FAKULTA APLIKOVANÝCH VĚD ZÁPADOČESKÉ UNIVERZITY V PLZNI

STUDENTSKÁ VĚDECKÁ KONFERENCE 2017

# WPE algoritmus aplikovaný na rovnici difuze

Milada Krejčová[1]

## 1 Úvod

Parciální diferenciální rovnice není téměř vždy možné řešit analytickými metodami. Alternativou jsou numerické metody, které však do řešení vnášejí nepřesnosti. Proto je vždy nutné zvolit takovou metodu, která pro daný typ úlohy vnáší nejmenší chybovost. Pro úlohy, kde je zapotřebí dosažení alespoň lokální termodynamické rovnováhy je vhodný např. WPE algoritmus představený v článku Wang et al. (2003) pro Focker-Planckovu rovnici. Tento algoritmus zde bude aplikován na difúzní rovnici a porovnán s analytickým řešením.

Základem této metody je prostorová diskretizace spojité veličiny (Markovského procesu) pomocí skokových procesů definovaných lokálním řešením spojité rovnice. Hlavním předpokladem je malá změna hledané veličiny mezi časovými kroky.

## 2 Aplikace algoritmu na difuzní rovnici

Uvažujme difuzní rovnici ve tvaru

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \tag{1}$$

ke $t$ je časová proměnná, $x$ prostorová a hledaná neznámá veličina je označena $u$. Využijeme předpokladu a hledáme řešení stacionární rovnice, tj. $0 = \mathrm{d}^2u(x)/\mathrm{d}x^2$. Vyřešením obdržíme

$$u(x) = c_1 x + c_2. \tag{2}$$

Integrační konstanty určíme z pravděpodobností přeskoku mezi prostorovými uzly $n$ a $n+1$ vzdálenými o $\Delta x$ daných vztahy

$$p_n = \int_{-\Delta x}^{0} u(x)\mathrm{d}x, \qquad p_{n+1} = \int_{0}^{\Delta x} u(x)\mathrm{d}x. \tag{3}$$

Po úpravě obdržíme integrační konstanty

$$c_1 = (p_{n+1} - p_n)/(\Delta x)^2, \qquad c_2 = (p_n + p_{n+1})/(2\Delta x), \tag{4}$$

které dosadíme do řešení a obdržíme

$$u(x_n) = \frac{p_{n+1} - p_n}{(\Delta x)^2}x + \frac{p_n + p_{n+1}}{2\Delta x}. \tag{5}$$

Dalším krokem algoritmu je výpočet pravděpodobnostního toku

$$J_{n+1/2} = -D\frac{\partial u}{\partial x} = -D\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{p_{n+1} - p_n}{(\Delta x)^2}x + \frac{p_n + p_{n+1}}{2\Delta x}\right) = -D\frac{p_{n+1} - p_n}{(\Delta x)^2}. \tag{6}$$

[1] studentka doktorského studijního programu Aplikované vědy a informatika, obor Aplikovaná Mechanika, e-mail: mkrejcov@ntis.zcu.cz

Pravděpodobnostní tok však předpokládáme ve tvaru $J_{n+1/2} = F_{n+1/2}p_n - B_{n+1/2}p_{n+1}$, označíme $F_{n+1/2} = D/(\Delta x)^2$ a $B_{n+1/2} = D/(\Delta x)^2$. Protože $F$ a $B$ označují tok po ose $x$ v kladném, respektive v záporném směru, musí být z fyzikálního hlediska stejně velké. Jak je vidět z uvedených rovnic, toto tvrzení je platné i pro tento algoritmus.

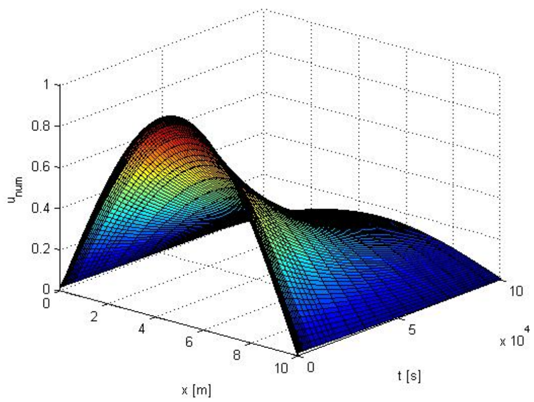
Časová změna veličiny $p$ je pak dána dána rozdílem pravděpodobnostních toků, tj.

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} = J_{n-1/2} - J_{n+1/2} = F_{n-1/2}p_{n-1} - B_{n-1/2}p_n - F_{n+1/2}p_n + B_{n+1/2}p_{n+1}. \tag{7}$$

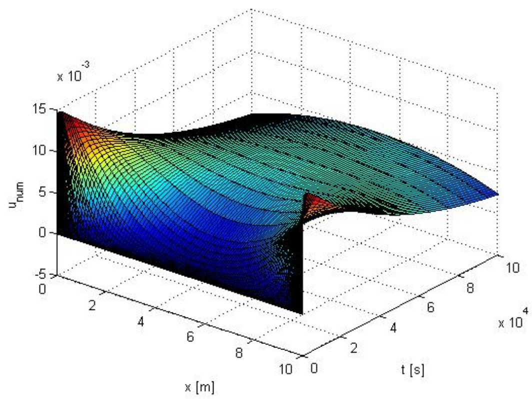
Pro přechod k původní proměnné $u(x,t)$ využijeme aproximujícího vztahu pro $p$

$$p_n(t) \approx \int_{x_n-\Delta x/2}^{x_n+\Delta x/2} u(x,t)\mathrm{d}x \approx u(x_n,t)\Delta x \Rightarrow u(x_n,t) \approx p_n(t)/\Delta x. \tag{8}$$

## 3 Porovnání numerického řešení WPE algoritmu s analytickým řešením difuzní rovnice




**Obrázek 1:** Vypočtené rozložení hledané veličiny WPE algoritmem




**Obrázek 2:** Rozdíl mezi vypočteným rozložením WPE algoritmem a analytickým řešením

Na obr. 1 je vykresleno numerické řešení získané WPE algoritmem za časové integrace v matlabu příkazem ode15s. Od tohoto výsledku je odečteno analytické řešení difuzní rovnice a jejich rozdíl je zobrazen na obr. 2. Maximální rozdíl obou řešení je $1,5 \cdot 10^{-2}$, což je považováno za velmi dobrou shodu.

## 4 Závěr

V této práci byl aplikován WPE algoritmus na difuzní rovnici a porovnán s analytickým řešením pro stejné počáteční podmínky i okrajové podmínky.


### Poděkování

Příspěvek byl podpořen grantovými projekty SGS-2016-038 a SGS-2016-059.


## Literatura


Wang, H., Peskin, C. S., Elston, T. C. (2003) A Robust Numerical Algorithm for Studying Biomolecular Transport Processes, *Journal of Theoretical Biology*, Volume 221, pp. 491–511.