z) , $(x, y, z + \Delta z)$, $(x, y + \Delta y, z + \Delta z)$ a $(x, y + \Delta y, z)$ označíme S_1 , tok touto stěnou \mathbf{J}_1 a normálový vektor ke stěně S_1 \mathbf{n}_1 . Stěnu tvořenou body $(x + \Delta x, y, z)$, $(x + \Delta x, y, z + \Delta z)$, $(x + \Delta x, y + \Delta y, z + \Delta z)$ a $(x + \Delta x, y + \Delta y, z)$ označíme S_2 , tok touto stěnou \mathbf{J}_2 a normálový vektor ke stěně S_2 \mathbf{n}_2 . Pro zbylé 4 stěny analogicky.

Tok stěnou S_1 vyjádříme jako integrál přes tuto plochu z x-ové složky \mathbf{F} se znaménkem „-“ (protože nás zajímá tok ve směru vnějšího normálového vektoru, tzn. ven z krychle, viz. Obrázek 1):

$$J_1 = - \iint_{S_1} f_x \, dydz.$$

Protože se jedná o hodně malou krychličku, hodnoty x-ové složky \mathbf{F} se nebudou na S_1 významně měnit. Vezměme tedy pouze hodnotu f_x ve středu stěny S_1 , který označíme písmenem A , a můžeme psát:

$$J_1 \approx -f_x(A)\Delta y\Delta z, \quad \text{kde } \Delta y\Delta z \text{ je obsah plochy } S_1.$$

Analogicky se vyjádří tok přes stěnu S_2 :

$$J_2 \approx f_x(B)\Delta y\Delta z.$$

Podívejme se nyní na hodnoty $f_x(A)$ a $f_x(B)$:

$$f_x(B) = f_x(A) + (\text{změna složky } f_x \text{ ve směru osy } x \text{ na intervalu } (x, x + \Delta x))$$

Protože hrana krychle je velmi malá, hodnoty změny složky f_x na ní nebudou významné a místo abychom sčítali změny na úsečce, přes kterou nás změna zajímá, vynásobíme změnu složky f_x v jednom bodě délkou hrany krychle. Za tento bod si zvolíme (x, y, z) . Na takovou volbu máme právo (i když bychom si podle předchozích úvah měli zvolit bod A), protože rozdíl těchto změn bude velmi malý, podobně jako v předchozím...

Neboli:

$$f_x(B) \approx f_x(A) + \frac{\partial f_x(x, y, z)}{\partial x} \Delta x.$$

Tedy:

$$J_2 \approx \left(f_x(A) + \frac{\partial f_x(x, y, z)}{\partial x} \Delta x \right) \Delta y \Delta z.$$

Jak již bylo předesláno, celkový tok z krychle bude roven součtu toků přes stěny krychle, proto si vyjádříme $J_1 + J_2$:

$$J_1 + J_2 \approx \frac{\partial f_x(x, y, z)}{\partial x} \Delta x \Delta y \Delta z.$$

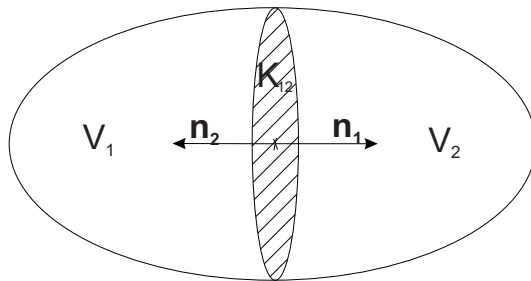
Zcela stejným postupem bychom odvodili, jak vypadá $J_3 + J_4$ a $J_5 + J_6$:

$$J_3 + J_4 \approx \frac{\partial f_y(x, y, z)}{\partial y} \Delta x \Delta y \Delta z$$

$$J_5 + J_6 \approx \frac{\partial f_z(x, y, z)}{\partial z} \Delta x \Delta y \Delta z.$$

A pro celkový tok J platí:

$$\begin{aligned} J &\approx \left(\frac{\partial f_x(x, y, z)}{\partial x} + \frac{\partial f_y(x, y, z)}{\partial y} + \frac{\partial f_z(x, y, z)}{\partial z} \right) \Delta x \Delta y \Delta z = \\ &= \operatorname{div} \mathbf{F}(x, y, z) \Delta V, \end{aligned}$$



Obrázek 2: Součet toků

kde ΔV je objem infinitezimální krychle. Tento tok lze také vyjádřit takto:

$$J = \iint_{\text{povrch krychle}} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \, dS.$$

A abychom dostali tok celou oblastí Ω , sečteme toky přes všechny infinitezimální krychle. Uveďme si na jednoduchém příkladě, proč to tak můžeme provést. Mějme nějakou uzavřenou plochu K , která ohraničuje objem V , který rozdělíme na dvě části V_1 a V_2 plochou K_{12} (čímž dostaneme i dvě uzavřené plochy K_1 a K_2), a spojitě vektorové pole \mathbf{T} (viz. Obrázek 2). Budeme počítat tok tohoto vektorového pole hranicemi množin V_1 a V_2 .

Tok hranicí množiny V_1 :

$$\iint_{K_1} \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} \, dS + \iint_{K_{12}} \mathbf{T} \cdot \mathbf{n}_1 \, dS$$

Tok hranicí množiny V_2 :

$$\iint_{K_2} \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} \, dS + \iint_{K_{12}} \mathbf{T} \cdot \mathbf{n}_2 \, dS$$

Zřejmě platí, že $\mathbf{n}_2 = -\mathbf{n}_1$, což způsobí, že při sečtení toků hranicemi množin V_1 a V_2 se druhé sčítance u obou toků odečtou (plyne ze spojitosti vektorového pole \mathbf{T}), a dostaneme tok hranicí množiny V .

Pro spočítání celkového toku oblastí Ω si tedy můžeme dovolit sečíst toky infinitezimálními krychlemi a dostáváme:

$$\iint_{\partial\Omega} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \, dS \approx \iiint_{\Omega} \text{div } \mathbf{F} \, dV.$$

A tím jsme odvodili Gaussovu větu, zvanou často také větou o divergenci nebo Gauss-Ostrogradského, kterou si uvedeme ve znění, které potřebujeme pro odvození rovnice difuze:

Věta 2.1. (Gaussova) *Nechť $\Omega \in \mathbb{R}^3$ je oblast ohraničená plochou $\partial\Omega$, v jejímž každém bodě existuje vnější normálový jednotkový vektor \mathbf{n} k ploše $\partial\Omega$. Dále nechť $\mathbf{F} = (f_1, f_2, f_3) : \bar{\Omega} \mapsto \mathbb{R}^3$ je vektorové pole takové, že f_i jsou spojité na $\bar{\Omega}$ a $\forall \mathbf{x} \in \Omega, \forall i \in \{1, 2, 3\}$ existují parciální derivace $\frac{\partial f_i}{\partial x_i}(\mathbf{x})$, které jsou spojité na Ω a spojitě prodloužitelné na $\bar{\Omega}$. Pak*

$$\iiint_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{F} \, dV = \iint_{\partial\Omega} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \, dS.$$

Důkaz: viz. [4], str. 389. □

Pro odvození rovnice difuze dále potřebujeme znát vztah mezi již zmíněným difusním tokem a koncentrací. K tomu nám poslouží tzv. Fickův zákon, někdy nazýván také První Fickův zákon či Zákon difuze (viz. [8]). Je třeba poznamenat, že se jedná o empirii. Roku 1855 Adolf Fick, německý fyziolog, poprvé zveřejnil v článku „On Liquid Diffusion“ (viz. [10]) zákony týkající se transportu látek v tekutinách včetně Zákona difuze, který je založený na pokusech, při kterých zjišťoval koncentrace a tok soli ve vodním roztoku.

Zákon difuze platí pouze v izotropních a izomorfních materiálech. Izotropní jsou takové, které mají ve všech směrech stejné mechanické vlastnosti, izomorfní mají v každém bodě stejné složení.

Zákon 2.1 (Fickův). *Velikost difusního toku v izomorfních izotropních materiálech je přímo úměrná gradientu koncentrace:*

$$\mathbf{J} = -D\nabla c,$$

kde $D \in \mathbb{R}^+$ je difusní koeficient [m^2/s] a c je koncentrace [kg/m^3].

Můžeme tedy říct, že difusní tok probíhá proti směru gradientu koncentrace a je úměrný jeho velikosti.

Nyní máme potřebný matematický a fyzikální aparát a přejdeme k vlastnímu odvození rovnice difuze.

Mějme libovolnou oblast $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, která je neměnná v čase a splňuje předpoklady Gaussovy věty. Nechť funkce $c = c(t, \mathbf{x}) : \mathbb{R} \times \Omega \mapsto \mathbb{R}$, kde $t \in \mathbb{R}$ je čas a $\mathbf{x} \in \Omega$, je třídy $C^1(\mathbb{R} \times \Omega)$ a udává koncentraci v daném bodě a čase v oblasti Ω , nechť $\mathbf{J} : \mathbb{R} \times \Omega \mapsto \mathbb{R}^3$ je vektorové pole difusního toku, které také splňuje předpoklady Gaussovy věty, a \mathbf{n} je vnější normálový jednotkový vektor k ploše $\partial\Omega$.

Podle zákona zachování hmotnosti platí, že časová změna hmotnosti difundující látky v oblasti Ω je rovna čistému toku látky ven z oblasti Ω , neboli:

$$-\frac{d}{dt} \iiint_{\Omega} c(t, \mathbf{x}) dV = \iint_{\partial\Omega} \mathbf{J}(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS. \quad (1)$$

Podle Gaussovy věty můžeme pravou stranu rovnosti (1) upravit do tohoto tvaru:

$$\iint_{\partial\Omega} \mathbf{J}(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) dS = \iiint_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{J}(t, \mathbf{x}) dV.$$

Protože je funkce c třídy $C^1(\mathbb{R} \times \Omega)$, podle Lebesgueovy věty, uváděné v cizojazyčné literatuře jako „Lebesgue’s Dominated Convergence Theorem“ (reference [9], věta 5.36¹) na levé straně rovnosti (1) můžeme zaměnit pořadí derivace a integrálu. Celkově tedy dostaneme:

$$\iiint_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} c(t, \mathbf{x}) dV = - \iiint_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{J}(t, \mathbf{x}) dV. \quad (2)$$

Protože na obou stranách rovnosti (2) integrujeme přes stejnou oblast Ω , můžeme psát:

$$\iiint_{\Omega} \left(\frac{\partial}{\partial t} c(t, \mathbf{x}) + \operatorname{div} \mathbf{J}(t, \mathbf{x}) \right) dV = 0.$$

¹Tato věta pojednává o záměně limity a integrálu, ale stačí si uvědomit, že derivace je definována jako limita, a záměna derivace a integrálu je důsledkem této věty.

Vzhledem k tomu, že oblast Ω je libovolná a funkce za znaméním integrálu je spojitá na Ω , rovnost bude platit právě tehdy, když integrovaná funkce bude nulová². Tedy

$$\frac{\partial}{\partial t}c(t, \mathbf{x}) + \operatorname{div} \mathbf{J}(t, \mathbf{x}) = 0.$$

Nyní dosazením za difusní tok \mathbf{J} z 1. Fickova zákona dostaneme:

$$\operatorname{div} \mathbf{J}(t, \mathbf{x}) = \operatorname{div} (-D\nabla c(t, \mathbf{x})) = -D\operatorname{div} (\nabla c(t, \mathbf{x})) = -D\Delta c(t, \mathbf{x}),$$

kde $\Delta c(t, \mathbf{x}) = \frac{\partial^2 c(t, \mathbf{x})}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 c(t, \mathbf{x})}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 c(t, \mathbf{x})}{\partial x_3^2}$ pro $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$. Tedy

$$\frac{\partial}{\partial t}c(t, \mathbf{x}) - D\Delta c(t, \mathbf{x}) = 0 \tag{3}$$

respektive

$$\frac{\partial}{\partial t}c(t, \mathbf{x}) = D\Delta c(t, \mathbf{x}) \tag{4}$$

což je rovnice difuze. Jak je vidět, jedná se parciální diferenciální rovnici, která spadá do kategorie lineárních parabolických rovnic.

3. Analytické řešení rovnice difuze v \mathbb{R}

Při studiu tepelné vodivosti Joseph Fourier (1768-1830) – francouzský fyzik a matematik, o jehož práci se opírají některé oblasti matematické analýzy a jeho teorie jsou velmi důležitou součástí matematiky a přírodních věd – vymyslel metody pro řešení některých parciálních diferenciálních rovnic (viz. například [4]). V této práci se budeme zabývat pouze jednou z nich – metodou separace proměnných. Nejprve se podíváme na Fourierovy řady a jejich vlastnosti, které budeme potřebovat pro řešení rovnice difuze, a potom uvedeme Fourierovu metodu neboli metodu separace proměnných, pomocí které budeme schopni vyjádřit analytické řešení ve tvaru nekonečné řady funkcí. V této kapitole se podíváme na dva typy okrajových podmínek – Dirichletovy a Neumannovy.

²Kdybychom neměli předpoklad spojitosti integrované funkce, z dané rovnosti bychom dostali, že integrovaná funkce bude nulová pouze skoro všude na Ω .

3.1. Fourierovy řady

J. Fourier se začal zabývat Fourierovými řadami za účelem vyřešení rovnice vedení tepla, ale ukázalo se, že mají i mnohá další využití, například v elektroinženýrství, akustice, optice nebo kvantové mechanice. Tento pojem by si určitě zasloužil rozsáhlejší kapitulu, ale to není předmětem mé práce. V této kapitole pouze definujeme Fourierovy řady a uvedeme, jak vypadají Fourierovy řady sudých a lichých funkcí, čehož později využijeme při hledání řešení rovnice difuze.

Definice 3.1. Nechť funkce $f : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ je Riemannovsky integrovatelná na intervalu $\langle a, a + 2l \rangle$, kde $a \in \mathbb{R}$ a $l \in (0, \infty)$. Řadu

$$\frac{A_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(A_n \cos\left(\frac{n\pi x}{l}\right) + B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) \right)$$

takovou, že:

- $A_n = \frac{1}{l} \int_a^{a+2l} f(x) \cos\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx \quad \forall n \in \mathbb{N}_0$
- $B_n = \frac{1}{l} \int_a^{a+2l} f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx \quad \forall n \in \mathbb{N}$

nazveme Fourierovou řadou funkce f na $\langle a, a + 2l \rangle$ a koeficienty A_n a B_n se nazývají Fourierovy koeficienty funkce f na $\langle a, a + 2l \rangle$.

Tedy každá periodická funkce je váženým součtem cosinů a sinů s váhami A_n a B_n .

Věta 3.1. Nechť funkce f je po částech hladká na $(-l, l)$. Pak Fourierova řada funkce f na $(-l, l)$ konverguje k f bodově v každém bodě spojitosti funkce f .

Důkaz: viz. [4] str. 267. □

Věta 3.2. Nechť funkce f je integrovatelná na $(-l, l)$. Pak platí:

1. Je-li f sudá na $(-l, l)$, pak její Fourierova řada je řada kosinová a platí, že $A_n = \frac{2}{l} \int_0^l f(x) \cos\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx \quad \forall n \in \mathbb{N}_0$ a $B_n = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N}$.

2. Je-li f lichá na $(-l, l)$, pak její Fourierova řada je řada sinová a platí, že $A_n = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N}_0$ a $B_n = \frac{2}{l} \int_0^l f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx \quad \forall n \in \mathbb{N}$.

Důkaz:

1. Protože je funkce sinus lichá a funkce f sudá na $(-l, l)$, součin těchto funkcí je funkce lichá a proto $B_n = \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx = 0 \quad \forall n$. A pro A_n platí: $A_n = \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \cos\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx = \frac{2}{l} \int_0^l f(x) \cos\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx$, protože integrovaná funkce je sudá na $(-l, l)$.
2. Provedlo by se zcela analogicky jako v případě 1.

□

Z těchto vět plyne, že pokud máme zadanou funkci pouze na nějakém intervalu $(0, l)$, můžeme ji aproximovat kosinovou respektive sinovou řadou na tomto intervalu, protože ji lze dodefinovat na intervalu $(-l, 0)$ tak, aby byla na $(-l, l)$ sudá, respektive lichá.

3.2. Separace proměnných

Separace proměnných je metoda, při které předpokládáme, že řešení má tvar násobku dvou funkcí, z nichž jedna je závislá pouze na prostorové proměnné a druhá jen na čase. V dalším budeme pro jednoduchost uvažovat pouze jednu prostorovou proměnnou $x \in [0, l]$. Pro přehlednost si dovolíme zjednodušit i značení. Místo $\frac{\partial c}{\partial t}$ budeme psát c_t a namísto $\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$ jednoduše c_{xx} . Naše rovnice spolu s počáteční a Dirichletovou okrajovou podmínkou v tomto značení vypadá takto:

$$\begin{array}{ll}
 (E) & c_t - Dc_{xx} = 0 \quad \forall (t, x) \in (0, \infty) \times \langle 0, l \rangle, D \in \mathbb{R}^+ \\
 (IC) & c(0, x) = f(x) \quad \forall x \in (0, l), \text{ kde } f \in C^1 \text{ je daná funkce} \\
 (BC) & c(t, 0) = c(t, l) = 0 \quad \forall t > 0.
 \end{array} \tag{5}$$

Z původní rovnice, dosazením $c(t, x) = T(t)X(x)$, dostaneme:

$$T'(t)X(x) - DX''(x)T(t) = 0,$$

neboli

$$\frac{T'(t)}{DT(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)}. \quad (6)$$

Protože funkce na levé straně rovnice (6) je závislá pouze na proměnné t a funkce na pravé straně na jiné proměnné x , je zřejmé, že aby rovnost platila pro každou uspořádanou dvojici $(t, x) \in (0, \infty) \times (0, l)$, musí být obě strany rovnice (6) rovny nějaké stejné konstantě. Tuto konstantu označíme $-\lambda$ (znaménko „-“ nehraje nijak důležitou roli, máme jej zde pouze z již brzy viditelných „matematicky estetických“ důvodů). Tímto dostáváme dvě obyčejné diferenciální rovnice:

$$X''(x) + \lambda X(x) = 0 \quad (\text{a}) \quad \text{a} \quad T'(t) + \lambda DT(t) = 0 \quad (\text{b})$$

Nyní se podíváme, jak ovlivňuje konstanta λ řešení těchto rovnic a posléze i řešení našeho problému. Nechť $\lambda < 0$. Pak obecné řešení obyčejné diferenciální rovnice (a) vypadá takto:

$$X(x) = ae^{\sqrt{-\lambda}x} + be^{-\sqrt{-\lambda}x}, \quad \text{kde } a, b \in \mathbb{R}.$$

Z okrajových podmínek dostaneme, že $X(0) = X(l) = 0$, tedy:

$$a + b = 0 \quad \wedge \quad ae^{\sqrt{-\lambda}l} + be^{-\sqrt{-\lambda}l} = 0.$$

Z toho snadno vidíme, že $a = b = 0$, což znamená, že dostáváme řešení, které je identicky rovno nule: $c(t, x) = 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}$, což by znamenalo, že i funkce f by byla identicky rovna nule a nebylo by co řešit.

Nechť $\lambda = 0$, poté se nám rovnice (a) redukuje na rovnici: $X''(x) = 0$, jejímž obecným řešením je evidentně polynom prvního stupně: $X(x) = cx + d$ a z okrajových podmínek dostáváme stejně jako v předchozím, že $c = d = 0$, tedy opět $c(t, x) = 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}$.

Nechť $\lambda > 0$. Pak obecné řešení obyčejné diferenciální rovnice (a) má tvar:

$$X(x) = A \sin(\sqrt{\lambda}x) + B \cos(\sqrt{\lambda}x), \quad \text{kde } A, B \in \mathbb{R}$$

a obecné řešení rovnice (b) vypadá následovně:

$$T(t) = Ce^{-D\lambda t}, \quad \text{kde } C \in \mathbb{R}.$$

Nyní použijeme okrajové podmínky. Víme, že $X(0) = 0 \Rightarrow B = 0$ a také $X(l) = 0$. Celkem proto musí platit, že

$$A \sin(\sqrt{\lambda}l) = 0,$$

z čehož vyplývá, že

$$\sqrt{\lambda}l = n\pi, \quad \text{kde } n \in \mathbb{N}.$$

Takže $\sqrt{\lambda} = \frac{n\pi}{l}$. Bereme pouze kladné násobky π , protože víme, že $\sqrt{\lambda}l > 0$. Tím dostáváme závislost funkcí X a T na indexu n , kterou naznačíme dolním indexem, a obecná řešení jsou tohoto tvaru:

$$X_n(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right)$$

a

$$T_n(x) = C_n e^{\frac{-Dn^2\pi^2 t}{l^2}}.$$

Protože je rovnice difuze lineární, platí princip superpozice, a řešení tedy můžeme hledat ve tvaru řady:

$$c(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) e^{\frac{-Dn^2\pi^2 t}{l^2}}, \quad \text{kde } B_n = A_n C_n.$$

Podívejme se nyní na počáteční podmínku:

$$c(0, x) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) = f(x).$$

Protože je funkce f definovaná na intervalu $(0, l)$, můžeme si představit, že ji dodefinujeme na intervalu $(-l, 0)$ tak, aby byla lichá. Proto ji můžeme rozvinout v sinovu řadu (dle Věty 3.2):

$$f(x) \approx \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2}{l} \int_0^l f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx \right) \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right).$$

Z předchozí podkapitoly a z vlastností funkce f víme, že tato řada bude bodově konvergovat k funkci f , takže můžeme psát počáteční podmínku takto:

$$\sum_{n=1}^{\infty} B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2}{l} \int_0^l f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx \right) \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right),$$

odkud je jasně vidět, že $B_n = \frac{2}{l} \int_0^l f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx$. Dostali jsme tedy analytické řešení rovnice difuze následujícího tvaru:

$$c(t, x) = \frac{2}{l} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) e^{-\frac{Dn^2\pi^2 t}{l^2}} \int_0^l f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx \right). \quad (7)$$

Z tvaru řešení můžeme vidět, jakou roli hraje difusní koeficient: protože se nachází pouze v argumentu funkce $e^{-\frac{Dn^2\pi^2 t}{l^2}}$, je zřejmé, že čím větší bude difusní koeficient, tím rychleji bude tato funkce konvergovat k nule, a protože je funkce sinus omezená, tím rychleji (tzn. v čase t) bude řada konvergovat k funkci identicky nulové.

Uvedme si velmi jednoduchý příklad nalezení řešení rovnice difuze s počátečními a Dirichletovými okrajovými podmínkami.

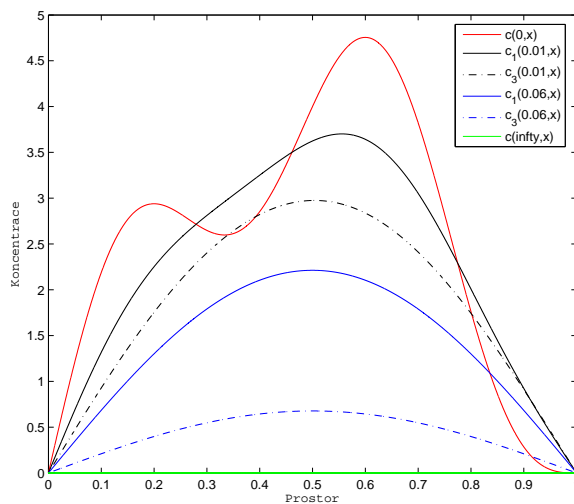
Příklad 3.1. Nechť $D = 1$, $l = 1$ a $f(x) = 4 \sin(\pi x) + \sin(4\pi x)$. Pak funkci f můžeme psát zřejmě takto: $f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin(n\pi x)$, kde $A_1 = 4$, $A_4 = 1$ a $A_n = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N} \setminus \{1, 4\}$. Z toho a s přihlédnutím k tomu, v jakém tvaru hledáme řešení rovnice difuze, plyne:

$$c_1(t, x) = 4 \sin(\pi x) e^{-\pi^2 t} + \sin(4\pi x) e^{-16\pi^2 t}.$$

Kdybychom změnilí hodnotu difusního koeficientu, řešení by vypadalo velmi podobně. Například pro $D=3$ vypadá řešení takto:

$$c_3(t, x) = 4 \sin(\pi x) e^{-3\pi^2 t} + \sin(4\pi x) e^{-48\pi^2 t}.$$

Na následujícím obrázku jsou vykresleny grafy funkce $y = c_1(t, x)$ a $y = c_3(t, x)$ (čárkovaně) pro t pevně zvolená. Dolní indexy řešení c zde značí hodnotu difusního koeficientu. V Matlabu jsem vytvořila také animaci řešení pro $D = 1$, na které je lépe vidět, jak se řešení mění s časem (animace_pr1.m). V tomto případě jsme nemuseli počítat koeficienty A_n pomocí integrálu. Uvedeme tedy také příklad, ve kterém není řešení tak rychle viditelné.



◇

Příklad 3.2. Mějme $f(x) = e^{-x} \sin x$, kde $x \in [0, \pi]$, a řešme stejný problém pro $D = 1$. Tentokrát je třeba spočítat řešení rovnice difuze pomocí vztahu (7). Nejprve užitím vzorce $\sin \alpha \sin \beta = \frac{1}{2} [\cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)]$ a metodou per partes vypočteme integrál

$$\begin{aligned}
 I_n &= \frac{2}{\pi} \int_0^\pi e^{-x} \sin x \sin(nx) dx = \\
 &= \frac{1}{\pi} \left\{ \frac{1 - e^{-\pi} \cos[\pi(1-n)]}{1 + (n-1)^2} - \frac{1 - e^{-\pi} \cos[\pi(n+1)]}{1 + (n+1)^2} \right\}.
 \end{aligned}$$

Pro n sudé je to

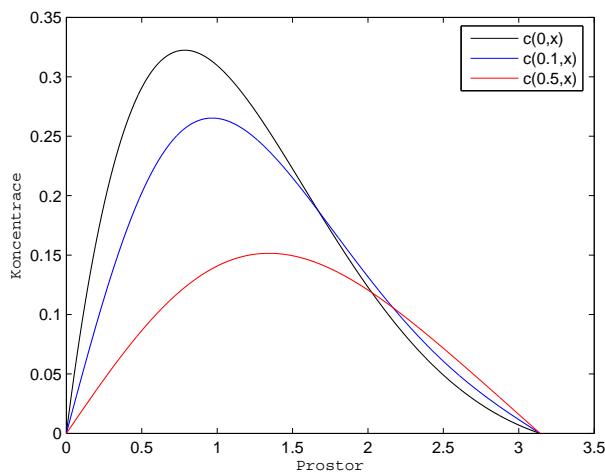
$$I_n = \frac{1}{\pi} (1 + e^{-\pi}) \left[\frac{1}{1 + (n-1)^2} - \frac{1}{1 + (n+1)^2} \right]$$

a pro n liché:

$$I_n = \frac{1}{\pi} (1 - e^{-\pi}) \left[\frac{1}{1 + (n-1)^2} - \frac{1}{1 + (n+1)^2} \right].$$

A řešení

$$c(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} I_n \sin(nx) e^{-n^2 t}.$$



Animace k tomuto příkladu je v souboru animace_pr2.m. V tomto případě bylo potřeba vytvořit cyklus pro součet „nekonečné“ řady. \diamond

V Matlabu jsem vytvořila také soubor, který vykreslí po zadání počátečních podmínek graf řešení rovnice difuze jako funkci x a t , viz. ASol.m.

Nyní se podíváme na Neumannovy okrajové podmínky. Budeme řešit následující systém:

$$\begin{array}{ll}
 (E) & c_t - Dc_{xx} = 0 \quad \forall (t, x) \in (0, \infty) \times \langle 0, l \rangle \\
 (IC) & c(0, x) = f(x) \quad \forall x \in (0, l), \text{ kde } f \in C^1 \text{ je daná funkce} \quad (8) \\
 (BC) & c_x(t, 0) = c_x(t, l) = 0 \quad \forall t > 0.
 \end{array}$$

Postup k nalezení řešení takovéto úlohy je velmi podobný jako pro nalezení řešení při Dirichletových okrajových podmínkách, proto jej uvedeme stručněji. Opět separací proměnných $c(t, x) = T(t)X(x)$ dostaneme dvě obyčejné diferenciální rovnice:

$$X''(x) + \lambda X(x) = 0 \quad (a) \quad \text{a} \quad T'(t) + \lambda DT(t) = 0 \quad (b).$$

Pro $\lambda \leq 0$ bychom dostali řešení identicky rovné nule, takže budeme uvažovat $\lambda > 0$. Z obyčejné diferenciální rovnice (a) pro $X(x)$ dostaneme řešení:

$$X(x) = A \cos(\sqrt{\lambda}x) + B \sin(\sqrt{\lambda}x), \quad \text{kde } A, B \in \mathbb{R}.$$

Podívejme se nyní na okrajovou podmínku: $X'(0) = X'(l) = 0$. Zderivujeme funkci $X(x)$:

$$X'(x) = -A\sqrt{\lambda} \sin(\sqrt{\lambda}x) + B\sqrt{\lambda} \cos(\sqrt{\lambda}x).$$

Dosazením $x = 0$ dostaneme: $B\sqrt{\lambda} = 0$, což vzhledem ke kladnosti λ implikuje $B = 0$, tedy $X(x) = A \cos(\sqrt{\lambda}x)$. A dosazením za $x = l$ zjistíme jak vypadá λ : Podmínka $X'(l) = -A\sqrt{\lambda} \sin(\sqrt{\lambda}l) = 0$, kde $A \neq 0$ a $\sqrt{\lambda} > 0$, je ekvivalentní s podmínkou: $\sqrt{\lambda} = \frac{n\pi}{l}$, kde $n \in \mathbb{N}$. Z obyčejné diferenciální rovnice (b) pro $T(t)$ dostaneme: $T(t) = Ce^{-D\lambda t}$. Řešení tedy budeme nyní hledat ve tvaru:

$$c(t, x) = \frac{A_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{-\frac{Dn^2\pi^2 t}{l^2}} \cos\left(\frac{n\pi x}{l}\right).$$

Tento tvar vychází z toho, jak vypadají koeficienty kosinové řady funkce f . Protože je tato funkce definovaná pouze na intervalu $(0, l)$, můžeme ji dodefinovat na $(-l, 0)$ tak, aby byla sudá. Pak podle předchozí kapitoly bude:

$$A_n = \frac{2}{l} \int_0^l f(t) \cos\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx \quad \forall n \in \mathbb{N}_0$$

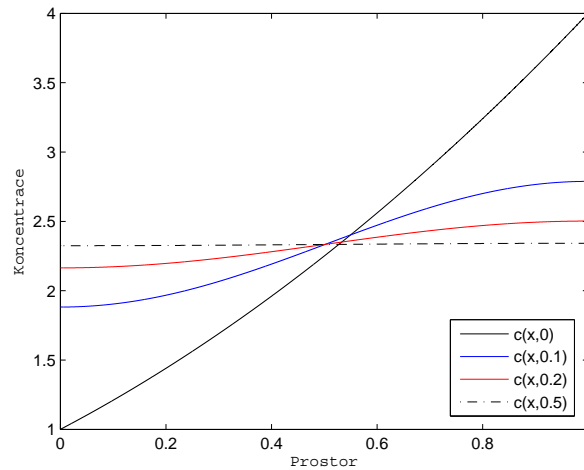
a řešení systému (8) je tedy tvaru:

$$c(t, x) = \frac{1}{l} \int_0^l f(x) dx + \frac{2}{l} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\cos\left(\frac{n\pi x}{l}\right) e^{-\frac{Dn^2\pi^2 t}{l^2}} \int_0^l f(x) \cos\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx \right).$$

Příklad 3.3. Řešme systém (8) pro $D = 1$, $l = 1$ a $f(x) = x^2 + 2x + 1$. Nejprve je třeba spočítat $\int_0^1 f(x) dx = \frac{7}{3}$ a $\int_0^1 f(x) \cos(n\pi x) dx = \frac{2}{n^2\pi^2} (2 \cos(n\pi) - 1)$ (metodou per partes). Řešení je tvaru:

$$c(t, x) = \frac{7}{3} + 4 \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2 \cos(n\pi) - 1}{n^2\pi^2} \cos(n\pi x) e^{-n^2\pi^2 t} \right).$$

V Matlabu opět vykreslíme řešení pro některá pevná t , abychom měli představu, jak se řešení chová.



Také je k dispozici animace jako v předchozích příkladech, viz. animace_pr3.m. \diamond

4. Numerické řešení rovnice difuze – metoda sítí

Metoda sítí patří k oblíbeným metodám pro řešení diferenciálních rovnic (jak obyčejných, tak parciálních). Její princip je velmi jednoduchý a dá se ukázat, že má poměrně dobré vlastnosti, co se týká konvergence i stability. Při její konstrukci se diskretizuje prostorová proměnná i čas (nahrazením parciálních derivací za diferenční podíly) a řešení se vypočítá ze soustavy lineárních algebraických rovnic. Existují i tzv. semidiskrétní metody, které vedou na soustavy obyčejných diferenciálních rovnic tak, že se diskretizuje buď pouze prostorová proměnná a čas se ponechá spojitý (například Rotheho metoda), nebo se naopak diskretizuje pouze čas a prostorová proměnná zůstane spojitá. Semidiskrétními metodami se však nebudeme v této práci zabývat. Cílem nebude projít veškeré metody, ale ukázat si vhodný nástroj pro nalezení numerického řešení rovnice difuze (i ve vícedimenzionálním prostoru) a naprogramovat ho v Matlabu.

Metoda sítí má mnoho verzí, které se liší tím, jakým způsobem aproximujeme derivace, a podle toho i konvergencí a stabilitou. Nejprve si uvedeme tzv. explicitní metodu.

4.1. Explicitní metoda

4.1.1. Explicitní metoda pro jednu prostorovou proměnnou

Řešme rovnici ve tvaru:

$$\begin{aligned} (E) \quad & c_t(t, x) - c_{xx}(t, x) = 0 \quad \forall (t, x) \in (0, T) \times (0, l) \\ (IC) \quad & c(t, 0) = c(t, l) = 0 \quad \forall t \in [0, T] \\ (BC) \quad & c(0, x) = f(x) \quad \forall x \in (0, l) \end{aligned} \quad (9)$$

Z (IC) a (BC) plyne, že funkce f splňuje tzv. podmínky souhlasu: $f(0) = f(l) = 0$, které potřebujeme k tomu, abychom dostali spojitě řešení. Zavedme obdélníkovou síť uzlů na množině $(0, l) \times (0, T)$ tím způsobem, že interval $(0, l)$ rozdělíme na n podintervalů stejné délky $h = \frac{l}{n}$ a interval $(0, T)$ na p podintervalů stejné délky $\tau = \frac{T}{p}$. Tím získáme množinu $(n-1)(p-1)$ bodů:

$$\{(x_i, t_j) \in (0, l) \times (0, T), i = 1, \dots, n-1, j = 1, \dots, p-1\}$$

a označme $x_0 = t_0 = 0$, $x_n = l$ a $t_p = T$. A v těchto bodech nahradíme derivace jejími aproximacemi - diferenčními podíly. Pro derivaci podle prostorové proměnné se užijí centrální diference a pro derivaci podle časové proměnné diference vpřed. Dostaneme systém $p(n-1)$ rovnic o $(p+1)(n+1)$ neznámých a označme $c_i^j = c(t_j, x_i)$ a $f_i = f(x_i)$:

$$\frac{1}{\tau}(c_i^j - c_i^{j-1}) - \frac{1}{h^2}(c_{i-1}^{j-1} - 2c_i^{j-1} + c_{i+1}^{j-1}) = 0 \quad \text{kde } i = 1, \dots, n-1 \quad \text{a } j = 1, \dots, p$$

Tuto rovnici vynásobíme τ , položíme $\beta = \frac{\tau}{h^2}$:

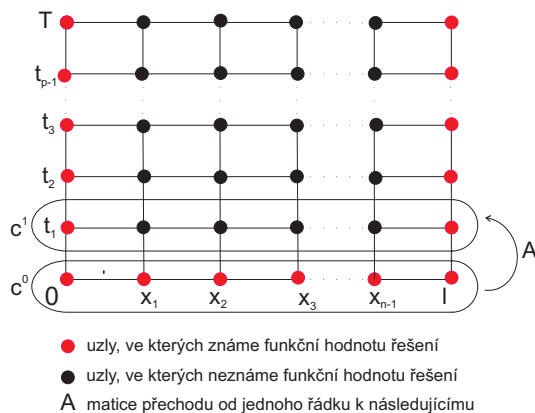
$$c_i^j - c_i^{j-1} - \beta(c_{i-1}^{j-1} - 2c_i^{j-1} + c_{i+1}^{j-1}) = 0$$

a snadnou úpravou dostáváme:

$$c_i^j = \beta c_{i-1}^{j-1} + (1 - 2\beta)c_i^{j-1} + \beta c_{i+1}^{j-1}.$$

A když přidáme okrajové a počáteční podmínky:

$$c_0^j = c_n^j = 0 \quad \forall j$$



Obrázek 3: Obdélníková síť

$$c_i^0 = f_i \quad \forall i$$

dostáváme systém $(p+1)(n+1)$ rovnic o $(p+1)(n+1)$ neznámých. Tato soustava se v algoritmu bude řešit rekurentně vzhledem k času t (začneme počátečními podmínkami), viz. schéma na obrázku 3. Když označíme $\mathbf{c}^j = (c_1^j, c_2^j, \dots, c_{n-1}^j)^T$, můžeme naši soustavu rovnic psát maticově takto: $\mathbf{c}^j = \mathbf{A}\mathbf{c}^{j-1}$, $j = 1, \dots, p$ a \mathbf{A} je zřejmě symetrická třídiagonální matice typu $(n-1) \times (n-1)$ a tvaru:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1-2\beta & \beta & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \beta & 1-2\beta & \beta & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \beta & 1-2\beta & \beta & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \beta & 1-2\beta & \beta & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \beta \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \beta & 1-2\beta \end{pmatrix}.$$

Tato matice je nazývána maticí přechodu. Z tvarů vlastních čísel matice \mathbf{A} se dá odvodit, jak musí vypadat číslo β , aby metoda konvergovala. Bylo dokázáno, že podmínka $\beta \leq \frac{1}{2}$ je nutná a postačující k tomu, aby byla metoda konvergentní a stabilní (viz. [6], str. 336). K tomu budeme samozřejmě přihlížet při konstrukci sítě v Matlabu. Zvolíme například $\beta = \frac{1}{4}$, tj. $\tau = 10^{-4}$ a $h = 2 \cdot 10^{-2}$. Soubor esit1.m vykreslí po zadání počátečních podmínek a několika hodnot (l, T, D, f) graf řešení. Jedná se o velmi jednoduchý kód, který numericky řeší problém zadaný na začátku této kapitoly. Pro naprogramování explicitní verze metody sítí

pro jednu prostorovou proměnnou v Matlabu stačí skoro tak málo řádků kódu jako pro vykreslení výsledku. Nebylo třeba řešit ani soustavu lineárních rovnic v právním slova smyslu, jedná se o prostou rekurenci³ (proto název Explicitní metoda).

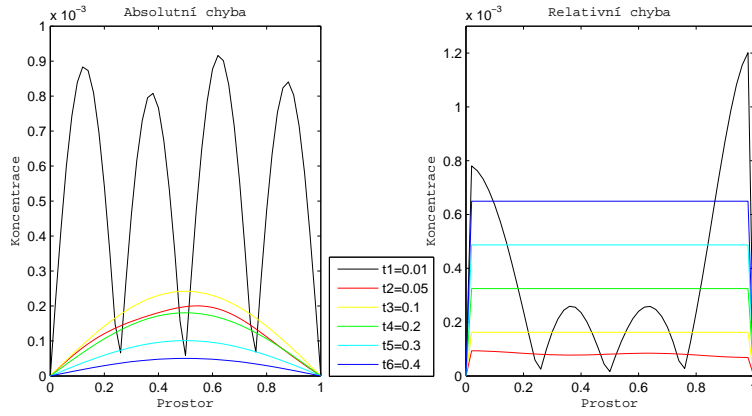
4.1.2. Analytické řešení versus Explicitní metoda v jedné dimenzi

Nyní si ukážeme, jak se osvědčí Explicitní metoda tím, že výsledky srovnáme s analytickými výsledky z první kapitoly (*Příklad 3.1* a *Příklad 3.2*). Pomocí Matlabu jsem nejprve vykreslila grafy absolutních hodnot rozdílů numerického a analytického řešení pro různé časy t (tak, aby byla vidět tendence chování tzv. absolutní chyby) a také grafy tzv. relativních chyb. Z absolutních chyb vidíme, jak je odchylka hodnot numerického řešení od analytického řešení velká – velikost chyby odpovídá jejímu řádu dle teorie $O(\tau + h^2)$ – viz. [6], str.336, v našem případě asi 10^{-4} . Měli bychom také zvážit, jaké jsou velikosti podílů absolutních chyb a hodnot analytického řešení. K tomu poslouží grafy relativních chyb. Na nich je hezky vidět, že s rostoucím časem se chyba zvětšuje, což nejspíš plyne z toho, že se numerické řešení počítá rekurentně vzhledem k času, tedy chyba postupně narůstá, viz. Obrázek 4 a Obrázek 5 na následující straně. V Příkladě 3.2 je chyba větší pro $x \rightarrow \pi$, ale stále je zachován řád chyby. Stejně je tomu u srovnání implicitní metody, tak by se dalo soudit, že příčinou je počáteční podmínka.

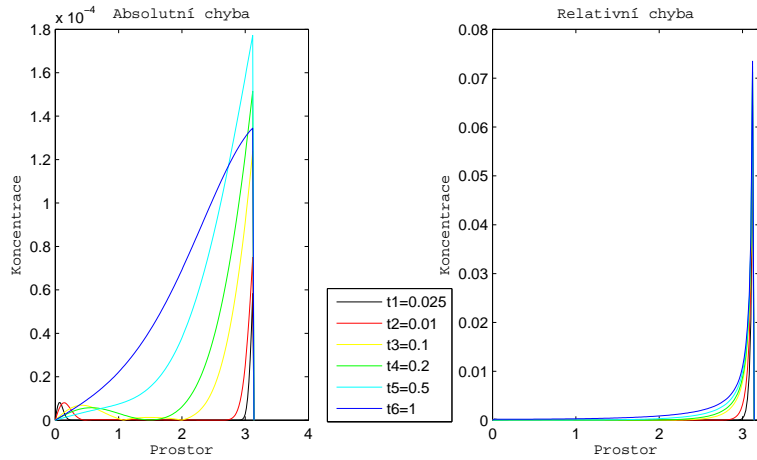
4.1.3. Explicitní metoda pro více prostorových proměnných

Nyní se podíváme na podobnou situaci jako v předchozím, jen s tím rozdílem, že se přesuneme do dvoudimenzionálního prostoru (pro tři prostorové proměnné by se postupovalo analogicky). Nechť $\Omega = \{(x, y) : x \in [0, l], y \in [0, s]\}$ a

³Jinak tomu bude u implicitní verze. Nebude to složitější kód, ale v každém kroku budeme muset řešit soustavu $n - 1$ rovnic o $n - 1$ neznámých.



Obrázek 4: Příklad 3.1



Obrázek 5: Příklad 3.2

$f : \Omega \mapsto \mathbb{R}$ je funkce třídy C^1 . Budeme řešit úlohu následujícího tvaru:

$$\begin{aligned}
 (E) \quad & c_t(t, x, y) - c_{xx}(t, x, y) - c_{yy}(t, x, y) = 0 & \forall (t, x, y) \in \langle 0, T \rangle \times \Omega \\
 (BC) \quad & c(t, x, y) = f(x, y) & \forall t \in (0, T), \forall (x, y) \in \partial\Omega \\
 (IC) \quad & c(0, x, y) = f(x, y) & \forall (x, y) \in \Omega
 \end{aligned} \tag{10}$$

Počáteční a okrajové podmínky jsou napsány tak, aby bylo řešení spojité. Opět sestrojíme pravidelnou síť a to tak, že intervaly na ose x i y rozdělíme ekvidistantně na dílky délky h (počet dílků v intervalu $\langle 0, l \rangle$ označíme n a počet dílků v intervalu $\langle 0, s \rangle$ označíme q) a interval $\langle 0, T \rangle$ na p dílků délky τ , zavedeme

podobně jako v předchozím: $x_0 = y_0 = t_0 = 0$, $x_n = l$, $y_q = s$ a $t_p = T$ a označíme:

$$c_{ik}^j = c(t_j, x_i, y_k), \quad \text{kde } t_j = t_0 + j\tau, \quad x_i = x_0 + ih, \quad y_k = y_0 + kh.$$

Aproximace parciálních derivací se provede zcela analogicky jako pro jednu prostorovou proměnnou:

$$c_t(t_{j-1}, x_i, y_k) \approx \frac{c_{ik}^j - c_{ik}^{j-1}}{\tau},$$

$$c_{xx}(t_{j-1}, x_i, y_k) \approx \frac{c_{i-1k}^{j-1} - 2c_{ik}^{j-1} + c_{i+1k}^{j-1}}{h^2} \quad \text{a} \quad c_{yy}(t_{j-1}, x_i, y_k) \approx \frac{c_{ik-1}^{j-1} - 2c_{ik}^{j-1} + c_{ik+1}^{j-1}}{h^2}.$$

Dosazením těchto aproximací do původních rovnic a drobnou úpravou dostaneme tyto vztahy:

$$\begin{aligned} (E') \quad & c_{ik}^j = c_{ik}^{j-1} + \beta (c_{i-1k}^{j-1} + c_{i+1k}^{j-1} - 4c_{ik}^{j-1} + c_{i+1k}^{j-1} + c_{i-1k}^{j-1}) \quad \forall i, j, k \\ (IC') \quad & c_{ik}^0 = f(x_i, y_k) \quad \forall i, k \\ (BC') \quad & c_{0k}^j = f(x_0, y_k), \quad c_{nk}^j = f(x_n, y_k) \quad \forall k, j, \\ & c_{i0}^j = f(x_i, y_0), \quad c_{iq}^j = f(x_i, y_q) \quad \forall i, j. \end{aligned}$$

V Matlabu se vše provede velmi podobně jako pro jednu prostorovou proměnnou, viz esit2.m. Pomocí tohoto m-filu vytvoříme animaci (graf řešení nebudeme zobrazovat, protože se jedná o funkci tří proměnných).

Nevýhodou explicitní verze metody sítí je, že aby byla metoda stabilní, musíme při volbě τ a h respektovat podmínku $\beta \leq \frac{1}{2}$. To znamená, že pokud chceme například rozpúlit iterační krok na prostorové ose, musíme rozčtvrtit iterační krok na časové ose, což může být nepříjemné. Proto se podíváme i na implicitní metodu, která je tak zvaně absolutně stabilní – neklademe žádnou podmínku na β . Hodnota β není směrodatná ani pro konvergenci metody (viz. [6], str. 340), avšak při neopatrné volbě β mohou vznikat větší chyby. Je vhodné, aby byl iterační krok na časové ose řádově stejně velký jako druhá mocnina iteračního kroku na prostorové ose.

4.2. Implicitní metoda

4.2.1. Implicitní metoda pro jednu prostorovou proměnnou

V tomto odstavci budeme numericky řešit stejnou úlohu (9) jako u explicitní metody a zachováme značení. Postup odvození je stejný, jen s tím rozdílem, že

místo diferencí vpřed pro aproximaci parciální derivace podle času použijeme zpětné diference. Tedy podíl $\frac{1}{\tau}(c_i^j - c_i^{j-1})$ zde bude aproximovat derivaci v uzlu (x_i, t_j) . Tím dostaneme:

$$\frac{1}{\tau}(c_i^j - c_i^{j-1}) - \frac{1}{h^2}(c_{i-1}^j - 2c_i^j + c_{i+1}^j) = 0$$

a z toho:

$$c_i^{j-1} = (1 + 2\beta)c_i^j - \beta(c_{i-1}^j + c_{i+1}^j).$$

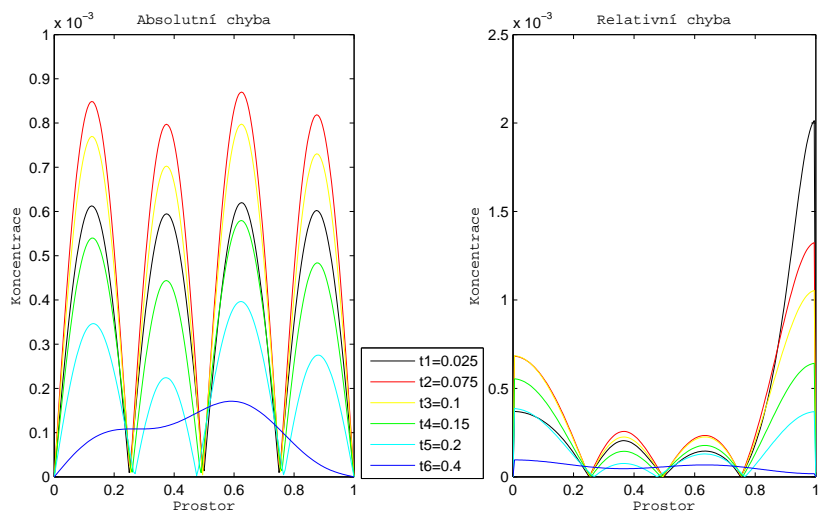
Přepis počáteční a okrajové podmínky zůstává stejný jako u explicitní metody, ale maticově se daná úloha zapíše takto: $\mathbf{B}\mathbf{c}^j = \mathbf{c}^{j-1}$, kde matice \mathbf{B} je opět symetrická, třídiagonální, řádu $(n - 1) \times (n - 1)$ a následujícího tvaru:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 + 2\beta & -\beta & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\beta & 1 + 2\beta & -\beta & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\beta & 1 + 2\beta & -\beta & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & -\beta & 1 + 2\beta & -\beta & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & -\beta \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -\beta & 1 + 2\beta \end{pmatrix}.$$

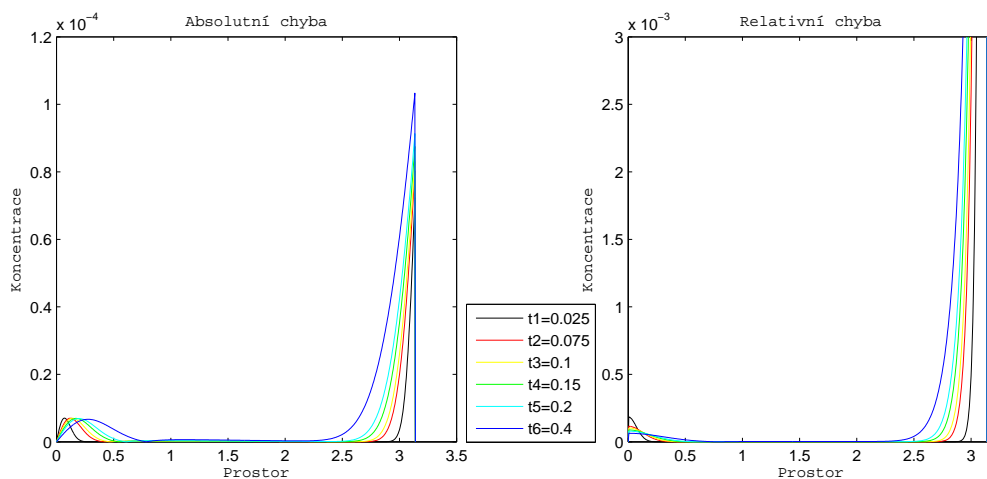
Jak již bylo předesláno a jak je vidět z maticového zápisu výše, při výpočtech budeme řešit soustavy $(n - 1)$ rovnic o $(n - 1)$ neznámých, viz. isit1.m (tento m-file vykreslí graf řešení jako funkci dvou proměnných).

4.2.2. Analytické řešení versus Implicitní metoda v jedné dimenzi

Implicitní metoda se na první pohled neliší od explicitní metody řádem chyby ($O(\tau + h^2)$)(viz. [6], str. 333, 336). Můžeme však dojít k dobrým výsledkům díky větším možnostem volby sítě (tedy volby τ a h). Je doporučováno, aby byl iterační krok na prostorové ose přibližně roven odmocnině kroku na časové ose, proto jsem provedla vykreslení chyb pro $\tau = \frac{1}{4}10^{-4}$ a $h = \frac{1}{2}10^{-2}$ v obou příkladech. Řád chyby odpovídá, viz. Obrázek 6 a 7.



Obrázek 6: Příklad 3.1



Obrázek 7: Příklad 3.2

4.2.3. Implicitní metoda pro více prostorových proměnných

Uvažujme systém (10) jako v podkapitole 4.1.3. Postup odvození numerického řešení bude shodný, proto jej provedeme stručněji. Značení samozřejmě zachováme. Aproximací parciálních derivací dostaneme tuto rovnici:

$$\frac{1}{\tau}(c_{ik}^j - c_{ik}^{j-1}) - \frac{1}{h^2}(c_{i-1k}^j - 2c_{ik}^j + c_{i+1k}^j) - \frac{1}{h^2}(c_{ik-1}^j - 2c_{ik}^j + c_{ik+1}^j) = 0,$$

respektive

$$c_{ik}^{j-1} = c_{ik}^j - \beta (c_{i-1k}^j + c_{ik-1}^j - 4c_{ik}^j + c_{i+1k}^j + c_{ik+1}^j).$$

Tedy spolu s počátečními a okrajovými podmínkami, které jsou shodné s přepisem počátečních a okrajových podmínek z podkapitoly o explicitní metodě ve 2D, vypadá výsledná soustava takto:

$$\begin{aligned} (E') \quad & c_{ik}^{j-1} = c_{ik}^j - \beta (c_{i-1k}^j + c_{ik-1}^j - 4c_{ik}^j + c_{i+1k}^j + c_{ik+1}^j) \quad \forall i, j, k \\ (IC') \quad & c_{ik}^0 = f(x_i, y_k) \quad \forall i, k \\ (BC') \quad & c_{0k}^j = f(x_0, y_k), \quad c_{nk}^j = f(x_n, y_k) \quad \forall k, j, \\ & c_{i0}^j = f(x_i, y_0), \quad c_{iq}^j = f(x_i, y_q) \quad \forall i, j. \end{aligned}$$

Kód v Matlabu je k nahlédnutí a k vyzkoušení v m-filu isit2.m, jehož výsledkem je animace.

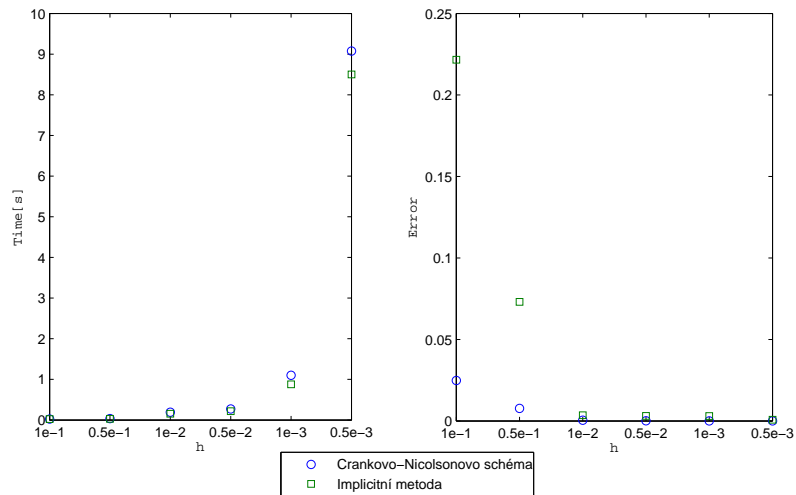
4.3. Crankovo - Nicolsonovo schéma

Další verzí metody sítí je tzv. Crankovo - Nicolsonovo schéma, které je často používáné v praxi. Je absolutně stabilní, konvergentí a na hodnotu β nejsou kladeny žádné požadavky. Pro jednu prostorovou proměnnou může být například takového tvaru:

$$\frac{1}{\tau} (c_i^j - c_i^{j-1}) - \frac{1}{2h^2} (c_{i-1}^j - 2c_i^j + c_{i+1}^j + c_{i-1}^{j-1} - 2c_i^{j-1} + c_{i+1}^{j-1}) = 0,$$

kdy parciální derivaci podle prostorové proměnné aproximujeme aritmetickým průměrem centrálních diferencí v uzlech (x_i, t_j) a (x_i, t_{j-1}) . Maticově se daná úloha zapíše takto: $\mathbf{B}\mathbf{c}^j = \mathbf{A}\mathbf{c}^{j-1}$, kde \mathbf{A} , respektive \mathbf{B} , je opět třídiagonální symetrická matice typu $(n-1) \times (n-1)$, hlavní diagonála je tvořena čísli $1 - \beta$, respektive $1 + \beta$, a vedlejší diagonály čísla $\frac{1}{2}\beta$, respektive $-\frac{1}{2}\beta$. Opět se budou v každém kroku algoritmu jakou u implicitní metody řešit soustavy rovnic, viz. CNsit.m. Hlavní výhodou Crankova - Nicolsonova schématu je, že s klesajícím krokem h klesá velmi rychle chyba a nemusíme zmenšovat krok na časové ose. Tato metoda je přesnější než implicitní. V Matlabu jsem provedla srovnání časů výpočtů a absolutních chyb u těchto dvou metod dle volby iteračního kroku h a výsledky vypsala a vykreslila pro Příklad 3.1. Ukázalo se, že Crankovo - Nicolsonovo

schéma je v mém podání pomalejší než implicitní metoda (myslím si však, že ne příliš významně), ale chyba je výrazně menší, viz. Obrázek 8 a Tabulka 1. Bylo možno provést nějaké srovnání také s explicitní metodou, ale při zjemňování sítě, například pro $h = 10^{-3}$, by bylo potřeba $\tau = \frac{1}{2}10^{-9}$, aby metoda konvergovala, což už je samozřejmě problém pro operační paměť, když pomíneme, že doba výpočtu by byla neúnosná. I když se počítá s řídkými maticemi, jedná se o velmi mnoho prvků. V tomto případě by byla matice přechodu řádu $10^3 \times 8 \cdot 10^8$. Zjistila jsem, že i u dvou zbývajících metod je vhodné, aby byl iterační krok na časové ose alespoň o něco menší než na prostorové, ale u Crankova - Nicolsonova schématu se vždy dojde k přijatelným výsledkům.



Obrázek 8: Srovnání Crankova-Nicolsonova schématu s implicitní metodou

h	τ	Čas (s)		Maximální chyba	
		CN-schéma	Implicitní m.	CN-schéma	Implicitní m.
10^{-1}	10^{-2}	0.025536	0.025520	0.0248	0.2216
$\frac{1}{2}10^{-1}$	$\frac{1}{4}10^{-2}$	0.034415	0.029978	0.0077	0.0731
10^{-2}	10^{-4}	0.192349	0.154007	$4.9386e-4$	0.0035
$\frac{1}{2}10^{-2}$	10^{-4}	0.271983	0.216484	$1.1791e-4$	0.0031
10^{-3}	10^{-4}	1.101920	0.879588	$2.9687e-6$	0.0030
$\frac{1}{2}10^{-3}$	$\frac{1}{4}10^{-4}$	9.076236	8.500549	$7.7718e-7$	$7.5346e-4$

Tabulka 1: Srovnání Crankova-Nicolsonova schématu s implicitní metodou

Závěr

Cílem práce bylo pochopit odvození rovnice difuze, nastudovat metodu separací proměnných v jedné dimenzi a metodu sítí pro jednu i více prostorových proměnných, vše s vlastními příklady a m-soubory v Matlabu, a také srovnat analytické výsledky s numerickými. Dle mého názoru se cíle podařilo splnit.

Při odvození rovnice difuze jsem se musela seznámit s některými fyzikálními pojmy, což pro mě byla od střední školy více méně první zkušenost a proto pro mě bylo zpočátku docela těžké se zorientovat. Také jsem si vyzkoušela, k čemu mohou sloužit v praxi některá důležitá tvrzení z matematické analýzy, jako Gaussova věta nebo Lebesgueova věta, a díky tomu jsem získala určitý nadhled.

Nejjednodušší částí pro mě bylo nastudování Fourierovy metody, během kterého jsem si vyzkoušela jedno z možných využití Fourierových řad. Lépe jsem se také seznámila s prací s grafikou v Matlabu a naučila jsem se vytvářet animace, což byla zajímavá zkušenost.

Studium metody sítí bylo poměrně příjemné, protože se jedná o jednoduchou metodu a navíc byla k dispozici přehledná literatura. O něco těžší – ale o to zajímavější – bylo vytvoření m-souborů v Matlabu. Při testování metody sítí na různých příkladech jsem zjistila, že Explicitní metoda není nejvhodnější, protože si nemůžeme dovolit libovolně zjemňovat síť. Implicitní verze byla o něco tolerantnější k volbě iteračních kroků, ale s nejlepšími výsledky jsem se setkala u Crankova - Nicolsonova schématu. Bylo dosaženo největší přesnosti. Myslím, že při ohledu na jeduhost metody můžeme říci, že přináší velmi dobré výsledky. Avšak určitě bude vhodné seznámit se i se semidiskrétními metodami.

Během studia tohoto tématu jsem si prohloubila některé znalosti a dovednosti získané během bakalářského studia a získala více zkušeností s matematickým softwarem Matlab a typografickým systémem \TeX . Téma difuze pro mě bylo velmi zajímavé a chtěla bych pokračovat v jeho studiu například řešením rovnice difuze pomocí distribucí a Fourierových transformací.

Literatura

- [1] R.P. Feynman, R.B. Leighton, M. Sands: Feynmanovy přednášky z fyziky s řešenými příklady II. Fragment 2001.
- [2] J. Kopáček: Matematická analýza pro fyziky III, MATFYZPRESS, vydavatelství Matematicko-fyzikální fakulty Univerzity Karlovy v Praze, 2002.
- [3] Z. Pachová, T. Frey: Vektorová a tenzorová analýza, Státní nakladatelství technické literatury ve společném vydání se Slovenským vydavatelstvom technickej literatúry, Praha, 1964.
- [4] J. Škrášek, Z. Tichý: Základy aplikované matematiky II, SNTL - nakladatelství technické literatury, Praha 1986.
- [5] http://en.wikipedia.org/wiki/Heat_equation [online 20. 2. 2011]
- [6] E. Vitásek: Základy teorie numerických metod pro řešení diferenciálních rovnic, Academia Praha 1994.
- [7] http://en.wikipedia.org/wiki/Brownian_motion#History [online 7.4.2011]
- [8] http://en.wikipedia.org/wiki/Fick's_laws_of_diffusion [online 7.4.2011]
- [9] R.L. Wheeden, A. Zygmund: Measure and Integral, An Introduction to Real Analysis, Marcel Dekker, INC., 1977.
- [10] http://www.olemiss.edu/sciencenet/saltnet/fick_insights_EOS.pdf [online 10.4.2011]