

Metoda explicit (jawny), a implicit (niejawny)

Do rozwiązania problemów związanych z symulacjami CFD wykorzystuje się różne narzędzia. Sposób, w jaki narzędzia te są łączone i wykorzystywane do danego rozwiązania można nazwać technikami CFD. Niezależnie od tego, które konkretnie techniki się wybierze do rozwiązania danego problemu okaże się, że dana technika należy do jednego lub drugiego z dwóch różnych ogólnych podejść, podejścia jawnego lub podejścia niejawnego.

Aby zrozumieć różnice pomiędzy tymi dwoma podejściami, najlepiej jest wykonać to na przykładzie. Dla uproszczenia, będzie to przedstawione na jednowymiarowym równaniu przewodzenia ciepła określonego równaniem (1):

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (1)$$

Będę traktować równanie (1) jako „równanie modelowe”. Wszystkie niezbędne punkty dotyczące podejść jawnych i niejawnych można wykonać przy użyciu tego równania modelowego bez przechodzenia do dodatkowej złożoności rządzących równań przepływu. Równanie różniczkowe $\partial T / \partial t$ można przedstawić za pomocą różnicy w przód (forward difference) oraz $\partial^2 T / \partial x^2$ za pomocą centralnej różnicy drugiego rzędu (central second difference), co prowadzi do szczególnej postaci równania różniczkowego przedstawionego poniżej jako równanie (2):

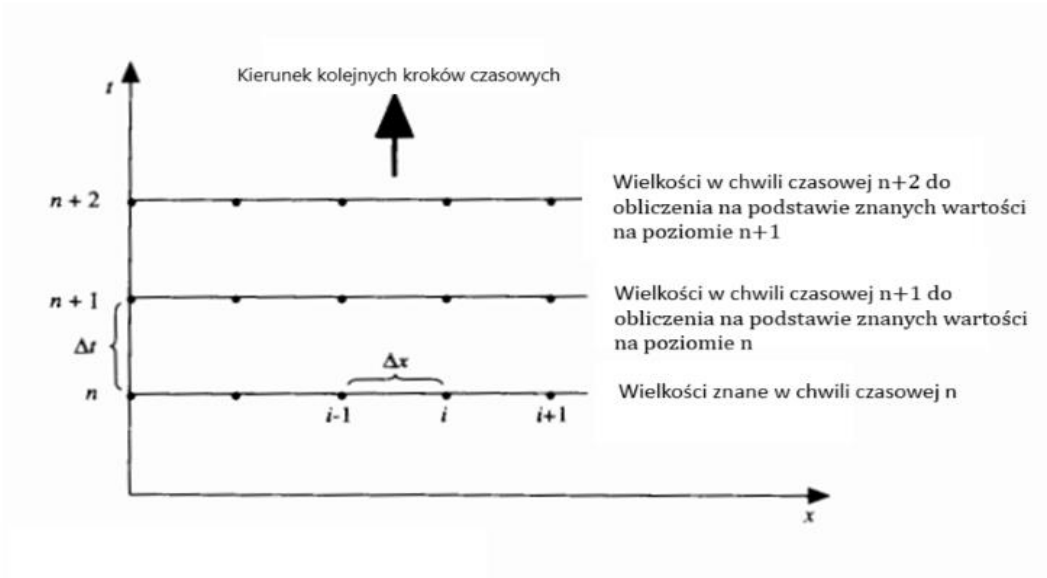
$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = \frac{\alpha(T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n)}{(\Delta x)^2} \quad (2)$$

Po dokonaniu pewnych przekształceń, powyższe równanie można zapisać jako:

$$T_i^{n+1} = T_i^n + \alpha \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n) \quad (3)$$

Przeanalizujmy implikacje równania (1) i jego odpowiednika w postaci równania różniczkowego (3). Należy wspomnieć, że równanie (1) jest parabolicznym równaniem różniczkowym cząstkowym. Będąc równaniem parabolicznym, równanie to nadaje się do rozwiązania zmiennego w czasie. Aby być bardziej szczegółowym, rozważę siatkę różnic skończonych naszkicowaną na Rys. 1. Założę, że T jest znane we wszystkich punktach siatki na poziomie czasu n. Krok w czasie oznacza, że T wszystkich punktów siatki na poziomie czasu n + 1 są obliczane na podstawie znanych wartości na poziomie czasu n. Po zakończeniu tych obliczeń mamy znane wartości na poziomie czasu n + 1. Następnie ta sama procedura jest używana do obliczenia T wszystkich punktów siatki na poziomie czasu n + 2, przy użyciu znanych wartości na poziomie n + 1. W ten sposób rozwiązanie jest stopniowo uzyskiwane poprzez podawanie kolejnych kroków czasowych. Zwracając uwagę na równanie (3), widać prosty mechanizm realizacji tego rozwiązania w czasie. Należy zauważyć, że równanie (3) jest zapisane z właściwościami na poziomie czasu n po prawej stronie i właściwościami na poziomie czasu n + 1 po lewej stronie. Przypominając jeszcze raz, wszystkie właściwości na poziomie n są znane, a te na poziomie n + 1 mają zostać obliczone. Szczególnie istotne jest to, że w równaniu (3) pojawia się tylko jedna niewiadoma, a mianowicie T_i^{n+1} . Stąd równanie (3) pozwala na natychmiastowe rozwiązanie T_i^{n+1} na podstawie znanych właściwości na poziomie czasu n. Równanie posiada tylko jedną niewiadomą - nic prostszego. Dla przykładu, można przeanalizować siatkę pokazaną na Rys. 2, gdzie przedstawione jest rozmieszczenie siedmiu punktów siatki wzdłuż osi x. Zapisanie równania (3) dla punktu siatki 2 przyjmie następującą formę:

$$T_2^{n+1} = T_2^n + \alpha \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (T_3^n - 2T_2^n + T_1^n) \quad (4)$$



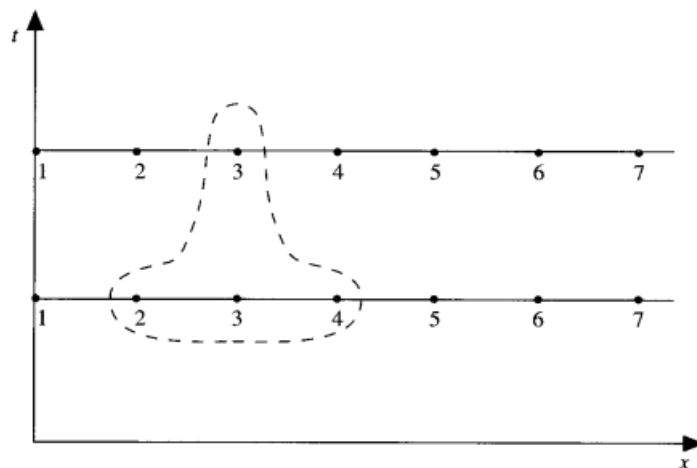
Rysunek 1 Ilustracja kroków czasowych

Pozwala to na bezpośrednie obliczenie T_2^{n+1} , ponieważ wszystkie wielkości po prawej stronie równania (4) są znane. Następnie, zapisując równanie dla punktu 3, równanie (3) jest zapisane jako:

$$T_3^{n+1} = T_3^n + \alpha \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (T_4^n - 2T_3^n + T_2^n) \quad (5)$$

Pozwala to na bezpośrednie obliczenie T_3^{n+1} ze znanych liczb po prawej stronie równania (5). W ten sam sposób, poprzez sekwencyjne zastosowanie równania (3) do punktów siatki 4, 5 i 6, otrzymuje się kolejno wartości T_4^{n+1} , T_5^{n+1} , and T_6^{n+1} .

To, co właśnie zostało przedstawione powyżej, jest przykładem podejścia jawnego. Z definicji, w podejściu jawnym każde równanie różniczkowe zawiera tylko jedną niewiadomą i dlatego może być rozwiązane jawnie dla tej niewiadomej w prosty sposób. Nie ma nic prostszego. To jawne podejście jest zilustrowane na rys. 2. Moduł ten zawiera tylko jedną niewiadomą na poziomie czasu $n + 1$.



Rysunek 2 Moduł różnic skończonych w schemacie jawnym

W odniesieniu do punktów siatki 1 i 7 na rys. 2, rozwiązanie parabolicznego równania różniczkowego cząstkowego zakłada określenie warunków brzegowych. W odniesieniu do rys. 2 oznacza to, że T_1 oraz T_7 , które reprezentują T odpowiednio na lewej i prawej granicy, są znanymi liczbami na każdym poziomie czasu.

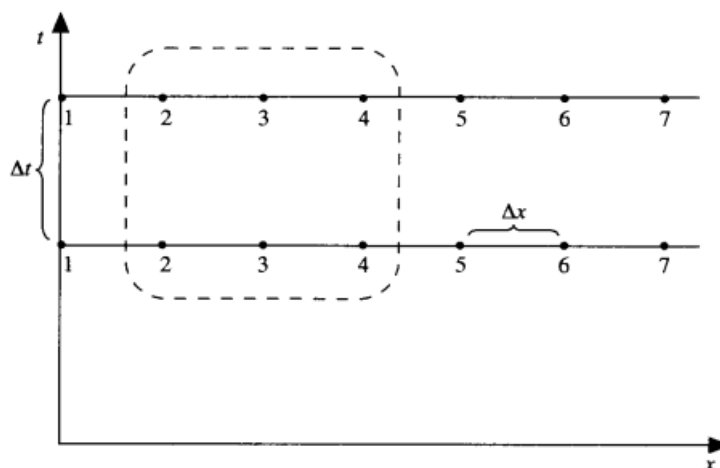
Równanie (2) nie jest jedynym równaniem różniczkowym, które może reprezentować równanie (1); w rzeczywistości jest to tylko jedna z wielu różnych reprezentacji oryginalnego równania różniczkowego cząstkowego. Jako kontrprzykład do powyższej dyskusji dotyczącej podejścia jawnego, można być nieco odważniejszym i zapisać równanie (1) w inny sposób. Tym razem różnica po prawej stronie równania będzie zapisana w kategoriach średnich właściwości między poziomami czasu n i $n + 1$. Oznacza to, że równanie (1) będzie przedstawione jako:

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = \alpha \frac{\frac{1}{2}(T_{i+1}^{n+1} + T_{i+1}^n) + \frac{1}{2}(-2T_i^{n+1} - 2T_i^n) + \frac{1}{2}(T_{i-1}^{n+1} + T_{i-1}^n)}{(\Delta x)^2} \quad (6)$$

Specjalny typ różniczkowania zastosowany w równaniu (6) jest nazywany formą Cranka-Nicolsona. (Różniczkowanie Cranka-Nicolsona jest powszechnie stosowane do rozwiązywania problemów związanych z równaniami parabolicznymi. W CFD forma Cranka-Nicolsona lub jej zmodyfikowane wersje są często używane do rozwiązywania równań warstwy brzegowej metodą różnic skończonych). Należy przyjrzeć się dokładnie równaniu (6). Niewiadoma T_i^{n+1} jest wyrażona nie tylko w kategoriach znanych wielkości na poziomie czasu n , T_{i+1}^n , T_i^n , T_{i-1}^n ale także w kategoriach innych nieznanymi wielkości na poziomie czasu $n + 1$, a mianowicie T_{i+1}^{n+1} i T_{i-1}^{n+1} . Innymi słowy, równanie (6) reprezentuje jedno równanie z trzema niewiadomymi T_{i+1}^{n+1} , T_i^{n+1} oraz T_{i-1}^{n+1} . W związku z tym równanie (6) zastosowane w danym punkcie siatki nie jest niezależne. Równanie (6) musi być zapisane we wszystkich wewnętrznych punktach siatki, co skutkuje układem równań algebraicznych, z których niewiadome T_i^{n+1} dla wszystkich i mogą być rozwiązane jednocześnie. Jest to przykład podejścia niejawnego. Z definicji podejście niejawne to takie, w którym niewiadome muszą być uzyskane za pomocą jednoczesnego rozwiązania równań różniczkowych zastosowanych we wszystkich punktach siatki rozmieszczonych na danym poziomie czasu. Ze względu na potrzebę rozwiązywania dużych układów jednoczesnych równań algebraicznych, metody niejawne są zwykle związane z manipulowaniem dużymi macierzami. W tym momencie łatwo jest odnieść wrażenie, że podejście niejawne obejmuje bardziej złożony zestaw obliczeń niż podejście jawne omówione wcześniej. W przeciwieństwie do prostego jawnego modułu różnic skończonych pokazanego na Rys. 2, moduł niejawny dla równania (6) jest naszkicowany na Rys. 3, wyraźnie określając trzy niewiadome na poziomie $n + 1$.

Uściślając, używając jako przykładu siedmiopunktowej siatki przestrzennej pokazanej na rys. 3. Równanie (6) można przekształcić, aby wyświetlić niewiadome po lewej stronie i znane liczby po prawej stronie. Wynikiem jest:

$$\begin{aligned} \frac{\alpha \Delta t}{2(\Delta x)^2} T_{i-1}^{n+1} - \left[1 + \frac{\alpha \Delta t}{(\Delta x)^2} \right] T_i^{n+1} + \frac{\alpha \Delta t}{2(\Delta x)^2} T_{i+1}^{n+1} \\ = -T_i^n - \frac{\alpha \Delta t}{2(\Delta x)^2} (T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n) \end{aligned} \quad (7)$$



Rysunek 3 Moduł różnic skończonych w schemacie niejawnym

Upraszczając nomenklaturę, oznaczając następujące wielkości przez A, B, i K_i

$$A = \frac{\alpha \Delta t}{2(\Delta x)^2}$$

$$B = 1 + \frac{\alpha \Delta t}{(\Delta x)^2}$$

$$K_i = -T_i^n - \frac{\alpha \Delta t}{2(\Delta x)^2} (T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n)$$

Można zapisać Równanie (7) w następującej formie

$$AT_{i-1}^{n+1} - BT_i^{n+1} + AT_{i+1}^{n+1} = K_i \quad (8)$$

Należy zauważyć, że K_i w równaniu (8) składa się z właściwości na poziomie czasu n , które są znane. Stąd K_i jest znaną liczbą w równaniu (8). Wracając do rys. 3, można zastosować równanie (8) sekwencyjnie do punktów siatki od 2 do 6.

Dla punktu 2

$$AT_1 - BT_2 + AT_3 = K_2 \quad (9)$$

Dla wygody można zrezygnować z indeksu górnego; łatwo zapamiętać, że T_1 , T_2 , and T_3 reprezentują trzy wartości na poziomie czasu $n + 1$, a K_2 jest znaną liczbą. Ponadto, ze względu na określone warunki brzegowe w punktach siatki 1 i 7, T_1 w równaniu (9) jest liczbą znaną. W związku z tym w równaniu (9) wyrażenie obejmujące znaną wartość T_1 można przenieść na prawą stronę, co daje wynik:

$$-BT_2 + AT_3 = K_2 - AT_1 \quad (10)$$

Oznaczając $K_2 - AT_1$ jako K_2' , gdzie K_2' jest znaną liczbą, równanie (10) jest zapisane jako:

$$-BT_2 + AT_3 = K_2' \quad (11)$$

Dla punktu 3 $AT_2 - BT_3 + AT_4 = K_3$ (12)

Dla punktu 4 $AT_3 - BT_4 + AT_5 = K_4$ (13)

Dla punktu 5 $AT_4 - BT_5 + AT_6 = K_5$ (14)

Dla punktu 6 $AT_5 - BT_6 + AT_7 = K_6$ (15)

W równaniu (15), ponieważ punkt siatki 7 znajduje się na granicy, T_7 jest znany z określonego warunku brzegowego. Stąd równanie (15) można przekształcić jako:

$$AT_5 - BT_6 = K_6 - AT_7 = K'_6 \quad (16)$$

Gdzie K'_6 jest znaną liczbą.

Równania od (11) do (14) i (16) to pięć równań dla pięciu niewiadomych T_2, T_3, T_4, T_5 , i T_6 . Ten układ równań można zapisać w postaci macierzowej w następujący sposób:

$$\begin{bmatrix} -B & A & 0 & 0 & 0 \\ A & -B & A & 0 & 0 \\ 0 & A & -B & A & 0 \\ 0 & 0 & A & -B & A \\ 0 & 0 & 0 & A & -B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K'_2 \\ K_3 \\ K_4 \\ K_5 \\ K'_6 \end{bmatrix} \quad (17)$$

Macierz współczynników jest macierzą trójdiagonalną, zdefiniowaną jako posiadającą niezerowe elementy tylko wzdłuż trzech przekątnych, które są oznaczone trzema przerywanymi liniami w równaniu (17). Rozwiązanie układu równań oznaczonego równaniem (17) wymaga manipulacji układem macierzy. Takie rozwiązania są zwykle uzyskiwane za pomocą algorytmu Thomasa, który stał się niemal standardem w rozwiązywaniu trójdiagonalnych układów równań.

Oczywiście, na podstawie powyższego przykładu, podejście niejawne jest bardziej zaawansowane niż podejście jawne. Nie jest to jednak cała historia. Równanie modelowe, które zostało wybrane, a mianowicie równanie (1), jest liniowym równaniem różniczkowym cząstkowym i prowadzi do liniowego równania różniczkowego, takiego jak równania (3) i (6). Z drugiej strony, co się dzieje, gdy rządzące równanie różniczkowe cząstkowe jest nieliniowe? Na przykład, kiedy dyfuzyjność termiczna α w równaniu (1) jest funkcją temperatury, tj. z równania (1):

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha(T) \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (18)$$

Równanie (18) jest teraz nieliniowym równaniem różniczkowym cząstkowym. Nie ma to praktycznie żadnego wpływu na podejście jawne, w którym równanie różniczkowe może być zapisane dla równania (18), analogicznie do równania (3), jako:

$$T_i^{n+1} = T_i^n + \alpha(T_i^n) \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n) \quad (19)$$

Równanie (19) jest nadal liniowe z pojedynczą niewiadomą T_i^{n+1} , ponieważ α jest obliczane na poziomie czasu n , tzn. $\alpha = \alpha(T_i^n)$, gdzie T_i^n . Z drugiej strony, jeśli do równania (18) stosowana jest metoda Cranka-Nicolsona, prawa strona jest obliczana jako średnia między

poziomami czasu n i $n + 1$, w wyniku czego $\alpha(T)$ jest reprezentowana przez $\frac{1}{2}[\alpha(T_i^{n+1}) + \alpha(T_i^n)]$. Wynikowe równanie różniczkowe ma postać równania (7), z tym wyjątkiem, że teraz α jest wszędzie zastępowane przez $\frac{1}{2}[\alpha(T_i^{n+1}) + \alpha(T_i^n)]$. Oczywiście nowe równanie różniczkowe obejmuje iloczyny zmiennych zależnych, takie jak $[\alpha(T_i^{n+1})]T_i^{n+1}$, $[\alpha(T_i^{n+1})]T_{i+1}^{n+1}$ i $[\alpha(T_i^{n+1})]T_{i-1}^{n+1}$. Innymi słowy, wynikowe równanie różniczkowe jest nieliniowym równaniem algebraicznym. Rozwiązanie niejawne wymagałoby zatem jednoczesnego rozwiązania dużego układu równań nieliniowych - co jest wyjątkowo trudnym zadaniem. Jest to ogromna wada podejścia niejawnego. Aby obejść ten problem, równania różniczkowe są zwykle „linearyzowane” w sposób przybliżony. Na przykład, w równaniu (18) α jest po prostu obliczane na poziomie czasu n , a nie jako średnia między poziomami n i $n + 1$, wówczas w równaniu różniczkowym nie pojawią się żadne nieliniowe wyrażenia algebraiczne.

Mając na uwadze złożoność podejścia metody niejawnej w stosunku do podejścia metody jawnej, natychmiastowe pojawia się pytanie: po co w ogóle zajmować się podejściem niejawnym? Dlaczego nie zawsze stosować podejście jawne? Niestety, życie nie jest takie proste. Nie wspomniano jeszcze o najważniejszej różnicy między podejściem jawnym i niejawnym. Należy zauważyć, że przyrosty Δx i Δt pojawiają się we wszystkich powyższych równaniach różniczkowych. W przypadku podejścia jawnego, po wybraniu Δx , Δt nie jest niezależnym, arbitralnym wyborem. Δt jest raczej ograniczone, aby było równe lub mniejsze od pewnej wartości określonej przez kryterium stabilności. Jeśli Δt jest większe niż limit narzucony przez kryterium stabilności, procedura kroku w czasie szybko stanie się niestabilna, a program komputerowy szybko się wyłączy z powodu, że liczby zmierzają do nieskończoności lub będzie trzeba wyliczyć pierwiastek kwadratowy z liczby ujemnej. W wielu przypadkach Δt musi być bardzo małe, aby zachować stabilność. Może to skutkować długim czasem pracy komputera w celu wykonania obliczeń w danym przedziale czasu. Z drugiej strony, nie ma takich ograniczeń stabilności w podejściu niejawnym. W przypadku większości metod niejawnych stabilność może być utrzymywana przy znacznie większych wartościach Δt niż w przypadku metody jawnej. W rzeczywistości niektóre metody niejawne są bezwarunkowo stabilne, co oznacza, że każda wartość Δt , bez względu na to, jak duża, przyniesie stabilne rozwiązanie. W związku z tym, w przypadku metody niejawnej, wymagana jest znacznie mniejsza liczba kroków czasowych do pokrycia danego przedziału czasu w porównaniu z metodą jawną. Dlatego w przypadku niektórych zastosowań, choć podejście niejawne wymaga większej liczby obliczeń na krok czasowy ze względu na swoją złożoność, mniejsza liczba kroków czasowych potrzebnych do pokrycia danego przedziału czasu może ostatecznie prowadzić do krótszego czasu działania na komputerze w porównaniu z podejściem jawnym.

Jednakże trzeba zdawać sobie sprawę, że istnieje wada dużych wartości Δt dopuszczalnych dla metod niejawnych. Aby to zrozumieć, należy przypomnieć, że krok czasowy w kontekście CFD jest wykorzystywany do osiągnięcia jednego lub drugiego z następujących celów:

1. Uzyskanie rozwiązania w stanie ustalonym poprzez przyjęcie arbitralnych warunków początkowych dla pola przepływu, a następnie obliczenie przepływu w krokach czasowych, przechodząc do wystarczająco dużej liczby kroków czasowych, aż do osiągnięcia końcowego przepływu w stanie ustalonym przy dużych wartościach czasu. W tej sytuacji końcowy stan ustalony jest pożądanym wynikiem, a krok czasowy jest po prostu środkiem do tego celu.

2. Uzyskanie dokładnego rozwiązania czasowego przepływu z natury niestatego, takiego jak zmienne w czasie pole przepływu nad pochylonym płatem lub naturalnie niestały wzór przepływu, który wynika z wielu oddzielonych przepływów.

W odniesieniu do punktu 1 powyżej, procedura kroku czasowego nie musi być dokładna w czasie; musi jedynie, w jakiś sposób, ostatecznie zbliżyć się do prawidłowego pola przepływu w stanie ustalonym. Z drugiej strony, w przypadku punktu 2 powyżej, dokładność czasowa metody zmiennej w czasie jest absolutnie konieczna - jest to zmienność czasowa pola przepływu, którą użytkownik chce rozwiązać. W tym miejscu do rozważań wkracza wada podejścia

niejawnego wykorzystującego dużą wartość Δt . Oczywiście jest, że wraz ze wzrostem Δt rośnie błąd obcinania związany z wyrażeniem różnicowym dla pochodnej czasowej. W tym przypadku metoda niejawna wykorzystująca duże wartości Δt może niedokładnie definiować zmienność czasową pola przepływu. W takiej sytuacji zaleta podejścia niejawnego może zostać całkowicie zanegowana.

Co to wszystko oznacza? Oznacza to po prostu, że istnieją przypadki, w których zastosowanie metody jawnej ma największy sens i inne, w których metoda niejawna jest najlepszym wyborem. Aby pomóc dokonać wyboru, którą metodę wybrać, poniżej zostały zapisane główne zalety i wady tych dwóch podejść.

Podejście jawne

Zaleta - stosunkowo prosta konfiguracja i programowanie.

Wada - W odniesieniu do powyższego przykładu, dla danego Δx , Δt musi być mniejsze niż pewien limit narzucony przez ograniczenia stabilności. W niektórych przypadkach Δt musi być bardzo małe, aby zachować stabilność; może to skutkować długim czasem pracy komputera.

Podejście niejawne

Zaleta - stabilność może być utrzymywana przy znacznie większych wartościach Δt , a zatem przy użyciu znacznie mniejszej liczby kroków czasowych. Skutkuje to krótszym czasem pracy komputera.

Wada - bardziej skomplikowana konfiguracja i programowanie.

Wada - w każdym kroku czasowym wymagane są zwykle ogromne manipulacje macierzami, czas pracy komputera na pojedynczy krok czasowy jest znacznie większy niż w podejściu jawnym.

Wada - ponieważ można przyjąć duże Δt , błąd obliczeniowy związany z obcięciem jest duży. Skutkuje to tym, że użycie metod niejawnych do śledzenia dokładnych stanów nieustalonych może nie być tak dokładne, jak podejście jawne. Jednak w przypadku rozwiązania zależnego od czasu, w którym pożądanym wynikiem jest stan ustalony, ta względna niedokładność czasowa nie jest istotna.