UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY



MODELOVANIE A ANALÝZA PRÚDENIA V REAKTÍVNYCH PÓROVITÝCH PROSTREDIACH

DIPLOMOVÁ PRÁCA

2019 Bc. Radoslav HURTIŠ

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

MODELOVANIE A ANALÝZA PRÚDENIA V REAKTÍVNYCH PÓROVITÝCH PROSTREDIACH

DIPLOMOVÁ PRÁCA

Študijný program:	Ekonomicko-finančná matematika a modelovanie
Študijný odbor:	1114 Aplikovaná matematika
Školiace pracovisko:	Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Vedúci práce:	doc. Mgr. Peter Guba, PhD.

Bratislava 2019 **Bc. Radoslav HURTIŠ**





Univerzita Komenského v Bratislave
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

ZADANIE ZÁVEREČNEJ PRÁCE

Meno a priezvisko študenta: Bc. Radoslav Hurtiš
Študijný program: ekonomicko-finančná matematika a modelovanie (Jednoodborové štúdium, magisterský II. st., denná forma)
Študijný odbor: aplikovaná matematika
Typ záverečnej práce: diplomová
Jazyk záverečnej práce: slovenský
Sekundárny jazyk: anglický

Názov: Modelovanie a analýza prúdenia v reaktívnych pórovitých prostrediach
Modeling and analysis of flows in reactive porous media

Anotácia: Pri prúdení kvapalnej fázy cez pórovité médium dochádza často k reakcii medzi kvapalinou a pevnou štruktúrou pórovitého média, ktorá má za následok zmenu permeability pórovitého prostredia. Reaktívne prúdenie podlieha nestabilite, ktorá sa vyznačuje sústredením toku do relatívne úzkych kanálov. Takáto nestabilita často vzniká pri fázovej premene viaczložkových zmesí.

Vedúci: doc. RNDr. Peter Guba, PhD.
Katedra: FMFI.KAMŠ - Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Vedúci katedry: prof. RNDr. Marek Fila, DrSc.

Dátum zadania: 24.01.2018

Dátum schválenia: 25.01.2018

prof. RNDr. Daniel Ševčovič, DrSc.
garant študijného programu

.....
študent

.....
vedúci práce

Poďakovanie Touto cestou by som sa chcel poďakovať vedúcemu práce doc. Mgr. Petrovi Gubovi, PhD. za ochotu, odborné rady, pripomienky a taktiež za konzultácie, ktoré mi veľmi pomohli pri písaní tejto práce.

Abstrakt v štátnom jazyku

HURTIŠ, Radoslav: Modelovanie a analýza prúdenia v reaktívnych pórovitých prostrediach [Diplomová práca], Univerzita Komenského v Bratislave, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky; školiteľ: doc. Mgr. Peter Guba, PhD., Bratislava, 2019, 83 s.

V tejto práci sa zaoberáme stabilitou reaktívneho prúdenia v pórovitých médiách a využitím moderného numerického nástroja COMSOL Multiphysics analyzujeme podmienky, pri ktorých dochádza k prechodu do nelineárnej nestability reakčného frontu. Analýza linearizovanej stability postupujúceho frontu je založená na aplikácii Čebyševovej a Hermitovej spektrálnej kolokačnej metódy pre odlišné triedy permeabilitných vzťahov. Hlavným výsledkom práce je numerická simulácia postupujúceho reakčného frontu s plne nelineárnymi poruchami implementáciou metódy konečných prvkov.

Kľúčové slová: analýza lineárnej stability, Čebyševova spektrálna kolokačná metóda, Hermitova spektrálna kolokačná metóda, metóda konečných prvkov, COMSOL Multiphysics

Abstract

HURTIŠ, Radoslav: Modeling and analysis of flows in reactive porous media [Master's Thesis], Comenius University in Bratislava, Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Department of Applied Mathematics and Statistics; Supervisor: doc. Mgr. Peter Guba, PhD., Bratislava, 2019, 83 p.

In this master's thesis we deal with the stability of flows in reactive porous media, and using a modern numerical tool, COMSOL Multiphysics, we analyse conditions in which there is a transition to nonlinear instability of the reaction front. The linear stability analysis of the moving front is based on application of Chebyshev and Hermite spectral collocation methods for different types of permeability functions. The main result of this thesis is a numerical simulation of the propagating reaction front with fully nonlinear perturbations by implementing the finite element method.

Keywords: linear stability analysis, Chebyshev spectral collocation method, Hermite spectral collocation method, finite element method, COMSOL Multiphysics

Obsah

Úvod **8**

1 Model reaktívneho prúdenia v pórovitom médiu **10**

1.1 Formulácia 10

1.2 Základný stav 11

1.3 Zbezrozmernenie 14

1.4 Permeabilita 16

1.5 Poruchy základného stavu 17

1.6 Normálne módy porúch 20

2 Čebyševova spektrálna kolokačná metóda **22**

2.1 Čebyševove body a diferenčné matice 22

2.2 Presnosť Čebyševovej derivácie 25

2.3 Implementácia 28

2.4 Falošné vlastné hodnoty 33

2.5 Numerické výsledky 36

2.5.1 Konštantný vzťah pre permeabilitu 36

2.5.2 Exponenciálny vzťah pre permeabilitu 39

2.6 Numerické výsledky využitím systému Matlab/Chebfun 42

2.6.1 Konštantný vzťah pre permeabilitu 42

2.6.2 Exponenciálny vzťah pre permeabilitu 44

3 Hermitova spektrálna kolokačná metóda **46**

3.1 Hermitove body a diferenčné matice 46

3.2 Presnosť Hermitovej derivácie 48

3.3 Implementácia 50

3.4 Numerické výsledky 51

3.4.1 Konštantný vzťah pre permeabilitu 51

3.4.2 Exponenciálny vzťah pre permeabilitu 53

3.5 Numerické výsledky využitím systému Matlab/Hydrostab 57

3.5.1 Konštantný vzťah pre permeabilitu 57

3.5.2 Exponenciálny vzťah pre permeabilitu 58

4 Metóda konečných prvkov **60**

4.1 MKP pre 2D úlohy: Ilustratívny príklad 60

4.2 Existencia a konvergencia riešenia 62

4.3 Numerické riešenie využitím systému COMSOL Multiphysics 64

4.3.1 Konštantný vzťah pre permeabilitu 66

4.3.2 Exponenciálny vzťah pre permeabilitu 66

Záver **68**

Zoznam použitej literatúry **70**

Príloha A **72**

A.1 Čebyševove polynómy 72

A.2 Derivácie Čebyševových polynómov 72

Príloha B **73**

Úvod

Hydrodynamická stabilita je dôležitá oblasť hydrodynamiky, ktorá sa zaoberá stabilitou prúdenia kvapalín. Štúdium hydrodynamickej stability má za hlavný cieľ zistiť, za akých podmienok dochádza k prechodu laminárneho prúdenia na turbulentné. Už v 19. storočí boli rozpoznané a formulované základné problémy hydrodynamickej stability najmä Helmoltzom, Kelvinom, Rayleighom a Reynoldsom. V súčasnosti má teória hydrodynamickej stability široké uplatnenie vo fyzike, inžinierstve a medicíne.

Pri prúdení rozpúšťadla cez pórovité prostredie dochádza spravidla k chemickej reakcii medzi rozpúšťadlom a povrchovými vrstvami rozpustiteľnej látky pórovitého média. Reaktívne prúdenie leptá štruktúru pórovitého média a to spôsobuje zvyšovanie jeho permeability. Postupujúci reakčný front niekedy trpí nestabilitou, pri ktorej sa rozpúšťadlo koncentruje do vysoko priepustných kanálikov. Takáto nestabilita je často označovaná pojmom fingering pre jej vizuálny efekt pripomínajúci tvar prstov.

Problematike stability reaktívneho prúdenia sa venujú viaceré publikácie [2, 8, 12]. V tejto práci budeme vychádzať zo zdroja [8], v ktorom autori analyzujú lineárnu stabilitu postupujúceho reakčného frontu v pórovitom prostredí. Pre malé a veľké vlnové dĺžky a pre malé variácie v permeabilite hľadajú asymptotické riešenia. Numerické riešenie počítajú pomocou lokálnych numerických metód pre vybrané permeabilitné vzťahy. Do úvahy berú pomerne zjednodušený model reaktívneho prúdenia, v ktorom je pórovitosť média a dynamická viskozita kvapalnej fázy konštantná. Rýchlosť chemickej reakcie je úmerná produktom koncentrácie rozpúšťadla a rozpustiteľnej látky pri štandardnej reakčnej rýchlostnej miere. Prúdene kvapalnej fázy v kontinuu sa riadi Darcyho zákonom.

Cieľom práce je analyzovať lineárnu stabilitu reaktívneho prúdenia použitím vybraných spektrálnych kolokačných metód [1, 13], ktoré sa vyznačujú pomerne vysokou presnosťou. Pre porovnanie výpočty prevedieme pomocou súčasných alternatívnych nástrojov [5, 15] založených na podobnom numerickom princípe. Numerické simulácie postupujúceho frontu pre prípad nelineárnych porúch laminárneho prúdenia dostaneme implementáciou metódy konečných prvkov v systéme COMSOL Multiphysics.

Táto práca je rozdelená na štyri kapitoly. V prvej z nich uvedieme model dvojrozmerného reaktívneho prúdenia v pórovitom médiu [8]. Potom pre zbezrozmernený model

uvažujeme základný stav prúdenia s perturbáciami podobne ako v [6, 7, 8]. Po linearizácii porúch a ich rozklade na normálne módy odvodíme problém, ktorý bude popisovať lineárnu stabilitu prúdenia a ktorým sa budeme ďalej zaoberať. V druhej kapitole implementáciou Čebyševovej kolokačnej metódy [13] diskretizujeme problém lineárnej stability na zovšeobecnený vlastnohodnotový problém. Tento problém budeme riešiť taktiež v systéme Matlab/Chebfun. V tretej kapitole na problém lineárnej stability aplikujeme Hermitovu kolokačnú metódu [15] a výsledky porovnáme s riešením zo systému Matlab/Hydrostab. V záverečnej kapitole predstavíme metódu konečných prvkov a pre časo-priestorový vývoj reakčného frontu uvedieme numerické výsledky získané touto metódou.

1 Model reaktívneho prúdenia v pórovitom médiu

V tejto kapitole sa budeme zaoberať modelom reaktívneho prúdenia v pórovitom médiu, ktorý bol predstavený v [8]. Najprv uvedieme matematickú formuláciu modelu a základný stav pre reaktívne prúdenie. Po zbezrozmernení modelu odvodíme problém pre linearizované poruchy základného stavu, ktoré sa niekedy objavujú pri prúdení a ktoré charakterizujú hydrodynamickú stabilitu celého systému.

1.1 Formulácia

Rovnice modelu dvojrozmerného reaktívneho prúdenia v pórovitých prostrediach uvedené v [8] možno zapísať v tvare

$$\phi\frac{\partial c^*}{\partial t^*} + \boldsymbol{\nabla}^* \cdot (\boldsymbol{u}^* c^*) = -k^* c^* w^*, \tag{1.1a}$$

$$\nu(1-\phi)\frac{\partial w^*}{\partial t^*} = -k^* c^* w^*, \tag{1.1b}$$

$$\boldsymbol{u}^* = -\frac{\kappa^*(w^*)}{\mu^*}\boldsymbol{\nabla}^* p^*, \tag{1.1c}$$

$$\boldsymbol{\nabla}^* \cdot \boldsymbol{u}^* = 0, \tag{1.1d}$$

kde premenná $c^*(\boldsymbol{x}^*, t^*)$ je koncentrácia rozpúšťadla na jednotku objemu pórovitého priestoru, premenná $w^*(\boldsymbol{x}^*, t^*)$ je koncentrácia rozpustiteľnej prímesi na jednotku objemu priestoru tuhej fázy, $\boldsymbol{u}^*(\boldsymbol{x}^*, t^*)$ je objemový tok rozpúšťadla na jednotku plochy pórovitého prostredia (tzv. Darcyho rýchlosť) a $p^*(\boldsymbol{x}^*, t^*)$ predstavuje tlak v kvapalnej fáze.[1] Bezrozmerný parameter ϕ vyjadruje pórovitosť prostredia. Reakčná rýchlostná konštanta k^* a stechiometrická konštanta ν charakterizujú chemickú reakciu medzi rozpúšťadlom a prímesou. Parameter μ^* určuje dynamickú viskozitu kvapalnej fázy a permeabilita $\kappa^*(w^*)$ je funkcia závislá od koncentrácie rozpustiteľnej prímesi.[2] Rovnica (1.1a) predstavuje lokálny zákon zachovania pre rozpúšťadlo so zahrnutím efektu advekcie rýchlostným poľom $\boldsymbol{u}^*$ a efektu reakcie medzi rozpúšťadlom a pórovitou štruktúrou. Podobne rovnica (1.1b) reprezentuje zákon zachovania pre prímes prítomnú v pevnej fáze. Rovnica (1.1c) je Darcyho rovnica pre popis reaktívneho pórovitého prostredia. Rovnica (1.1d) vyjadruje lokálny zákon zachovania kvapalnej fázy.

[1] Symbolom * sú označené rozmerné veličiny a operátory.

[2] Funkcia permeability bude definovaná v sekcii 1.4 pre bezrozmerný model.

Poloha v pórovitom prostredí $\boldsymbol{x}^* = (x^*, y^*)^T$ sa uvažuje na oblasti

$$-\infty \leq x^* \leq \infty, \quad -\infty \leq y^* \leq \infty \quad \text{pre} \quad t^* \geq 0.$$

Koncentrácia rozpúšťadla c^* a prímesi w^* spĺňa nasledovné hraničné podmienky. Ďaleko proti prúdu charakterizovaného rýchlostným poľom $\boldsymbol{u}^*$ ide koncentrácia rozpúšťadla k predpísanej konštante $c^*_{-\infty}$ a prímes je úplne rozpustená, t. j.

$$c^* \to c^*_{-\infty}, \quad w^* \to 0 \quad \text{pre} \quad x^* \to -\infty. \tag{1.2a,b}$$

Ďaleko po prúde je rozpúšťadlo úplne spotrebované a koncentrácia prímesi ide k predpísanej konštante w^*_{∞}, t. j.

$$c^* \to 0, \quad w^* \to w^*_{\infty} \quad \text{pre} \quad x^* \to \infty. \tag{1.2c,d}$$

1.2 Základný stav

Pre základný stav v modeli reaktívneho prúdenia budeme predpokladať homogénny jednosmerný tok riadený rýchlostným poľom

$$\bar{\boldsymbol{u}}^* = (\bar{u}^*, \bar{v}^*)^T = (U^*, 0)^T, \tag{1.3}$$

kde U^* je daná konštanta.[3] Inými slovami, uvedené rýchlostné pole má prúdočiary rovnobežné s osou x^* a profil rýchlostného poľa nezávisí od y^* a t^*. V základnom stave ďalej uvažujeme, že funkcie $\bar{c}^*, \bar{w}^*$ a $\bar{p}^*$ sú závislé len od súradnice x^* a času t^*.

Rovnicu (1.1a) upravíme využitím identity

$$\boldsymbol{\nabla}^* \cdot (\boldsymbol{u}^* c^*) = \boldsymbol{u}^* \cdot (\boldsymbol{\nabla}^* c^*) + c^* \boldsymbol{\nabla}^* \cdot \boldsymbol{u}^* \tag{1.4}$$

a vzťahov (1.1d) a (1.3) na rovnicu

$$\phi \frac{\partial \bar{c}^*}{\partial t^*} + U^* \frac{\partial \bar{c}^*}{\partial x^*} = -k^* \bar{c}^* \bar{w}^*. \tag{1.5}$$

Pre vzťah (1.1c) po dosadení predpokladu (1.3) a zapísaní po zložkách platí

$$U^* = -\frac{\kappa^*(\bar{w}^*)}{\mu^*} \frac{\partial \bar{p}^*}{\partial x^*}, \tag{1.6a}$$

[3] Symbolom $^-$ sú označené veličiny charakterizujúce základný stav.

$$0 = -\frac{\kappa^*(\bar{w}^*)}{\mu^*}\frac{\partial \bar{p}^*}{\partial y^*}, \tag{1.6b}$$

pričom rovnica (1.6b) je splnená automaticky, pretože funkcia $\bar{p}^*$ nie je závislá od premennej y^*. Podobne aj rovnica kontinuity (1.1d) je v základnom stave splnená automaticky.

Z rovnice (1.6a) môžeme odvodiť vzťah pre neznámu funkciu $\bar{p}^*(x^*, t^*)$. Ak tlak $\bar{p}^*$ spĺňa hraničnú podmienku $\bar{p}^* \to \bar{p}^*_{-\infty}$ pre $x^* \to -\infty$, kde $\bar{p}^*_{-\infty}$ je daná konštanta, tak po integrovaní dostávame vzťah

$$\bar{p}^*(x^*, t^*) = \bar{p}^*_{-\infty} - \mu^* U^* \int_{-\infty}^{x^*} \frac{\mathrm{d}s^*}{\kappa^*(\bar{w}^*(s^*, t^*))}.$$

Z vyššie uvedeného vyplýva, že vzťahy pre neznámu funkciu koncentrácie rozpúšťadla $\bar{c}^*(x^*, t^*)$ a prímesi $\bar{w}^*(x^*, t^*)$ získame vyriešením sústavy parciálnych diferenciálnych rovníc (1.1b) a (1.5). Na jej vyriešenie použijeme podobnostnú premennú ξ^* definovanú ako $\xi^*(x^*, t^*) = x^* - V^* t^*$, kde neznáma konštanta V^* predstavuje fázovú rýchlosť. Ide o tzv. sebe-podobné riešenie vo forme postupujúcej vlny. Koncentráciu rozpúšťadla a prímesi a tlak ďalej definujeme len ako funkcie premennej ξ^*, t. j. $\bar{c}^*(\xi^*) = \bar{c}^*(x^*, t^*)$, $\bar{w}^*(\xi^*) = \bar{w}^*(x^*, t^*)$ a $\bar{p}^*(\xi^*) = \bar{p}^*(x^*, t^*)$. Rovnice (1.1b) a (1.5) prevedieme na sústavu obyčajných diferenciálnych rovníc prvého rádu. Časové a polohové parciálne derivácie v týchto rovniciach transformujeme na derivácie podľa premennej ξ^* ako

$$\frac{\partial}{\partial t^*} \longmapsto \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi^*}\frac{\partial \xi^*}{\partial t^*} \quad \text{a} \quad \frac{\partial}{\partial x^*} \longmapsto \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi^*}\frac{\partial \xi^*}{\partial x^*}.$$

Po úprave dostávame reakčné rovnice pre základný stav v tvare

$$(U^* - \phi V^*)\frac{\mathrm{d}\bar{c}^*}{\mathrm{d}\xi^*} = -k^* \bar{c}^* \bar{w}^*, \tag{1.7a}$$

$$-\nu(1-\phi)V^*\frac{\mathrm{d}\bar{w}^*}{\mathrm{d}\xi^*} = -k^* \bar{c}^* \bar{w}^*, \tag{1.7b}$$

ktoré spĺňajú príslušné hraničné podmienky

$$\bar{c}^* \to c^*_{-\infty}, \quad \bar{w}^* \to 0 \quad \text{pre} \quad \xi^* \to -\infty, \tag{1.8a,b}$$

$$\bar{c}^* \to 0, \quad \bar{w}^* \to w^*_{\infty} \quad \text{pre} \quad \xi^* \to \infty. \tag{1.8c,d}$$

Ďalej dourčíme fázovú rýchlosť V^*. Elimináciou nelineárneho člena z reakčných rovníc (1.7a) a (1.7b) dostávame

$$(U^* - \phi V^*)\frac{\mathrm{d}\bar{c}^*}{\mathrm{d}\xi^*} = -\nu(1-\phi)V^*\frac{\mathrm{d}\bar{w}^*}{\mathrm{d}\xi^*}. \tag{1.9}$$

Po integrovaní vzťahu (1.9) v medziach od $-\infty$ po ξ^*, resp. od ξ^* po ∞, a aplikácii hraničných podmienok proti prúdu (1.8a,b), resp. po prúde (1.8c,d), dostávame

$$(U^* - \phi V^*)(\bar{c}^* - c^*_{-\infty}) = -\nu(1-\phi)V^*\bar{w}^*, \tag{1.10a}$$

$$(U^* - \phi V^*)\bar{c}^* = -\nu(1-\phi)V^*(\bar{w}^* - w^*_{\infty}). \tag{1.10b}$$

Zo sústavy rovníc (1.10a) a (1.10b) získavame vzťah pre fázovú rýchlosť

$$V^* \equiv \frac{U^*}{\phi + \alpha^{-1}}, \tag{1.11}$$

kde kapacitné číslo rozpúšťadla

$$\alpha \equiv \frac{c^*_{-\infty}}{\nu(1-\phi)w^*_{\infty}}. \tag{1.12}$$

Napriek tomu, že do vzťahu pre parameter α vstupujú rozmerné veličiny $c^*_{-\infty}$ a w^*_{∞}, ich pomer je bezrozmerný, a teda aj samotný parameter α.

V ďalšej časti vyjadríme explicitný vzťah pre profily $\bar{c}^*$ a $\bar{w}^*$ základného stavu. Diferenciálnu rovnicu pre $\bar{c}^*$ vyjadríme z rovníc (1.7a) a (1.10a), z ktorých po úprave dostávame

$$\frac{\mathrm{d}\bar{c}^*}{\mathrm{d}\xi^*} = \frac{\beta^*\bar{c}^*(\bar{c}^* - c^*_{-\infty})}{c^*_{-\infty}}, \tag{1.13}$$

kde rozmerný parameter

$$\beta^{*-1} \equiv \frac{V^*}{k^* w^*_{\infty}\alpha}$$

sa nazýva Damköhlerova dĺžka charakterizujúca reaktívne prúdenie. Riešenie rovnice (1.13) možno vyjadriť v tvare

$$\bar{c}^*(\xi^*) = c^*_{-\infty}\frac{1}{1 - K_1 \mathrm{e}^{\beta^*\xi^*}},$$

kde K_1 je integračná konštanta. Môžeme si všimnúť, že profil $\bar{c}^*(\xi^*)$ spĺňa hraničné podmienky (1.8a) a (1.8c) , t. j.

$$\lim_{\xi^*\to-\infty} \bar{c}^*(\xi^*) = c^*_{-\infty}, \quad \lim_{\xi^*\to\infty} \bar{c}^*(\xi^*) = 0,$$

pre ľubovoľnú nenulovú konštantu K_1. Na zabezpečenie spojitosti profilu $\bar{c}^*$ je potrebné, aby konštanta K_1 bola záporná. Bez straty všeobecnosti budeme ďalej predpokladať, že konštanta K_1 je -1, čo implikuje, že profil $\bar{c}^*$ pre $\xi^* = 0$ nadobúda hodnotu $c^*_{-\infty}/2$.

Podobne pre profil $\bar{w}^*$ dostávame z rovníc (1.7b) a (1.10b) diferenciálnu rovnicu prvého rádu

$$\frac{\mathrm{d}\bar{w}^*}{\mathrm{d}\xi^*} = \frac{\beta^*\bar{w}^*(w^*_\infty - \bar{w}^*)}{w^*_\infty},$$

ktorej riešenie môžeme vyjadriť v tvare

$$\bar{w}^*(\xi^*) = w^*_\infty \frac{K_2 \mathrm{e}^{\beta^*\xi^*}}{1 + K_2\mathrm{e}^{\beta^*\xi^*}},$$

kde K_2 je integračná konštanta. Profil $\bar{w}^*$ spĺňa hraničné podmienky (1.8b) a (1.8d), t. j.

$$\lim_{\xi^*\to-\infty} \bar{w}^*(\xi^*) = 0, \quad \lim_{\xi^*\to\infty} \bar{w}^*(\xi^*) = w^*_\infty,$$

pre ľubovoľnú nenulovú konštantu K_2. V tomto prípade budeme analogicky predpokladať, že profil $\bar{w}^*$ pre $\xi^* = 0$ nadobúda hodnotu $w^*_\infty/2$, a teda $K_2 = 1$.

Teda explicitné vzťahy pre profily reaktívneho prúdenia $\bar{c}^*(\xi^*)$ a $\bar{w}^*(\xi^*)$ základného stavu sú

$$\bar{c}^*(\xi^*) = c^*_{-\infty} \frac{1}{1 + \mathrm{e}^{\beta^*\xi^*}}, \tag{1.14a}$$

$$\bar{w}^*(\xi^*) = w^*_\infty \frac{\mathrm{e}^{\beta^*\xi^*}}{1 + \mathrm{e}^{\beta^*\xi^*}}, \tag{1.14b}$$

kde $\beta^{*-1} \equiv V^*/(k^* w^*_\infty \alpha)$, $\alpha \equiv c^*_{-\infty}/[\nu(1-\phi)w^*_\infty]$ a $V^* \equiv U^*/(\phi + \alpha^{-1})$.

1.3 Zbezrozmernenie

V tejto časti sa budeme zaoberať zbezrozmernením modelu reaktívneho prúdenia a jeho základného stavu. Vzťah medzi jednotlivými rozmernými a bezrozmernými veličinami vyjadríme pomocou rozmerných škál rovnako ako v [8] nasledovne:

$$[\boldsymbol{x}^*] = \frac{1}{\beta^*}, \quad [t^*] = \frac{1}{\beta^* V^*},$$

$$[c^*] = c^*_{-\infty}, \quad [w^*] = w^*_\infty, \quad [\boldsymbol{u}^*] = V^*.$$

Vzťahy medzi rozmernými a bezrozmernými veličinami sú potom

$$\boldsymbol{x}^* = \frac{1}{\beta^*}\boldsymbol{x}, \quad t^* = \frac{1}{\beta^* V^*} t, \tag{1.15a,b}$$

$$c^* = c^*_{-\infty} c, \quad w^* = w^*_\infty w, \quad \boldsymbol{u}^* = V^* \boldsymbol{u}. \tag{1.15c-e}$$

Poznamenajme, že škála pre operátor $\boldsymbol{\nabla}^*$ je prevrátená hodnota škály pre polohový vektor $\boldsymbol{x}^*$, čiže β^*. Využitím škál definovaných vyššie prevedieme Darcyho rovnicu (1.1c) do tvaru

$$V^*\boldsymbol{u} = -\frac{\kappa_0^*\kappa(w)}{\mu^*}\beta^*\boldsymbol{\nabla}[p^*]p,$$

kde funkcia permeability $\kappa^*(w^*) = \kappa_0^*\kappa(w)$ a konštanta κ_0^* je charakteristická permeabilita. Z tejto rovnice potom vyplýva, že pre tlak možno zvoliť škálu

$$[p^*] = \frac{\mu^* V^*}{\kappa_0^*\beta^*}. \tag{1.16}$$

Následne zbezrozmerníme rovnice reaktívneho prúdenia (1.1). Aplikáciou vzťahov (1.15c-e) a (1.16) a definičných vzťahov pre α a β^* dostávame výsledné bezrozmerné rovnice pre premenné $c(\boldsymbol{x},t)$, $w(\boldsymbol{x},t)$, $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t)$ a $p(\boldsymbol{x},t)$ vo forme

$$\alpha\left[\phi\frac{\partial c}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\cdot(\boldsymbol{u}c)\right] = -cw, \tag{1.17a}$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -cw, \tag{1.17b}$$

$$\boldsymbol{u} = -\kappa(w)\boldsymbol{\nabla}p, \tag{1.17c}$$

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u} = 0. \tag{1.17d}$$

Podobným spôsobom dostávame aj príslušné bezrozmerné hraničné podmienky

$$c \to 1, \quad w \to 0 \quad \text{pre} \quad x \to -\infty, \tag{1.18a,b}$$

$$c \to 0, \quad w \to 1 \quad \text{pre} \quad x \to \infty. \tag{1.18c,d}$$

V podkapitole 1.2 sme uviedli základný stav pre model reaktívneho prúdenia, pre ktorý sme odvodili explicitné riešenie. Toto riešenie prevedieme do bezrozmernej formy využitím vyššie uvedených škál, ktoré rovnako platia aj pre základný stav. Na základe škál (1.15a,b) môžeme zbezrozmerniť podobnostnú premennú ξ^* v tvare

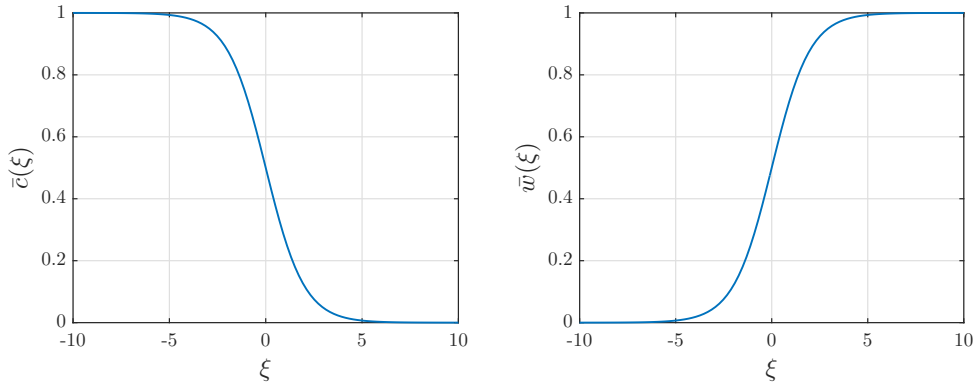
$$\xi^*(x^*,t^*) = \frac{1}{\beta^*}(x-t) = \frac{1}{\beta^*}\xi(x,t), \tag{1.19}$$

z čoho po dosadení do (1.14a) a (1.14b) a aplikácii škál pre $\bar{c}^*$ a $\bar{w}^*$ získavame bezrozmerné riešenia pre základný stav v tvare

$$\bar{c}(\xi) = \frac{1}{1+\mathrm{e}^{\xi}}, \tag{1.20a}$$

$$\bar{w}(\xi) = \frac{\mathrm{e}^{\xi}}{1+\mathrm{e}^{\xi}}. \tag{1.20b}$$

Môžeme si všimnúť, že výsledné profily $\bar{c}$ a $\bar{w}$ už nezávisia od predpísaných hodnôt $c^*_{-\infty}$ a w^*_{∞}. Na obrázku 1.1 sú zobrazené priebehy týchto profilov, ktoré nadobúdajú hodnoty z intervalu $(0, 1)$ a zodpovedajú bezrozmerným hraničným podmienkam (1.18), ktoré sú zhodné s bezrozmernými hraničnými podmienkami základného stavu.



Obr. 1.1: Priebeh profilov $\bar{c}(\xi)$ a $\bar{w}(\xi)$ na intervale $[-10, 10]$ pre základný stav bezrozmerného modelu reaktívneho prúdenia (1.17) s hraničnými podmienkami (1.18).

Jednosmerný homogénny tok definovaný vzťahom (1.3) prevedieme do bezrozmerného tvaru využitím škály pre objemový tok a vzťahu (1.11):

$$\bar{\boldsymbol{u}} = (\phi + \alpha^{-1}, 0)^T. \tag{1.21}$$

Pomocou tlakovej škály (1.16) vyjadríme tlak základného stavu

$$\bar{p}(\xi) = \bar{p}_{-\infty} - (\phi + \alpha^{-1}) \int_{-\infty}^{\xi} \frac{\mathrm{d}s}{\kappa(\bar{w}(s))}. \tag{1.22}$$

Zbezrozmernením systému (1.1) s príslušnými hraničnými podmienkami, resp. systému (1.7a) a (1.7b) pre základný stav sa eliminovali z modelu reaktívneho prúdenia parametre k^*, ν, μ^*, $c^*_{-\infty}$, w^*_{∞} a U^*.

1.4 Permeabilita

V modeli reaktívneho prúdenia uvažujeme 2 typické vzťahy pre závislosť permeability od rozpustiteľnej látky podľa [8]. Ako prvý definujeme konštantný vzťah funkcie permeability

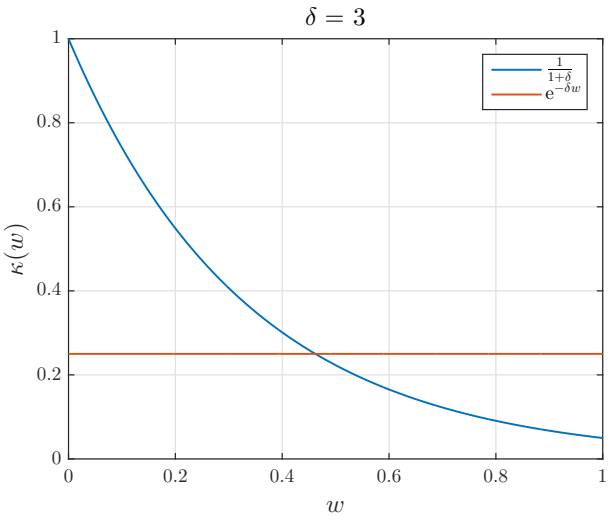
$$\kappa(w) = \kappa_\delta = \frac{1}{1+\delta}, \tag{1.23}$$

kde parameter $\delta > 0$.

V druhom prípade zoberieme pre funkciu permeability exponenciálny vzťah v tvare

$$\kappa(w) = \mathrm{e}^{-\delta w}, \tag{1.24}$$

kde koncentrácia rozpustiteľnej prímesi $w \in (0, 1)$ a parameter $\delta > 0$ vyjadruje rýchlosť poklesu permeability κ vzhľadom na w. Vzťah (1.24) je klesajúcou funkciou premennej w. Inak povedané, čím viac sa znižuje koncentrácia rozpustiteľnej prímesi, t. j. rozpúšťanie prímesi sa zvyšuje, tak tým viac permeabilita exponenciálne rastie. Všimnime si, že exponenciálny vzťah (1.24), ktorý nadobúda pre $w \to 0$ približne hodnotu 1 a pre $w \to 1$ približne hodnotu $\mathrm{e}^{-\delta}$, má hodnoty väčšie alebo rovné pre $w \in (0, \ln(1+\delta)^{1/\delta}]$ a menšie pre $w \in (\ln(1+\delta)^{1/\delta}, 1)$ oproti uvedenému konštantnému vzťahu (1.23).



Obr. 1.2: Porovnanie priebehu funkcie permeability κ pre konštantný vzťah (1.23) a exponenciálny (1.24) na intervale $(0, 1)$ pre $\delta = 3$.

1.5 Poruchy základného stavu

V tejto časti odvodíme rovnice pre linearizované poruchy základného stavu reaktívneho prúdenia ako v [7, 8]. Vo všeobecnosti poruchy predstavujú odchýlky $\hat{f}(\xi, y, t)$ od základného stavu, ktoré okrem premennej ξ závisia aj od polohovej premennej y a času t.[4] Tieto poruchy profilov laminárneho prúdenia (1.20)-(1.22) musia tiež spĺňať rovnice modelu reaktívneho prúdenia (1.17) a (1.18).

[4] Symbolom $\hat{}$ sú označené veličiny charakterizujúce poruchu základného stavu.

Uvažujme riešenie bezrozmerného modelu (1.17), ktoré je superpozíciou stacionárneho riešenia pre základný stav (premenné $\bar{f}$) a poruchy základného stavu (premenné $\epsilon\hat{f}$) v tvare

$$c = \bar{c}(\xi) + \epsilon\hat{c}(\xi, y, t), \tag{1.25a}$$

$$w = \bar{w}(\xi) + \epsilon\hat{w}(\xi, y, t), \tag{1.25b}$$

$$\boldsymbol{u} = \bar{\boldsymbol{u}}(\xi) + \epsilon\hat{\boldsymbol{u}}(\xi, y, t), \tag{1.25c}$$

$$p = \bar{p}(\xi) + \epsilon\hat{p}(\xi, y, t), \tag{1.25d}$$

kde $0 < \epsilon \ll 1$ meria amplitúdu poruchy. Vzťah (1.25c) môžeme ekvivalentne zapísať po zložkách

$$u = \bar{u}(\xi) + \epsilon\hat{u}(\xi, y, t),$$

$$v = \bar{v}(\xi) + \epsilon\hat{v}(\xi, y, t).$$

Dosadením vzťahov (1.25a-c) do reakčných rovníc (1.17a) a (1.17b) a vzťahov (1.25c) a (1.25d) do Darcyho rovníc (1.17c) a (1.17d) dostávame systém

$$\alpha\left[\phi\frac{\partial}{\partial t}(\bar{c} + \epsilon\hat{c}) + \boldsymbol{\nabla}\cdot(\bar{\boldsymbol{u}} + \epsilon\hat{\boldsymbol{u}})(\bar{c} + \epsilon\hat{c})\right] = -(\bar{c} + \epsilon\hat{c})(\bar{w} + \epsilon\hat{w}), \tag{1.26a}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{w} + \epsilon\hat{w}) = -(\bar{c} + \epsilon\hat{c})(\bar{w} + \epsilon\hat{w}), \tag{1.26b}$$

$$\bar{\boldsymbol{u}} + \epsilon\hat{\boldsymbol{u}} = -\kappa(\bar{w} + \epsilon\hat{w})\boldsymbol{\nabla}(\bar{p} + \epsilon\hat{p}), \tag{1.26c}$$

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot(\bar{\boldsymbol{u}} + \epsilon\hat{\boldsymbol{u}}) = 0. \tag{1.26d}$$

Požadované vzťahy pre linearizované poruchy $\hat{c}$ a $\hat{w}$ získame linearizáciou nelineárnych rovníc (1.26a) a (1.26b). Pre rovnicu (1.26a) po úprave a linearizácii platí

$$\alpha\left[\phi\frac{\partial\bar{c}}{\partial t} + \epsilon\frac{\partial\hat{c}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\cdot\bar{\boldsymbol{u}}\bar{c} + \epsilon\boldsymbol{\nabla}\cdot(\bar{\boldsymbol{u}}\hat{c} + \hat{\boldsymbol{u}}\bar{c}) + O(\epsilon^2)\right] = -[\bar{c}\bar{w} + \epsilon(\bar{c}\hat{w} + \hat{c}\bar{w}) + O(\epsilon^2)],$$

kde odčítaním rovnice pre základný stav, zanedbaním členov $O(\epsilon^2)$ a vydelením ϵ máme

$$\alpha\left[\phi\frac{\partial\hat{c}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\cdot(\bar{\boldsymbol{u}}\hat{c} + \hat{\boldsymbol{u}}\bar{c})\right] = -\bar{c}\hat{w} - \hat{c}\bar{w}. \tag{1.27}$$

Z identity (1.4) a rovnice (1.26d) zároveň vyplýva

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot(\bar{\boldsymbol{u}}\hat{c} + \hat{\boldsymbol{u}}\bar{c}) = \bar{\boldsymbol{u}}\cdot(\boldsymbol{\nabla}\hat{c}) + \hat{\boldsymbol{u}}\cdot(\boldsymbol{\nabla}\bar{c}),$$

čo využijeme v rovnici (1.27), ktorá je potom ekvivalentná

$$\alpha\left[\phi\left(\frac{\partial\hat{c}}{\partial t}+\frac{\partial\hat{c}}{\partial\xi}\frac{\partial\xi}{\partial t}\right)+\bar{u}\frac{\partial\hat{c}}{\partial\xi}\frac{\partial\xi}{\partial x}+\bar{v}\frac{\partial\hat{c}}{\partial y}+\hat{u}\frac{\mathrm{d}\bar{c}}{\mathrm{d}\xi}\frac{\partial\xi}{\partial x}+\hat{v}\frac{\mathrm{d}\bar{c}}{\mathrm{d}y}\right]=-\bar{c}\hat{w}-\hat{c}\bar{w}.$$

Využitím prepokladu (1.3) o jednosmernom homogénnom toku pre základný stav a ďalšími úpravami získavame pre poruchu $\hat{c}$ rovnicu

$$\alpha\left[\phi\left(\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\partial}{\partial\xi}\right)\hat{c}+\bar{u}\frac{\partial\hat{c}}{\partial\xi}+\hat{u}\frac{\mathrm{d}\bar{c}}{\mathrm{d}\xi}\right]=-\bar{c}\hat{w}-\hat{c}\bar{w}. \tag{1.28}$$

Analogicky linearizáciou rovnice (1.26b) odvodíme pre poruchu $\hat{w}$ rovnicu

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\partial}{\partial\xi}\right)\hat{w}=-\bar{c}\hat{w}-\hat{c}\bar{w}. \tag{1.29}$$

Ďalej zo vzťahu (1.26c) pre x-zložku platí

$$\bar{u}+\epsilon\hat{u}=-\kappa(\bar{w}+\epsilon\hat{w})\frac{\partial}{\partial\xi}(\bar{p}+\epsilon\hat{p}). \tag{1.30}$$

Po linearizácii funkcie permeability $\kappa(\bar{w}+\epsilon\hat{w})$ využitím Taylorovho rozvoja na okolí funkcie $\bar{w}$ a úprave rovnice (1.30) dostávame

$$\bar{u}+\epsilon\hat{u}=-\left(\kappa(\bar{w})+\epsilon\left.\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}w}\right|_{w=\bar{w}}\hat{w}+O(\epsilon^2)\right)\left(\frac{\mathrm{d}\bar{p}}{\mathrm{d}\xi}+\epsilon\frac{\partial\hat{p}}{\partial\xi}\right),$$

čo je ekvivalentné

$$\bar{u}+\epsilon\hat{u}=-\left[\kappa(\bar{w})\frac{\mathrm{d}\bar{p}}{\mathrm{d}\xi}+\epsilon\left(\kappa(\bar{w})\frac{\partial\hat{p}}{\partial\xi}+\left.\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}w}\right|_{w=\bar{w}}\frac{\mathrm{d}\bar{p}}{\mathrm{d}\xi}\hat{w}\right)+O(\epsilon^2)\right]. \tag{1.31}$$

Odčítaním rovnice pre základný stav od rovnice (1.31), zanedbaním členov $O(\epsilon^2)$ a vydelením ϵ získavame rovnicu v tvare

$$\hat{u}=-\left(\kappa(\bar{w})\frac{\partial\hat{p}}{\partial\xi}+\left.\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}w}\right|_{w=\bar{w}}\frac{\mathrm{d}\bar{p}}{\mathrm{d}\xi}\hat{w}\right). \tag{1.32}$$

Analogicky zo vzťahu (1.26c) pre y-zložku odvodíme rovnicu v tvare

$$\hat{v}=-\kappa(\bar{w})\frac{\partial\hat{p}}{\partial y}. \tag{1.33}$$

Rovnicu (1.26d) prevedieme na tvar

$$\frac{\partial\bar{u}}{\partial\xi}\frac{\partial\xi}{\partial x}+\epsilon\frac{\partial\hat{u}}{\partial\xi}\frac{\partial\xi}{\partial x}+\frac{\partial\bar{v}}{\partial y}+\epsilon\frac{\partial\hat{v}}{\partial y}=0,$$

pričom odčítaním rovnice pre základný stav a vydelením ϵ dostávame rovnosť

$$\frac{\partial\hat{u}}{\partial\xi}+\frac{\partial\hat{v}}{\partial y}=0. \tag{1.34}$$

Následne z vyjadrených vzťahov (1.32)-(1.34) eliminujeme funkcie $\hat{v}$ a $\hat{p}$. Dosadením vzťahu pre parciálnu deriváciu $\hat{v}$ podľa premennej y z identity (1.33) do rovnosti (1.34) platí

$$-\frac{\partial \hat{u}}{\partial \xi} = -\kappa(\bar{w})\frac{\partial^2 \hat{p}}{\partial y^2}. \tag{1.35}$$

Po zderivovaní rovnice (1.35) podľa premennej ξ dostávame

$$-\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\frac{1}{\kappa(\bar{w})}\frac{\partial \bar{u}}{\partial \xi}\right) = -\frac{\partial^2}{\partial y^2}\left(\frac{\partial \hat{p}}{\partial \xi}\right),$$

čo po dosadení do vzťahu pre druhú parciálnu deriváciu rovnice (1.32) podľa premennej y nám dáva rovnicu

$$\kappa(\bar{w})\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\frac{1}{\kappa(\bar{w})}\frac{\partial \hat{u}}{\partial \xi}\right) + \frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial y^2} = -\left.\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}w}\right|_{w=\bar{w}}\frac{\mathrm{d}\bar{p}}{\mathrm{d}\xi}\frac{\partial^2 \hat{w}}{\partial y^2}, \tag{1.36}$$

kde deriváciu $\mathrm{d}\bar{p}/\mathrm{d}\xi$ vyjadríme zo vzťahu (1.22) pre tlak základného stavu.

Poruchové premenné $\hat{c}$ a $\hat{w}$ spĺňajú nasledovné hraničné podmienky, ktoré dostávame z podmienok (1.18) a z tvaru riešení (1.25a) a (1.25b):

$$\hat{c} \to 0, \quad \hat{w} \to 0 \quad \text{pre} \quad \xi \to -\infty, \tag{1.37a,b}$$

$$\hat{c} \to 0, \quad \hat{w} \to 0 \quad \text{pre} \quad \xi \to \infty. \tag{1.37c,d}$$

1.6 Normálne módy porúch

Predpokladajme, že poruchy sa dajú rozložiť na nezávislé komponenty a módy meniace sa v čase t [4, 8]. Potom rozklad poruchovej funkcie $\hat{f}(\xi, y, t)$ môžeme uvažovať v tvare

$$\hat{f}(\xi, y, t) = \tilde{f}(\xi)\mathrm{e}^{\lambda t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}ky} + \text{c.c.}, \tag{1.38}$$

kde funkcia $\tilde{f}(\xi) \in \mathbb{C}$ reprezentuje amplitúdovú funkciu a funkcia $\mathrm{e}^{\lambda t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}ky} \in \mathbb{C}$ komplexnú fázu poruchy $\hat{f}(\xi, y, t)$.[5] Pre parameter $\lambda \in \mathbb{C}$ platí $\lambda = \lambda_R + \mathrm{i}\lambda_I$, kde reálna časť λ_R parametra λ je časová rýchlosť rastu ($\lambda_R > 0$) alebo poklesu ($\lambda_R < 0$) poruchy a imaginárna časť λ_I parametra λ vyjadruje frekvenciu poruchy. Parameter k je vlnové číslo v smere y a c.c. (complex conjugate) predstavuje komplexne združenú funkciu k funkcii $\tilde{f}(\xi)\mathrm{e}^{\lambda t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}ky}$. Všimnime si, že obor hodnôt poruchovej funkcie $\hat{f}(\xi, y, t)$ je vždy

[5] Symbolom $\tilde{}$ sú označené veličiny charakterizujúce amplitúdu poruchy základného stavu.

z reálnych čísel, keďže v rozklade (1.38) sa k uvedenej funkcii pripočítava jej komplexne združená funkcia.

Využitím rozkladu poruchových funkcií na normálne módy sformulujeme problém pre amplitúdové funkcie linearizovaných porúch základného stavu. Dosadením príslušných vzťahov pre poruchové funkcie $\hat{c}$, $\hat{w}$ a $\hat{u}$ definované predpisom (1.38) do rovníc (1.28), (1.29) a (1.36), odčítaním rovníc pre časť c.c. a vydelením $\mathrm{e}^{\lambda t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}ky}$ získavame systém

$$\alpha[\phi(\lambda - D)\tilde{c} + \bar{u}D\tilde{c} + \tilde{u}D\bar{c}] = -\bar{c}\tilde{w} - \tilde{c}\bar{w}, \tag{1.39a}$$

$$(\lambda - D)\tilde{w} = -\bar{c}\tilde{w} - \tilde{c}\bar{w}, \tag{1.39b}$$

$$\kappa(\bar{w})D\left(\frac{1}{\kappa(\bar{w})}D\tilde{u}\right) - k^2\tilde{u} = -k^2\bar{u}\frac{1}{\kappa(\bar{w})}\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}w}\bigg|_{w=\bar{w}}\tilde{w}, \tag{1.39c}$$

kde operátor derivácie $D \equiv \mathrm{d}/\mathrm{d}\xi$. Premenné $\tilde{c}$ a $\tilde{w}$ spĺňajú hraničné podmienky

$$\tilde{c} \to 0, \quad \tilde{w} \to 0 \quad \text{pre} \quad \xi \to -\infty, \tag{1.40a,b}$$

$$\tilde{c} \to 0, \quad \tilde{w} \to 0 \quad \text{pre} \quad \xi \to \infty. \tag{1.40c,d}$$

Odvodili sme systém rovníc (1.39) s podmienkami (1.40) pre amplitúdové funkcie $\tilde{c}$, $\tilde{w}$ a $\tilde{u}$ a parametre λ a k. Z riešenia tohto problému možno popísať lineárnu stabilitu modelu reaktívneho prúdenia (1.1) a (1.2). Uvedený parameter λ ovplyvňuje časovú lineárnu stabilitu a parameter k polohovú lineárnu stabilitu vzhľadom na smer y. Z pohľadu stability reaktívneho prúdenia nás zaujíma časová stabilita porúch, ktorá sa dá zistiť analýzou normálnych módov porúch vzhľadom na čas t. Pre $\lambda_R > 0$ sa ľubovoľná porucha základného stavu s rastúcim časom exponenciálne zväčšuje, a to vedie k časovo nestabilnému prúdeniu; pre $\lambda_R = 0$ sa porucha s rastúcim časom nemení, čiže ide o neutrálne stabilné prúdenie; a pre $\lambda_R < 0$ ľubovoľná porucha základného stavu postupom času zaniká, a teda reaktívne prúdenie je stabilné.

2 Čebyševova spektrálna kolokačná metóda

Použitím Čebyševovej spektrálnej kolokačnej metódy [13] budeme v tejto kapitole riešiť získaný systém rovníc (1.39) s hraničnými podmienkami (1.40) pre amplitúdové funkcie $\tilde{c}$, $\tilde{w}$ a $\tilde{u}$ a parametre λ a k. Základnou myšlienkou tohto numerického prístupu je zúženie definovanej nekonečnej oblasti na ohraničený interval, diskretizácia funkcií na množine Čebyševových bodov a aproximácia derivácií funkcií pomocou Čebyševových diferenčných matíc. Pre fixované hodnoty parametra k tak prevedieme uvedený systém rovníc na zovšeobecnený vlastnohodnotový problém, ktorého riešenie zodpovedá príslušnému numerickému riešeniu problému lineárnej stability (1.39) a (1.40). Potom vyriešime zovšeobecnený vlastnohodnotový problém alternatívnym prístupom pomocou systému Matlab/Chebfun.

2.1 Čebyševove body a diferenčné matice

Uvažujme množinu $n+1$ Čebyševových bodov $\zeta_0, \zeta_1, \ldots, \zeta_n$ na intervale $[-1, 1]$ definovanú vzťahom

$$\zeta_j = \cos\left(\frac{j\pi}{n}\right), \qquad j = 0, 1, \ldots, n. \tag{2.1}$$

Názorne vyjadríme niekoľko Čebyševových bodov využitím (2.1). Pre $n = 1$ dostávame 2 Čebyševove body $\zeta_0 = 1$ a $\zeta_1 = -1$. Pre $n = 2$ množina 3 Čebyševových bodov je $\zeta_0 = 1$, $\zeta_1 = 0$ a $\zeta_2 = -1$.

Uvažujme ďalej interpolačný polynóm p stupňa n, ktorý interpoluje množinu funkčných hodnôt $\{f_j\}_{j=0}^n$ na množine Čebyševových bodov $\zeta_0, \zeta_1, \ldots, \zeta_n$, t. j. $p(\zeta_j) = f_j$ pre $j = 0, 1, \ldots, n$. Ak jeho l-tú deriváciu v bode ζ_j označíme $p^{(l)}(\xi_j) = f_j^{(l)}$ pre každé j a $l = 1, 2, \ldots, m$, potom platí

$$\boldsymbol{f}^{(l)} = D^{(l)}\boldsymbol{f}, \tag{2.2}$$

kde vektor $\boldsymbol{f} = (f_0, f_1, \ldots, f_n)^T$ a $\boldsymbol{f}^{(l)} = \left(f_0^{(l)}, f_1^{(l)}, \ldots, f_n^{(l)}\right)^T$ a matica $D^{(l)}$ je $(n+1) \times (n+1)$ Čebyševova diferenčná matica l-tého rádu.

O štruktúre Čebyševovej diferenčnej matice prvého rádu $D^{(1)}$ hovorí nasledujúca veta, ktorú preberáme z [13].

Veta 2.1. *Nech pre každé $n \geq 1$ sú riadky a stĺpce Čebyševovej spektrálnej diferenčnej matice prvého rádu $D^{(1)}$ rozmeru $(n+1) \times (n+1)$ označené od 0 po n. Potom zložky*

tejto matice sú

$$D_{00}^{(1)} = \frac{2n^2+1}{6}, \qquad D_{nn}^{(1)} = -\frac{2n^2+1}{6}, \tag{2.3a,b}$$

$$D_{jj}^{(1)} = -\frac{\zeta_j}{2(1-\zeta_j^2)}, \qquad j = 1, 2, \ldots, n-1, \tag{2.3c}$$

$$D_{ij}^{(1)} = \frac{c_i}{c_j}\frac{(-1)^{i+j}}{(\zeta_i - \zeta_j)}, \qquad i \neq j, \quad i, j = 0, 1, \ldots, n, \tag{2.3d}$$

kde

$$c_i = \begin{cases} 2, & \text{ak } i = 0 \text{ alebo } i = n, \\ 1, & \text{inak.} \end{cases}$$

Dôkaz. Za predpokladu (2.2) Čebyševovu diferenčnú maticu prvého rádu možno skonštruovať využitím Lagrangeovho interpolačného polynómu stupňa n na množine $n+1$ Čebyševových bodov, ktorý má tvar

$$p_n(\zeta) = \sum_{j=0}^{n} \prod_{\substack{k=0 \\ k\neq j}}^{n} \frac{\zeta - \zeta_k}{\zeta_j - \zeta_k} f_j. \tag{2.4}$$

Potom zložky tejto matice v i-tom riadku a j-tom stĺpci sú

$$D_{ij}^{(1)} = \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\zeta} \left(\prod_{\substack{k=0 \\ k\neq j}}^{n} \frac{\zeta - \zeta_k}{\zeta_j - \zeta_k} \right) \right]_{\zeta=\zeta_i}, \qquad i, j = 0, 1, \ldots, n. \tag{2.5}$$

Pre nediagonálne zložky po úprave vzťahu (2.5) (podrobnejšie v [9]) dostávame

$$D_{ij}^{(1)} = \frac{\prod\limits_{\substack{k=0 \\ k\neq i,j}}^{n} (\zeta_i - \zeta_k)}{\prod\limits_{\substack{k=0 \\ k\neq j}}^{n} (\zeta_j - \zeta_k)} = \frac{\prod\limits_{\substack{k=0 \\ k\neq i}}^{n} (\zeta_i - \zeta_k)}{\prod\limits_{\substack{k=0 \\ k\neq j}}^{n} (\zeta_j - \zeta_k)(\zeta_i - \zeta_j)}, \qquad i \neq j, \quad i, j = 0, 1, \ldots, n, \tag{2.6}$$

čo je ekvivalentné vzťahu

$$D_{ij}^{(1)} = \lim_{\substack{x\to\zeta_i \\ y\to\zeta_j}} \frac{s_n(x)}{x - \zeta_i} \frac{y - \zeta_j}{s_n(y)} \frac{1}{x - y}, \tag{2.7}$$

kde

$$s_n(x) = \prod_{k=0}^{n} (x - \zeta_k). \tag{2.8}$$

Korene polynómu s_n sú z množiny $n+1$ Čebyševových bodov, čo sú extremálne body Čebyševovho polynómu T_n, t. j. korene derivácie Čebyševovho polynómu stupňa n okrem krajných bodov ± 1 (viď Príloha A). Preto môžeme polynóm s_n uvažovať podľa [15]

vo forme

$$s_n(x) = (1 - x^2)\frac{\mathrm{d}T_n(x)}{\mathrm{d}x}. \tag{2.9}$$

Využitím vzťahu (2.9) a l'Hospitalovho pravidla platí

$$\lim_{x\to\zeta_i} \frac{s_n(x)}{x - \zeta_i} = \lim_{x\to\zeta_i} -x\frac{\mathrm{d}T_n(x)}{\mathrm{d}x} - n^2 T_n(x). \tag{2.10}$$

Pre Čebyševove body ζ_i, kde $i = 1, 2, \ldots, n-1$, je hodnota limity (2.10) rovná $-(-1)^i n^2$ pre každé i. Pre ζ_0 a ζ_n dostávame $-2n^2$, resp. $-2(-1)^n n^2$. Keďže platí vlastnosť, že limita súčinu je súčin limít, vzťah (2.7) možno upraviť na (2.3d).

Diagonálne zložky matice $D^{(1)}$ môžeme zo vzťahu (2.5) vyjadriť v tvare

$$D^{(1)}_{jj} = \sum_{\substack{k=0 \\ k\neq j}}^{n} \frac{1}{\zeta_j - \zeta_k}, \qquad j = 0, 1, \ldots, n. \tag{2.11}$$

Po integrovaní a úprave vzťahu (2.11) dostávame

$$D^{(1)}_{jj} = \lim_{x\to\zeta_j} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\ln\left(\frac{s_n(x)}{x - \zeta_j}\right)\right] \tag{2.12}$$

a ďalej po úprave

$$\lim_{x\to\zeta_j} \frac{x - \zeta_j}{(1 - x^2)\dfrac{\mathrm{d}T_n(x)}{\mathrm{d}x}} \times \frac{1}{(x - \zeta_j)^2}\left[(x - \zeta_j)\left(-2x\,\frac{\mathrm{d}T_n(x)}{\mathrm{d}x} + (1 - x^2)\frac{\mathrm{d}^2T_n(x)}{\mathrm{d}x^2}\right) - (1 - x^2)\frac{\mathrm{d}T_n(x)}{\mathrm{d}x}\right],$$

kde $j = 0, 1, \ldots, n$.

Pre vyššie uvedenú limitu v Čebyševových bodoch ζ_j, kde $j = 1, 2, \ldots, n-1$, aplikovaním l'Hospitalovho pravidla a vzťahu pre deriváciu druhého a tretieho rádu Čebyševovho polynómu (viď Príloha A) dostávame

$$\lim_{x\to\zeta_j} \frac{x - \zeta_j}{(1 - x^2)\dfrac{\mathrm{d}T_n(x)}{\mathrm{d}x}} = -\frac{(-1)^j}{n^2} \tag{2.13}$$

a

$$\lim_{x\to\zeta_j} \frac{1}{(x - \zeta_j)^2}\left[(x - \zeta_j)\left(-2x\,\frac{\mathrm{d}T_n(x)}{\mathrm{d}x} + (1 - x^2)\frac{\mathrm{d}^2T_n(x)}{\mathrm{d}x^2}\right) - (1 - x^2)\frac{\mathrm{d}T_n(x)}{\mathrm{d}x}\right] = \frac{(-1)^j n^2}{2}\frac{\zeta_j}{1 - \zeta_j^2}, \tag{2.14}$$

pre $j = 1, 2, \ldots, n-1$. Zo súčinu limít (2.13) a (2.14) vyplýva uvedený vzťah (2.3c).

Analogicky limita (2.12) v Čebyševovom bode ζ_0 je zložená zo súčinu dvoch limít

$$\lim_{x\to\zeta_0} \frac{x-\zeta_j}{(1-x^2)\dfrac{\mathrm{d}T_n(x)}{\mathrm{d}x}} = -\frac{1}{2n^2} \tag{2.15}$$

a

$$\lim_{x\to\zeta_0} \frac{1}{(x-\zeta_j)^2}\left[(x-\zeta_j)\left(-2x\,\frac{\mathrm{d}T_n(x)}{\mathrm{d}x} + (1-x^2)\frac{\mathrm{d}^2T_n(x)}{\mathrm{d}x^2}\right) - (1-x^2)\frac{\mathrm{d}T_n(x)}{\mathrm{d}x}\right]$$
$$= -\frac{(2n^2+1)n^2}{3}. \tag{2.16}$$

Rovnakým postupom dopočítame aj limitu (2.12) v bode ζ_n, čím získame explicitný tvar vzťahov (2.3a,b). □

Poznamenajme, že z využitia interpolačného polynómu v Lagrangeovom tvare pri konštrukcii Čebyševovej diferenčnej matice vyplýva, že Čebyševova diferenčná matica l-tého rádu $D^{(l)}$ je l-tá mocnina Čebyševovej diferenčnej matice prvého rádu $D^{(1)}$, t. j. $D^{(l)} = \left(D^{(1)}\right)^l$ pre každé l.

Na základe Vety 2.1 môžeme skonštruovať 2×2 Čebyševovu diferenčnú maticu prvého rádu

$$D^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

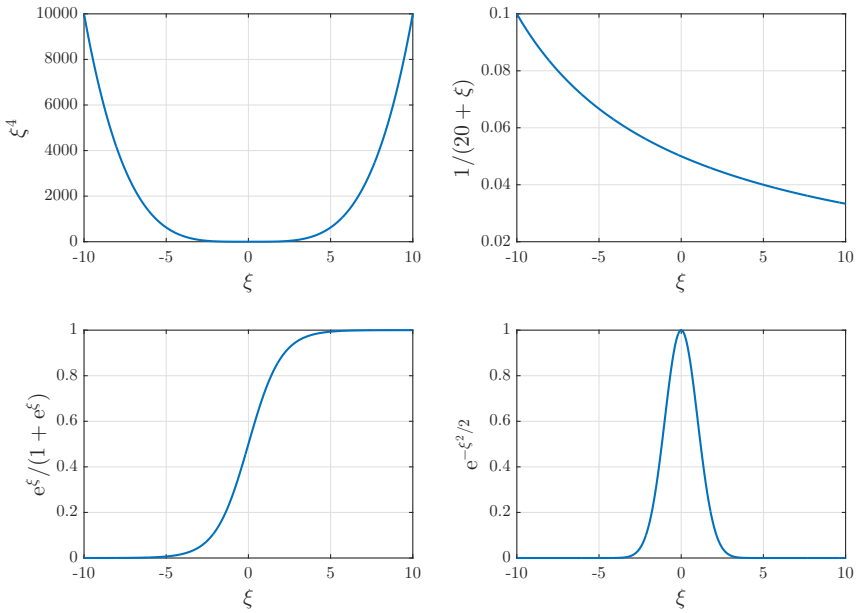
Pre $n = 2$ má 3×3 Čebyševova diferenčná matica prvého rádu tvar

$$D^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & -2 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & 2 & -\frac{3}{2} \end{pmatrix}.$$

2.2 Presnosť Čebyševovej derivácie

Na získanie aproximácie derivácie ľubovoľnej funkcie definovanej na množine Čebyševových bodov sa používajú Čebyševove diferenčné matice ako vo vzťahu (2.2). Táto metóda sa vo väčšine prípadov vyznačuje pomerne vysokou presnosťou, niekedy na úrovni počítačovej presnosti, t. j. približne $\mathcal{O}(10^{-16})$. Presnosť závisí aj od funkcie, pre ktorú chceme dostať jej numerickú deriváciu. Ak ide o funkciu aproximovanú Lagrangeovým

interpolačným polynómom na množine Čebyševových bodov, tak aj jej numerická derivácia je porovnateľne presná, keďže Čebyševova diferenčná matica je vytvorená na základe tohto polynómu. Na nasledujúcich vybraných funkciách porovnáme presnosť Čebyševovej spektrálnej derivácie.

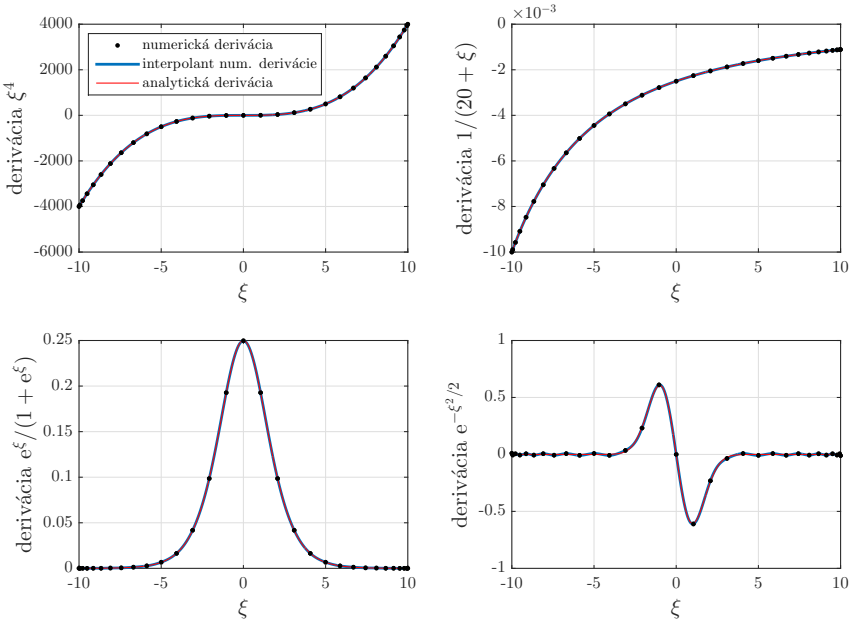


Obr. 2.1: Priebeh funkcií ξ^4, $1/(20+\xi)$, $e^{\xi}/(1+e^{\xi})$ a $e^{-\xi^2/2}$ na intervale $[-10, 10]$.

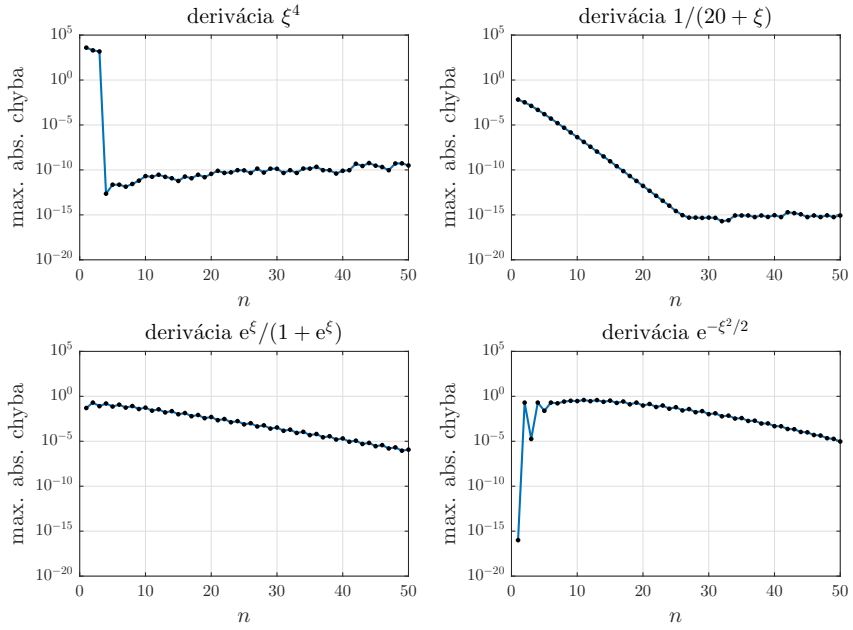
Uvažujme funkcie ξ^4, $1/(20+\xi)$, $e^{\xi}/(1+e^{\xi})$ a $e^{-\xi^2/2}$ na intervale $[-10, 10]$, pre ktoré vyjadríme aproximácie ich derivácií na množine Čebyševových bodov. Obrázok 2.2 znázorňuje numerické derivácie uvedených funkcií na množine 31 Čebyševových bodov v porovnaní s ich presnými analytickými deriváciami. Môžeme si všimnúť, že vo všetkých štyroch prípadoch Čebyševove spektrálne derivácie aproximujú skutočné hodnoty derivácií v jednotlivých kolokačných bodoch s vysokou presnosťou.

Pre tie isté funkcie je na obrázku 2.3 závislosť maximálnych absolútnych odchýlok numerických derivácií a presných hodnôt na množine $n+1$ Čebyševových bodov od spektrálneho rozlíšenia n. Monóm ξ^4 má chybu v numerickej derivácii výrazne menšiu práve od $n = 4$, čo je dôsledkom konštrukcie Čebyševovej diferenčnej matice. Numerická derivácia funkcie $1/(20+\xi)$ dosahuje počítačovú presnosť približne od $n = 27$. Konvergencia Čebyševových spektrálnych derivácií v prípade funkcií $e^{\xi}/(1+e^{\xi})$ a $e^{-\xi^2/2}$ je pomerne pomalá, pre $n = 50$ sa chyba v ich numerických deriváciach pohybuje

na úrovni $\mathcal{O}(10^{-5})$.



Obr. 2.2: Porovnanie Čebyševových spektrálnych a analytických derivácií funkcií ξ^4, $1/(20+\xi)$, $e^{\xi}/(1+e^{\xi})$ a $e^{-\xi^2/2}$ na intervale $[-10, 10]$ pre spektrálne rozlíšenie $n = 30$.



Obr. 2.3: Hodnoty max. abs. chýb Čebyševových spektrálnych derivácií funkcií ξ^4, $1/(20+\xi)$, $e^{\xi}/(1+e^{\xi})$ a $e^{-\xi^2/2}$ na intervale $[-10, 10]$ v závislosti od spektrálneho rozlíšenia n.

2.3 Implementácia

Uvažujme diskretizáciu spojitej oblasti $\xi \in \mathbb{R}$ na množinu $n+1$ ľubovoľných kolokačných bodov $\xi_0, \xi_1, \ldots, \xi_n$ na intervale $[a, b]$ takých, že platí $a = \xi_0 < \xi_1 < \ldots < \xi_n = b$, kde $a, b \in \mathbb{R}$. Definujme diskretizované profily základného stavu $\bar{c}(\xi)$ a $\bar{w}(\xi)$ a amplitúdové funkcie $\tilde{c}(\xi)$, $\tilde{w}(\xi)$ a $\tilde{u}(\xi)$ na uvažovanej množine kolokačných bodov v tvare

$$\bar{\boldsymbol{c}} = (\bar{c}(\xi_0), \bar{c}(\xi_1), \ldots, \bar{c}(\xi_n))^T, \tag{2.17a}$$

$$\bar{\boldsymbol{w}} = (\bar{w}(\xi_0), \bar{w}(\xi_1), \ldots, \bar{w}(\xi_n))^T, \tag{2.17b}$$

$$\tilde{\boldsymbol{c}} = (\tilde{c}(\xi_0), \tilde{c}(\xi_1), \ldots, \tilde{c}(\xi_n))^T, \tag{2.17c}$$

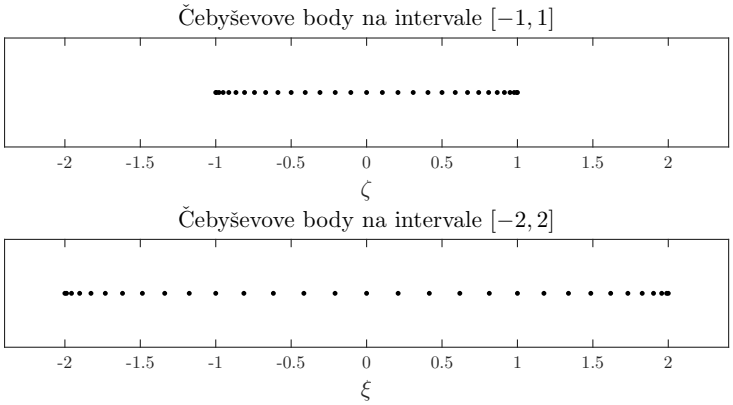
$$\tilde{\boldsymbol{w}} = (\tilde{w}(\xi_0), \tilde{w}(\xi_1), \ldots, \tilde{w}(\xi_n))^T, \tag{2.17d}$$

$$\tilde{\boldsymbol{u}} = (\tilde{u}(\xi_0), \tilde{u}(\xi_1), \ldots, \tilde{u}(\xi_n))^T. \tag{2.17e}$$

Poznamenajme, že interval $[a, b]$ by mal byť dostatočne široký, keďže sme zúžili nekonečnú oblasť ξ na množinu kolokačných bodov z ohraničeného intervalu $[a, b]$.

Za množinu kolokačných bodov $\xi_0, \xi_1, \ldots, \xi_n$ zoberieme Čebyševove body $\zeta_0, \zeta_1, \ldots, \zeta_n$ dané predpisom (2.1) preškálované na interval $[a, b]$ pomocou vzťahu

$$\xi_j = \frac{b-a}{2}\zeta_j + \frac{a+b}{2}, \qquad j = 0, 1, \ldots, n. \tag{2.18}$$



Obr. 2.4: Porovnanie Čebyševových bodov na intervale $[-1, 1]$ a preškálovaných Čebyševových bodov na intervale $[-2, 2]$ pre $n = 30$.

Systém rovníc (1.39) ďalej prepíšeme na diskretizované rovnice na množine Čebyševových bodov ξ_j na intervale $[a, b]$ v tvare

$$\alpha(\bar{u} - \phi)\frac{\mathrm{d}\tilde{c}}{\mathrm{d}\xi}\bigg|_{\xi=\xi_j} + \bar{w}(\xi_j)\tilde{c}(\xi_j) + \bar{c}(\xi_j)\tilde{w}(\xi_j) + \alpha\frac{\mathrm{d}\bar{c}}{\mathrm{d}\xi}\bigg|_{\xi=\xi_j}\tilde{u}(\xi_j) = -\alpha\phi\lambda\tilde{c}(\xi_j), \tag{2.19a}$$

$$\bar{w}(\xi_j)\tilde{c}(\xi_j) - \left.\frac{\mathrm{d}\tilde{w}}{\mathrm{d}\xi}\right|_{\xi=\xi_j} + \bar{c}(\xi_j)\tilde{w}(\xi_j) = -\lambda\tilde{w}(\xi_j), \tag{2.19b}$$

$$\frac{k^2\bar{u}}{\kappa(\bar{w}(\xi_j))}\left.\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}w}\right|_{w=\bar{w}(\xi_j)}\tilde{w}(\xi_j) - \frac{1}{\kappa(\bar{w}(\xi_j))}\left.\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}w}\right|_{w=\bar{w}(\xi_j)}\left.\frac{\mathrm{d}\bar{w}}{\mathrm{d}\xi}\right|_{\xi=\xi_j}\left.\frac{\mathrm{d}\tilde{u}}{\mathrm{d}\xi}\right|_{\xi=\xi_j} + \left.\frac{\mathrm{d}^2\tilde{u}}{\mathrm{d}\xi^2}\right|_{\xi=\xi_j} - k^2\tilde{u}(\xi_j) = 0, \tag{2.19c}$$

kde $j = 0, 1, \ldots, n$ a príslušné hraničné podmienky v bodoch ξ_0 a ξ_n sú

$$\tilde{c}(\xi_0) = 0, \quad \tilde{w}(\xi_0) = 0, \tag{2.20a,b}$$

$$\tilde{c}(\xi_n) = 0, \quad \tilde{w}(\xi_n) = 0. \tag{2.20c,d}$$

Všimnime si, že odvodený diskretizovaný systém (2.19) a (2.20) pozostáva spolu z $3n+3$ rovníc o $3n-1$ neznámych premenných $\tilde{c}(\xi_1), \tilde{c}(\xi_2), \ldots, \tilde{c}(\xi_{n-1})$; $\tilde{w}(\xi_1), \tilde{w}(\xi_2), \ldots, \tilde{w}(\xi_{n-1})$; $\tilde{u}(\xi_0), \tilde{u}(\xi_1), \ldots, \tilde{u}(\xi_n)$ a 2 neznámych parametroch k a λ.

Diskretizované profily základného stavu a amplitúdové funkcie sú teraz definované na množine Čebyševových bodov na intervale $[a, b]$. Na základe vzťahu (2.18) pre funkciu ξ_j závislú od premennej ζ_j však tieto diskretizované profily a amplitúdové funkcie môžeme ekvivalentne definovať na množine Čebyševových bodov na intervale $[-1, 1]$ nasledovne:

$$\overline{C}(\zeta_j) = \bar{c}(\xi_j), \qquad \overline{W}(\zeta_j) = \bar{w}(\xi_j), \tag{2.21a,b}$$

$$\widetilde{C}(\zeta_j) = \tilde{c}(\xi_j), \qquad \widetilde{W}(\zeta_j) = \tilde{w}(\xi_j), \qquad \widetilde{U}(\zeta_j) = \tilde{u}(\xi_j), \tag{2.21c-e}$$

kde $j = 0, 1, \ldots, n$, ktorých vektorový zápis je

$$\overline{\boldsymbol{C}} = \left(\overline{C}(\zeta_0), \overline{C}(\zeta_1), \ldots, \overline{C}(\zeta_n)\right)^T, \tag{2.22a}$$

$$\overline{\boldsymbol{W}} = \left(\overline{W}(\zeta_0), \overline{W}(\zeta_1), \ldots, \overline{W}(\zeta_n)\right)^T, \tag{2.22b}$$

$$\widetilde{\boldsymbol{C}} = \left(\widetilde{C}(\zeta_0), \widetilde{C}(\zeta_1), \ldots, \widetilde{C}(\zeta_n)\right)^T, \tag{2.22c}$$

$$\widetilde{\boldsymbol{W}} = \left(\widetilde{W}(\zeta_0), \widetilde{W}(\zeta_1), \ldots, \widetilde{W}(\zeta_n)\right)^T, \tag{2.22d}$$

$$\widetilde{\boldsymbol{U}} = \left(\widetilde{U}(\zeta_0), \widetilde{U}(\zeta_1), \ldots, \widetilde{U}(\zeta_n)\right)^T. \tag{2.22e}$$

Vzťahy pre jednotlivé derivácie profilov $\overline{C}(\zeta_j)$ a $\overline{W}(\zeta_j)$ v Čebyševových bodoch na intervale $[-1, 1]$ dostávame pomocou vzťahov (2.21a) a (2.21b) v tvare

$$\left.\frac{\mathrm{d}\overline{C}}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_j} = \left.\frac{\mathrm{d}\bar{c}}{\mathrm{d}\xi}\right|_{\xi=\xi_j}\left.\frac{\mathrm{d}\xi_j}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_j}, \tag{2.23a}$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}\overline{W}}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_j} = \left.\frac{\mathrm{d}\bar{w}}{\mathrm{d}\xi}\right|_{\xi=\xi_j} \left.\frac{\mathrm{d}\xi_j}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_j}, \tag{2.23b}$$

podobne využitím vzťahov (2.21c-e) derivácie funkcií $\widetilde{C}(\zeta_j)$, $\widetilde{W}(\zeta_j)$ a $\widetilde{U}(\zeta_j)$ v Čebyševových bodoch na intervale $[-1,1]$ sú

$$\left.\frac{\mathrm{d}\widetilde{C}}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_j} = \left.\frac{\mathrm{d}\tilde{c}}{\mathrm{d}\xi}\right|_{\xi=\xi_j} \left.\frac{\mathrm{d}\xi_j}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_j}, \tag{2.23c}$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}\widetilde{W}}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_j} = \left.\frac{\mathrm{d}\tilde{w}}{\mathrm{d}\xi}\right|_{\xi=\xi_j} \left.\frac{\mathrm{d}\xi_j}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_j}, \tag{2.23d}$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}\widetilde{U}}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_j} = \left.\frac{\mathrm{d}\tilde{u}}{\mathrm{d}\xi}\right|_{\xi=\xi_j} \left.\frac{\mathrm{d}\xi_j}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_j}, \tag{2.23e}$$

kde $j = 0, 1, \ldots, n$. Pre deriváciu funkcie ξ_j v bode ζ_j za predpokladu transformácie (2.18) platí

$$\left.\frac{\mathrm{d}\xi_j}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_j} = \frac{b-a}{2}, \qquad j = 0, 1, \ldots, n. \tag{2.24}$$

Uvedené diskretizované rovnice (2.19) môžeme transformovať pomocou nových premenných (2.21) a ich derivácií (2.23) na systém rovníc definovaných na množine Čebyševových bodov ζ_j na intervale $[-1,1]$ v tvare

$$\frac{\alpha}{r}(\bar{u}-\phi)\left.\frac{\mathrm{d}\widetilde{C}}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_j} + \overline{W}(\zeta_j)\widetilde{C}(\zeta_j) + \overline{C}(\zeta_j)\widetilde{W}(\zeta_j) + \frac{\alpha}{r}\left.\frac{\mathrm{d}\overline{C}}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_j} \widetilde{U}(\zeta_j) = -\alpha\phi\lambda\widetilde{C}(\zeta_j), \tag{2.25a}$$

$$\overline{W}(\zeta_j)\widetilde{C}(\zeta_j) - \frac{1}{r}\left.\frac{\mathrm{d}\widetilde{W}}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_j} + \overline{C}(\zeta_j)\widetilde{W}(\zeta_j) = -\lambda\widetilde{W}(\zeta_j), \tag{2.25b}$$

$$\frac{k^2\bar{u}}{\kappa(\overline{W}(\zeta_j))}\left.\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}W}\right|_{W=\overline{W}(\zeta_j)} \widetilde{W}(\zeta_j) - \frac{1}{r^2\kappa(\overline{W}(\zeta_j))}\left.\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}W}\right|_{W=\overline{W}(\zeta_j)} \left.\frac{\mathrm{d}\overline{W}}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_j} \left.\frac{\mathrm{d}\widetilde{U}}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_j} + \frac{1}{r^2}\left.\frac{\mathrm{d}^2\widetilde{U}}{\mathrm{d}\zeta^2}\right|_{\zeta=\zeta_j} - k^2\widetilde{U}(\zeta_j) = 0, \tag{2.25c}$$

kde $j = 0, 1, \ldots, n$ a konštanta $r = (b-a)/2$ vyplýva zo vzťahu (2.24). Pre hraničné podmienky v Čebyševových bodoch ζ_0 a ζ_n platí

$$\widetilde{C}(\zeta_0) = 0, \quad \widetilde{W}(\zeta_0) = 0, \tag{2.26a,b}$$

$$\widetilde{C}(\zeta_n) = 0, \quad \widetilde{W}(\zeta_n) = 0. \tag{2.26c,d}$$

Derivácie funkcií $\overline{C}$ a $\overline{W}$ poznáme v explicitnom tvare

$$\left.\frac{\mathrm{d}\overline{C}}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_j} = -\frac{\mathrm{e}^{\zeta_j}}{(1+\mathrm{e}^{\zeta_j})^2},$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}\overline{W}}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_j} = \frac{\mathrm{e}^{\zeta_j}}{(1+\mathrm{e}^{\zeta_j})^2},$$

kde $j = 0, 1, \ldots, n$. Podobne vieme vyjadriť deriváciu pre funkciu permeability κ v závislosti od predpísaného tvaru (1.23) a (1.24). Všetky derivácie neznámych funkcií $\widetilde{C}$, $\widetilde{W}$ a $\widetilde{U}$ v Čebyševových bodoch na intervale $[-1, 1]$ aproximujeme prostredníctvom Čebyševových diferenčných matíc, ktoré skonštruujeme podľa Vety 2.1.

Diskretizovaný systém rovníc (2.25) na množine Čebyševových bodov na intervale $[-1, 1]$ môžeme previesť na zovšeobecnený vlastnohodnotový problém

$$A\boldsymbol{f} = \lambda B\boldsymbol{f}, \tag{2.27}$$

kde matice $A, B \in \mathbb{R}^{(3n+3)\times(3n+3)}$, vlastná hodnota $\lambda \in \mathbb{C}$ a prislúchajúci vlastný vektor $\boldsymbol{f} \in \mathbb{R}^{3n+3}$ pre ľubovoľný parameter $k \in \mathbb{R}$. Vlastný vektor $\boldsymbol{f}$ je zložený z diskretizovaných funkcií $\widetilde{C}$, $\widetilde{W}$ a $\widetilde{U}$ na množine Čebyševových bodov na intervale $[-1, 1]$ a má tvar

$$\boldsymbol{f} = \left(\widetilde{\boldsymbol{C}}, \widetilde{\boldsymbol{W}}, \widetilde{\boldsymbol{U}}\right)^T. \tag{2.28}$$

Matice A a B pozostávajú z 9 blokov, ktoré prislúchajú jednotlivým diskretizovaným rovniciam (2.25) a diskretizovaným funkciám $\widetilde{C}$, $\widetilde{W}$ a $\widetilde{U}$, a preto sú pomerne riedke. Pre ľubovoľné k má matica A štruktúru

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix}, \tag{2.29}$$

kde $(n+1) \times (n+1)$ blokové matice majú tvar

$$\begin{aligned}
A_{11} &= \frac{\alpha}{r}(\bar{u} - \phi)D^{(1)} + \operatorname{diag}\left(\overline{W}(\zeta_0), \ldots, \overline{W}(\zeta_n)\right), \\
A_{12} &= \operatorname{diag}\left(\overline{C}(\zeta_0), \ldots, \overline{C}(\zeta_n)\right), \\
A_{13} &= \frac{\alpha}{r}\operatorname{diag}\left(\left.\frac{\mathrm{d}\overline{C}}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_0}, \ldots, \left.\frac{\mathrm{d}\overline{C}}{\mathrm{d}\zeta}\right|_{\zeta=\zeta_n}\right), \\
A_{21} &= \operatorname{diag}\left(\overline{W}(\zeta_0), \ldots, \overline{W}(\zeta_n)\right), \\
A_{22} &= -\frac{1}{r}D^{(1)} + \operatorname{diag}\left(\overline{C}(\zeta_0), \ldots, \overline{C}(\zeta_n)\right), \\
A_{32} &= k^2\bar{u}\operatorname{diag}\left(\frac{1}{\kappa(\overline{W}(\zeta_0))}\left.\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}W}\right|_{W=\overline{W}(\zeta_0)}, \ldots, \frac{1}{\kappa(\overline{W}(\zeta_n))}\left.\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}W}\right|_{W=\overline{W}(\zeta_n)}\right),
\end{aligned}$$

$$A_{33} = -\frac{1}{r^2}\,\mathrm{diag}\left(\frac{1}{\kappa(\overline{W}(\zeta_0))}\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}W}\bigg|_{W=\overline{W}(\zeta_0)}\frac{\mathrm{d}\overline{W}}{\mathrm{d}\zeta}\bigg|_{\zeta=\zeta_0},\ldots,\right.$$
$$\left.\frac{1}{\kappa(\overline{W}(\zeta_n))}\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}W}\bigg|_{W=\overline{W}(\zeta_n)}\frac{\mathrm{d}\overline{W}}{\mathrm{d}\zeta}\bigg|_{\zeta=\zeta_n}\right) D^{(1)} + \frac{1}{r^2}D^{(2)} - k^2\,I,$$

A_{23} a A_{31} sú nulové matice, pričom matica $D^{(i)}$ je $(n+1)\times(n+1)$ Čebyševova diferenčná matica i-teho rádu pre $i = 1, 2$; $\mathrm{diag}(d_0, \ldots, d_n)$ je $(n+1)\times(n+1)$ diagonálna matica so zložkami $d_0, \ldots, d_n$ a I je $(n+1)\times(n+1)$ matica identity. Štruktúra matice B je

$$B = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} \\ B_{31} & B_{32} & B_{33} \end{pmatrix}, \tag{2.30}$$

kde $(n+1)\times(n+1)$ blokové matice sú

$$B_{11} = -\alpha\phi\,I,$$
$$B_{22} = -I,$$

$B_{12}, B_{13}, B_{21}, B_{23}, B_{31}, B_{32}$ a B_{33} sú nulové matice. Môžeme si všimnúť, že matica B je singulárna s hodnosťou $h(B) = 2n+2$ pre $\alpha \neq 0$ a $\phi \neq 0$, pretože všetky blokové matice B_{31}, B_{32} a B_{33} majú nulové riadky, keďže v rovniciach (2.25c) pre žiadne j nevystupuje časová derivácia.

Na uvedený vlastnohodnotový problém (2.27) teraz aplikujeme hraničné podmienky (2.26). Vektor $\boldsymbol{f}$ definovaný vzťahom (2.28) tak obsahuje nulové hodnoty v riadkoch 1, $n+1$, $n+2$ a $2n+2$. Násobenie matíc A a B týmto vektorom vo vzťahu (2.27) spôsobí, že stĺpce 1, $n+1$, $n+2$ a $2n+2$ sa v oboch maticiach vynulujú, a teda ich z matíc A a B môžeme odstrániť. Keďže hodnoty $\widetilde{C}(\zeta_0)$, $\widetilde{C}(\zeta_n)$, $\widetilde{W}(\zeta_0)$ a $\widetilde{W}(\zeta_n)$ predpísané hraničnými podmienkami sú známe, ďalej už nepotrebujeme rovnice (2.25a) a (2.25b) pre $j = 0$ a $j = n$, a preto môžeme príslušné riadky 1, $n+1$, $n+2$ a $2n+2$ z matíc A a B úplne vynechať. Na základe toho vytvoríme $(3n-1)\times 1$ vektor $\tilde{\boldsymbol{f}}$ zo zložiek vektora $\boldsymbol{f}$ vynechaním daných hodnôt $\widetilde{C}(\zeta_0)$, $\widetilde{C}(\zeta_n)$, $\widetilde{W}(\zeta_0)$ a $\widetilde{W}(\zeta_n)$. Z matíc A a B odstránením riadkov a stĺpcov 1, $n+1$, $n+2$ a $2n+2$ skonštruujeme $(3n-1)\times(3n-1)$ matice $\widetilde{A}$ a $\widetilde{B}$. Diskretizovaný systém rovníc (2.25) po zahrnutí hraničných podmienok (2.26) môžeme napísať vo forme

$$\widetilde{A}\tilde{\boldsymbol{f}} = \lambda\widetilde{B}\tilde{\boldsymbol{f}}. \tag{2.31}$$

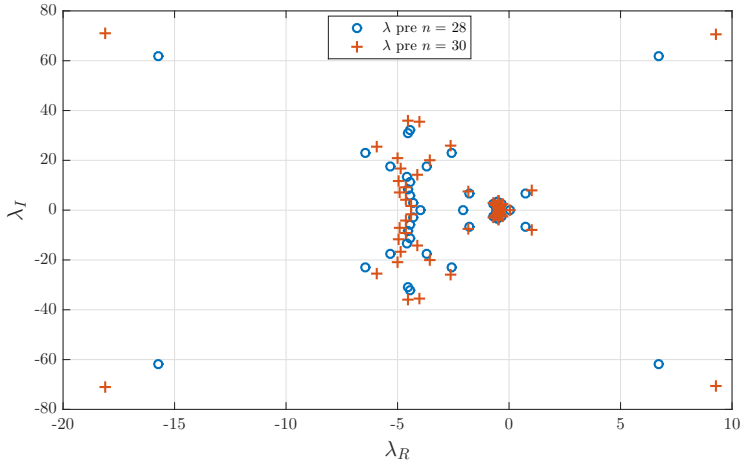
Poznamenajme, že za predpokladu regularity matice $\widetilde{A}$, t. j. hodnosť $h(\widetilde{A}) = 3n - 1$, je spektrum vlastných hodnôt λ zovšeobecneného vlastnohodnotového problému (2.31) tvorené z $2n - 2$ konečných hodnôt, pretože $(3n - 1) \times (3n - 1)$ matica $\widetilde{B}$ pre $\alpha \neq 0$ a $\phi \neq 0$ má hodnosť $h(\widetilde{B}) = 2n - 2$.

Problém lineárnej stability (1.39) a (1.40) sme previedli na zovšeobecnený vlastnohodnotový problém (2.31), ktorý vyriešime v systéme Matlab. Numerický výpočet v ňom realizujeme pomocou príkazu `eig(Atilde,Btilde)`, ktorého výstupom je diagonálna matica spektra vlastných hodnôt λ a matica prislúchajúcich vlastných vektorov $\tilde{\boldsymbol{f}}$. Poznamenajme, že v systéme Matlab funkcia `eig` na výpočet zovšeobecnených vlastnohodnotových problémov používa dva algoritmy. Jeden z nich počíta zovšeobecnené vlastné hodnoty vstupných matíc `Atilde` a `Btilde` prostredníctvom Choleského rozkladu matice `Btilde`. Druhý využíva tzv. QZ algoritmus, ktorý je založený na zovšeobecnenom Shurovom rozklade. Vo všeobecnosti by oba algoritmy mali vracať rovnaký výsledok, pričom QZ algoritmus môže byť stabilnejší v prípadoch, keď sú vstupné matice zle podmienené. Bez konkrétneho špecifikovania algoritmu funkcia `eig` použije QZ algoritmus vtedy, ak matica `Atilde` alebo `Btilde` nie je symetrická. V tomto výpočte sa aplikuje QZ algoritmus, keďže matica $\widetilde{A}$ nie je symetrická, čo je výhodou vzhľadom na zlú podmienenosť matíc $\widetilde{A}$ a $\widetilde{B}$.

2.4 Falošné vlastné hodnoty

Nech permeabilita je daná exponenciálnym vzťahom (1.24) a nech $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$. Presnosť numerického riešenia problému lineárnej stability (1.39) a (1.40) závisí od veľkosti spektrálneho rozlíšenia n. So zväčšovaním n možno očakávať, že sa bude minimalizovať absolútna hodnota odchýlky maximálnej reálnej časti λ_R vlastnej hodnoty λ. Po vykonaní výpočtov v programe `chebyshev_method.m` (viď Príloha B) pre vlnové čísla $k > 0$ pozorujeme, že s rastúcim n sa v riešení objavujú tzv. falošné vlastné hodnoty (spurious modes) [1]. Ide o vlastné hodnoty λ zovšeobecneného vlastnohodnotového problému (2.31), ktoré pre problém lineárnej stability reálne neexistujú. Takéto vlastné hodnoty sa spravidla vyznačujú nestabilitou, t. j. s rastúcim n sa vlastné hodnoty v absolútnej hodnote stále zväčšujú, čo zachytáva obrázok 2.5. Do tabuľky 2.1 sme uviedli najväčšie (dominantné) reálne vlastné hodnoty λ_R, ktoré sme dostali ako

numerické riešenie pre niekoľko vybraných hodnôt spektrálneho rozlíšenia n.



Obr. 2.5: Vlastné hodnoty λ problému (2.31) s permeabilitou (1.24), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ na intervale $[-10, 10]$ pre vlnové číslo $k = 3$ a spektrálne rozlíšenia $n = 28$ a $n = 30$.

Poradie	λ_R					
	$n = 20$	$n = 22$	$n = 24$	$n = 26$	$n = 28$	$n = 30$
1	$0,049$	$0,5037$	$2,3931$	$4,4523$	$6,7066$	$9,2795$
2	$-0,1355$	$0,0547$	$0,2624$	$0,4878$	$0,7314$	$1,0013$
3	$-0,2721$	$0,0496$	$0,0492$	$0,0494$	$0,0491$	$0,0486$
4	$-0,308$	$-0,2983$	$-0,2928$	$-0,3069$	$-0,3451$	$-0,2868$
5	$-0,4253$	$-0,3104$	$-0,3658$	$-0,4269$	$-0,4535$	$-0,3495$

Tabuľka 2.1: Dominantné reálne vlastné hodnoty λ_R problému (2.31) s permeabilitou (1.24), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ na intervale $[-10, 10]$ pre vlnové číslo $k = 3$ v závislosti od spektrálneho rozlíšenia n.

Príčiny vzniku falošných vlastných hodnôt sú podľa [1] pripisované nesprávnej aplikácii hraničných podmienok, redukcii systému rovníc na jednu samostatnú rovnicu alebo inému nesprávnemu uplatneniu fyzikálnych zákonitostí v probléme. Na získanie dominantných vlastných hodnôt λ vzhľadom na λ_R potrebujeme očistiť vypočítané spektrum vlastných hodnôt od falošných.

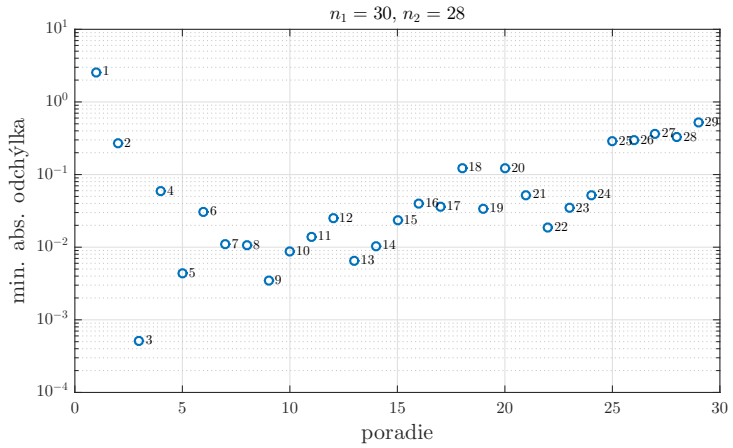
Uvažujme spektrum $2n - 2$ konečných vlastných hodnôt λ zovšeobecneného vlastnohodnotového problému (2.31) pre ľubovoľné hodnoty n_1 a n_2 spektrálneho rozlíšenia n, kde $n_1 > n_2$, a označme reálne vlastné hodnoty λ_R prislúchajúce jednotlivým

hodnotám n ako $\lambda_R^1(n_1), \lambda_R^2(n_1), \ldots, \lambda_R^{2n_1-2}(n_1)$ a $\lambda_R^1(n_2), \lambda_R^2(n_2), \ldots, \lambda_R^{2n_2-2}(n_2)$, kde $\lambda_R^1(n_1) \geq \lambda_R^2(n_1) \geq \ldots \geq \lambda_R^{2n_1-2}(n_1)$ a $\lambda_R^1(n_2) \geq \lambda_R^2(n_2) \geq \ldots \geq \lambda_R^{2n_2-2}(n_2)$.

Uvažujme odchýlky medzi reálnymi vlastnými hodnotami λ_R pre hodnoty n_1 a n_2. Hlavnou myšlienkou je podobne ako v [1] zistiť, ako veľmi sa zmenili reálne vlastné hodnoty po zväčšení n. Ak ide o pomerne veľkú zmenu, tak táto vlastná hodnota je zrejme falošná. Keďže veľkosť spektra vlastných hodnôt sa mení v závislosti od veľkosti spektrálneho rozlíšenia n, tak má zmysel uvažovať len minimálnu absolútnu odchýlku medzi n_2 najväčšími reálnymi vlastnými hodnotami, ktoré prislúchajú jednotlivým hodnotám n. Takéto odchýlky označíme Δ_i a definujeme ich v tvare

$$\Delta_i = \min_{j=1,\ldots,2n_2-2} \left| \lambda_R^i(n_1) - \lambda_R^j(n_2) \right|, \qquad i = 1, \ldots, 2n_2 - 2. \tag{2.32}$$

Potom porovnáme postupne pre každé i, či minimálna absolútna odchýlka Δ_i je menšia ako predpísaná tolerančná úroveň odchýlky. Pre prvú odchýlku Δ_i, ktorá spĺňa toto kritérium, považujeme jej prislúchajúcu reálnu vlastnú hodnotu $\lambda_R^i(n_1)$ pre hodnotu n_1 za dominantnú. Na obrázku 2.6 vidíme hodnoty odchýlok prislúchajúcich reálnym vlastným hodnotám pre $n_1 = 30$ a $n_2 = 28$. Ak zoberieme tolerančnú úroveň odchýlky 10^{-2}, tak dominantná vlastná hodnota, ktorá nie je falošná, je tretia v poradí pre $n = 30$, t. j. $0,0486$. Z obrázka 2.5 si môžeme všimnúť, že dominantné vlastné hodnoty pre n_1 a n_2, ktoré nie sú falošné, ležia na osi λ_R, teda možno očakávať, že takéto dominantné vlastné hodnoty sú reálne.



Obr. 2.6: Hodnoty min. abs. odchýlok pre λ_R problému (2.31) s permeabilitou (1.24), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ na intervale $[-10, 10]$ pre vlnové číslo $k = 3$ a spektrálne rozlíšenia $n_1 = 30$ a $n_2 = 28$.

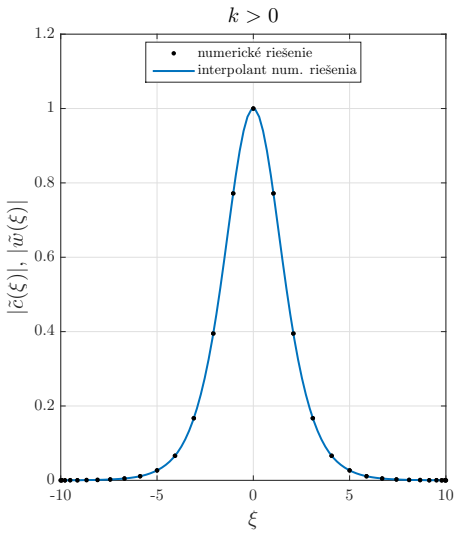
Poznamenajme, že pri výpočtoch a uvádzaní výsledkov, kde vystupujú reálne vlastné hodnoty λ_R, vynechávame z vypočítaného spektra komplexne združené vlastné hodnoty.

2.5 Numerické výsledky

Výpočty prevedieme v programe `chebyshev_method.m` (viď Príloha B) pre vlnové čísla $k > 0$, ktoré charakterizujú módy porúch. Po eliminácii falošných vlastných hodnôt pomocou programu `get_min_nearest_difference.m` uvedieme numerické výsledky v závislosti od permeabilitných vzťahov (1.23) a (1.24).

2.5.1 Konštantný vzťah pre permeabilitu

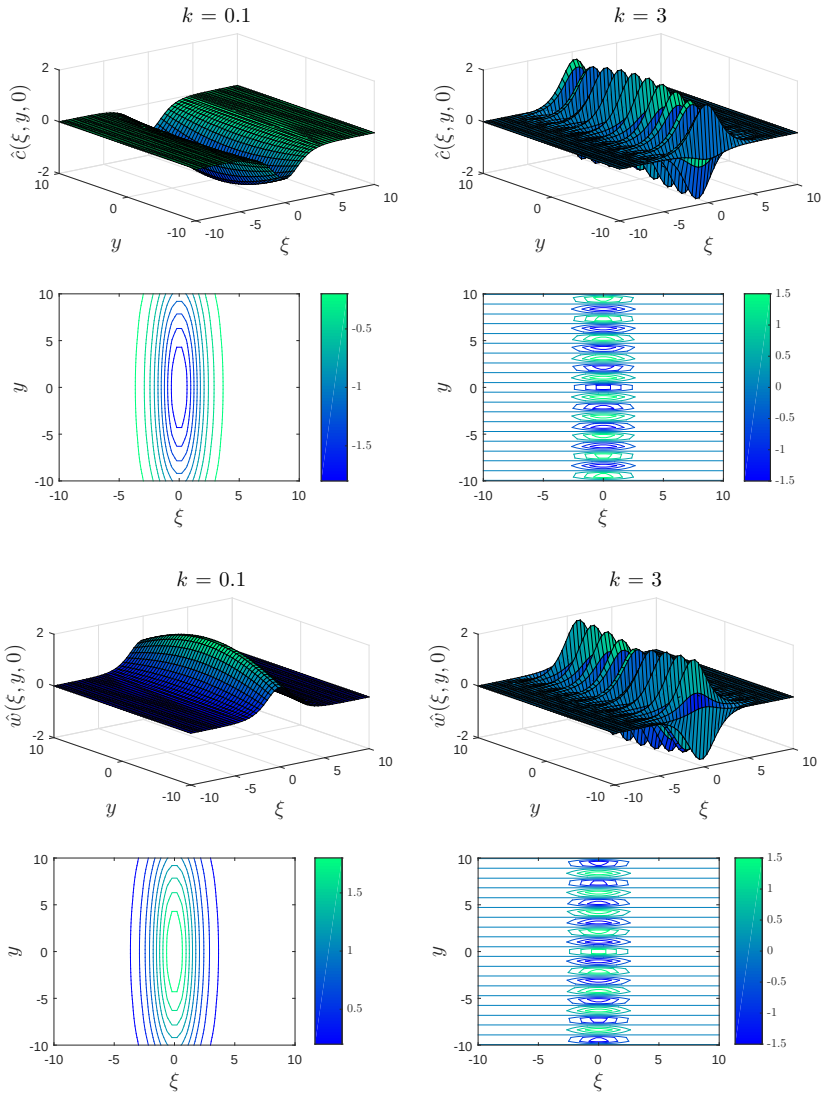
Pre konštantnú permeabilitu dostávame nulovú dominantnú vlastnú hodnotu λ problému (2.31) s parametrami $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ pre vlnové čísla $k > 0$ na intervale $[-10, 10]$ a spektrálne rozlíšenie $n \in \{10, 12, \ldots, 40\}$, pričom príslušná maximálna absolútna odchýlka Δ_i pre hodnoty $n_1 = n$ a $n_2 = n - 2$ sa pohybuje približne na úrovni $\mathcal{O}(10^{-15})$.



Obr. 2.7: Priebeh absolútnej hodnoty funkcií amplitúdy $\tilde{c}(\xi)$ a $\tilde{w}(\xi)$ na intervale $[-10, 10]$ pre vlnové čísla $k > 0$ a príslušné dominantné vlastné hodnoty $\lambda \approx 0$ problému (2.31) s permeabilitou (1.23), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ pre $n = 30$.

Na obrázku 2.7 je znázornená magnitúda amplitúdových funkcií $\tilde{c}(\xi)$ a $\tilde{w}(\xi)$. Funkcia

amplitúdy $\tilde{u}(\xi)$ je nulová pre vlnové čísla $k > 0$ a dominantné vlastné hodnoty $\lambda \approx 0$. Pozorujeme, že pre koncentračné polia c a w sa objavujú poruchy, ktoré sú v čase približne konštantné. Pre rýchlostné a tlakové pole sú linearizované poruchy základného stavu zanedbateľné, keďže zo vzťahov (1.34) a (1.35) možno dourčiť amplitúdové funkcie $\tilde{v}$ a $\tilde{p}$, resp. poruchové funkcie $\hat{v}$ a $\hat{p}$. Teda v zmysle lineárnej stability ide o neutrálne stabilné prúdenie.



Obr. 2.8: Priebeh poruchových funkcií $\hat{c}(\xi, y, t)$ a $\hat{w}(\xi, y, t)$ pre oblasť $[\xi, y]$ na štvorci $[-10, 10] \times [-10, 10]$ a čas $t = 0$ pre vlnové čísla $k = 0.1$ a $k = 3$ a príslušné dominantné vlastné hodnoty $\lambda \approx 0$ problému (2.31) s permeabilitou (1.23), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ pre $n = 30$.

Na základe získaných numerických výsledkov uvažujme, že platí $\lambda \equiv 0$ a $\tilde{u}(\xi) \equiv 0$

pre vlnové čísla $k > 0$. Potom problém (1.39) môžeme upraviť na tvar

$$\alpha(\bar{u} - \phi)\frac{\mathrm{d}\tilde{c}}{\mathrm{d}\xi} = -\bar{c}\tilde{w} - \tilde{c}\bar{w}, \tag{2.33a}$$

$$-\frac{\mathrm{d}\tilde{w}}{\mathrm{d}\xi} = -\bar{c}\tilde{w} - \tilde{c}\bar{w}, \tag{2.33b}$$

pričom premenné $\tilde{c}$ a $\tilde{w}$ spĺňajú hraničné podmienky (1.40). Po úprave rovníc (2.33a) a (2.33b), integrovaní a aplikácii hraničných podmienok (1.40) dostávame identitu

$$\tilde{c} + \tilde{w} = 0. \tag{2.34}$$

Z rovnice (2.33a) využitím vzťahu (2.34) odvodíme diferenciálnu rovnicu prvého rádu

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{c}}{\mathrm{d}\xi} = (\bar{c} - \bar{w})\tilde{c}. \tag{2.35}$$

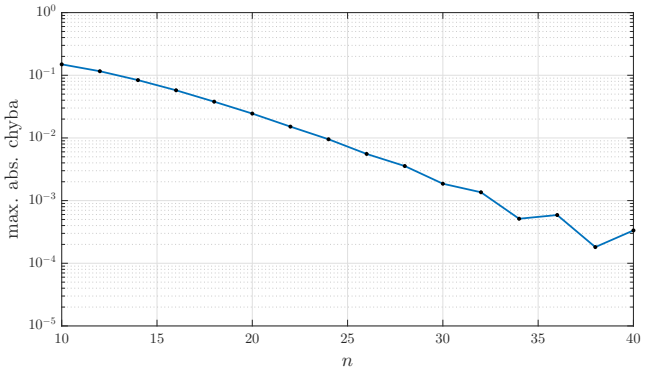
Riešenie systému rovníc (2.33a) a (2.33b) s hraničnými podmienkami (1.40) dostávame z (2.34) a (2.35) v tvare

$$\tilde{c}(\xi) = -K\frac{\mathrm{e}^{\xi}}{(1+\mathrm{e}^{\xi})^2}, \tag{2.36a}$$

$$\tilde{w}(\xi) = K\frac{\mathrm{e}^{\xi}}{(1+\mathrm{e}^{\xi})^2}, \tag{2.36b}$$

kde konštanta $K \in \mathbb{R}$. Všimnime si, že vyjadrené amplitúdové funkcie $\tilde{c}(\xi)$ a $\tilde{w}(\xi)$ sú násobkom derivácie príslušných profilov základného stavu (1.20a) a (1.20b).

Na obrázku 2.9 porovnáme maximálne absolútne chyby numerického riešenia problému (2.33) a (1.40) vypočítaného v programe `chebyshev_method.m` pre spektrálne rozlíšenie n v rozmedzí od 10 do 40, kde presnosť riešenia pre $n = 30$ je na úrovni $\mathcal{O}(10^{-2})$.



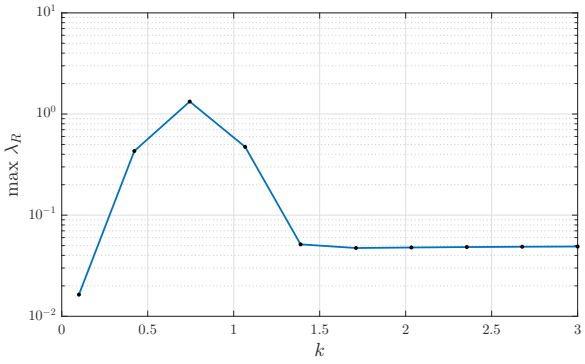
Obr. 2.9: Hodnoty max. abs. chýb numerického riešenia problému (2.33) a (1.40) na intervale $[-10, 10]$ v závislosti od spektrálneho rozlíšenia n.

2.5.2 Exponenciálny vzťah pre permeabilitu

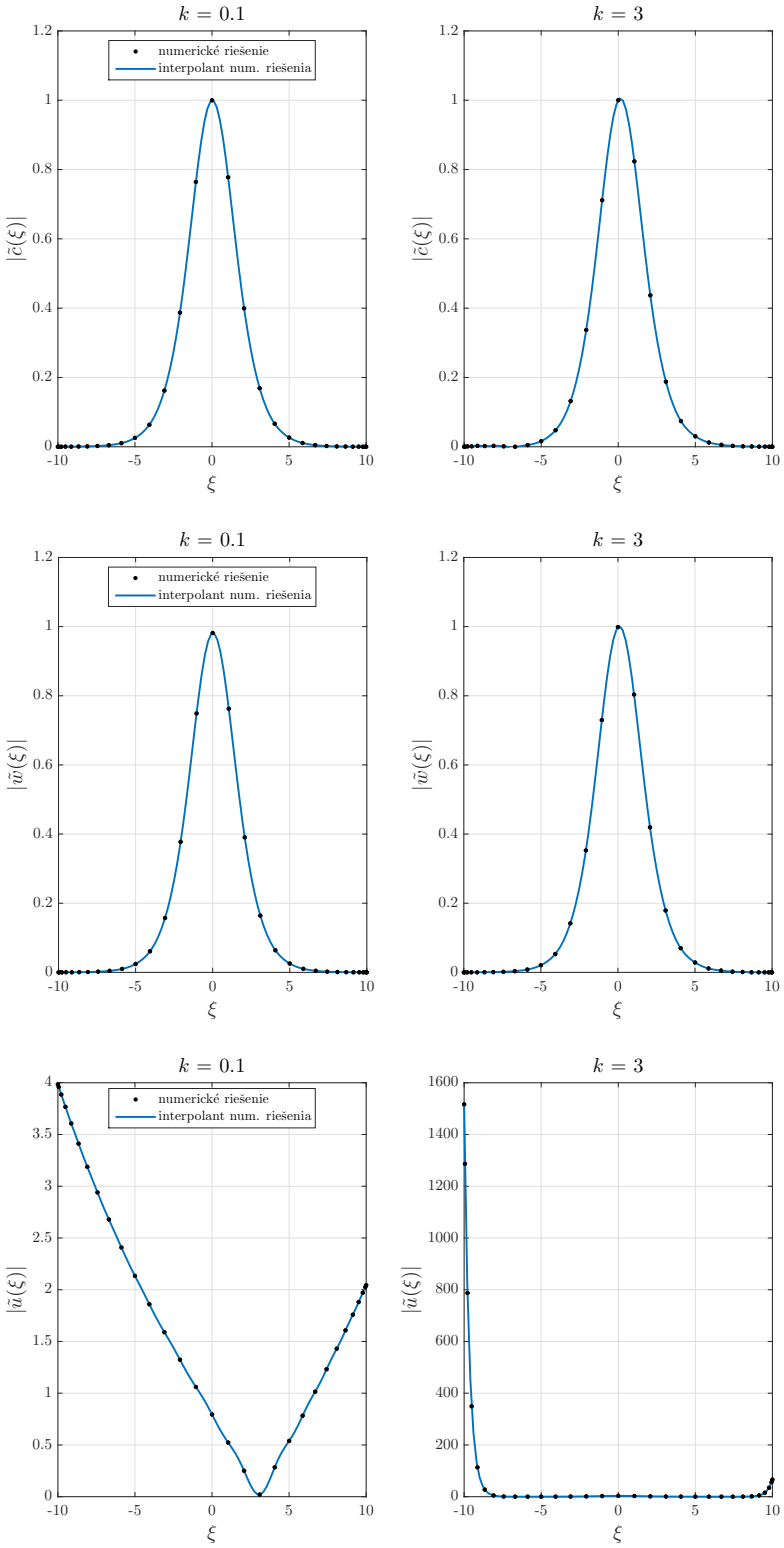
V tabuľke 2.2 sú uvedené dominantné vlastné hodnoty λ pre rôzne vlnové čísla k a spektrálne rozlíšenia n. Pre porovnanie volíme ľubovoľne malé vlnové číslo $k = 0,1$ a pomerne veľké $k = 3$, pri ktorom dominantné vlastné hodnoty už začínajú asymptoticky rásť. Pre všetky vlnové čísla $k > 0$ získavame dominantné vlastné hodnoty, ktoré sú kladné. Z obrázka 2.10 môžeme vidieť, že pri malých hodnotách vlnového čísla k je Čebyševova kolokačná metóda nestabilná aj po eliminácii falošných vlastných hodnôt.

n	$k = 0,1$		$k = 3$	
	λ	Δ_i	λ	Δ_i
20	$0,0164$	$0,0014$	$0,049$	$0,001$
22	$0,018$	$0,0017$	$0,0496$	$0,0006$
24	$0,0201$	$0,002$	$0,0492$	$0,0004$
26	$0,0205$	$0,0004$	$0,0494$	$0,0002$
28	$0,0244$	$0,0039$	$0,0491$	$0,0003$
30	$0,0182$	$0,0062$	$0,0486$	$0,0005$

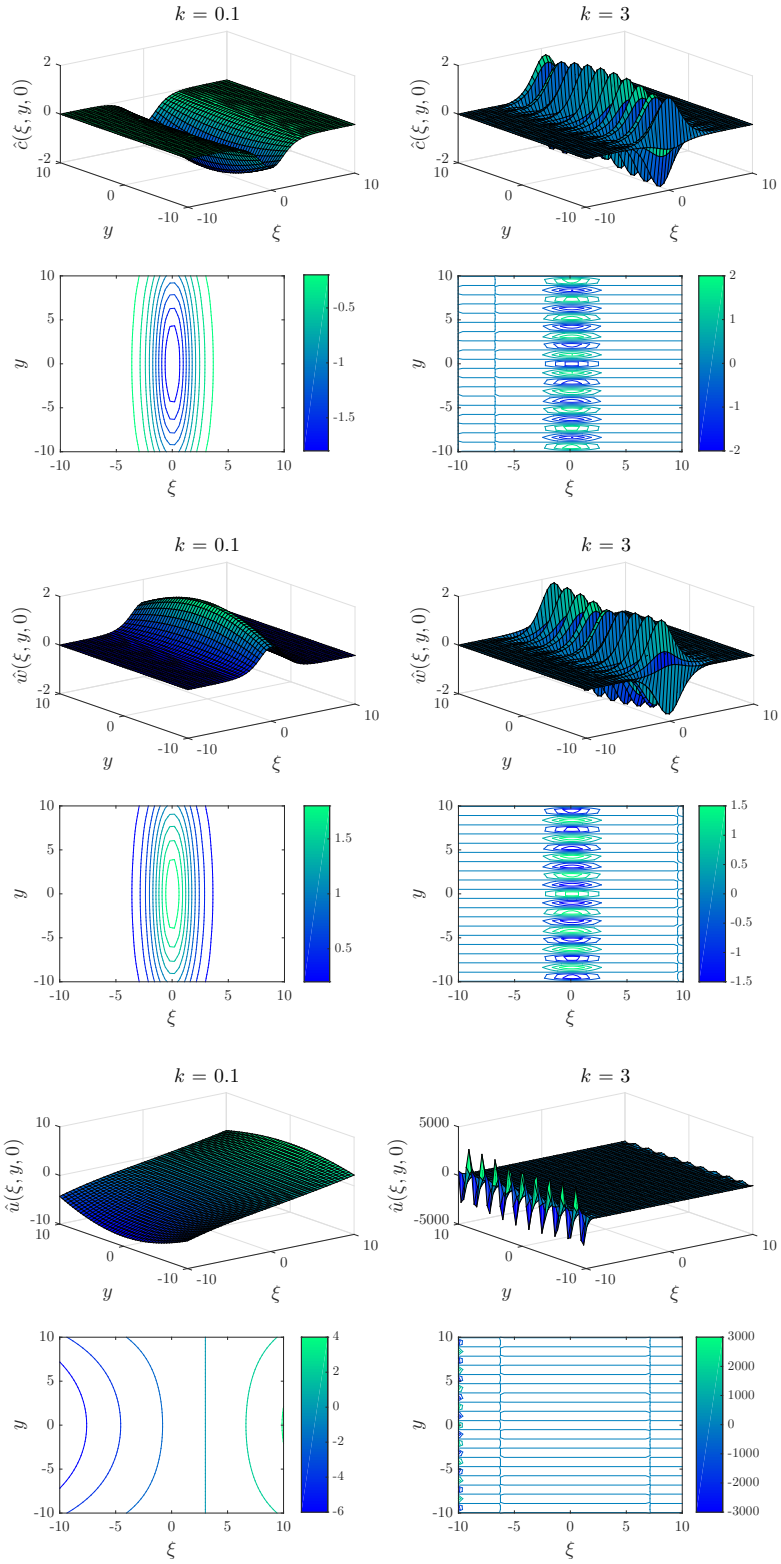
Tabuľka 2.2: Dominantné vlastné hodnoty λ vzhľadom na ich reálnu časť s príslušnou max. abs. odchýlkou Δ_i pre $n_1 = n$ a $n_2 = n - 2$ problému (2.31) s permeabilitou (1.24), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ na intervale $[-10, 10]$ pre vlnové čísla $k = 0,1$ a $k = 3$ v závislosti od spektrálneho rozlíšenia n.



Obr. 2.10: Dominantné reálne vlastné hodnoty λ_R problému (2.31) s permeabilitou (1.24), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ na intervale $[-10, 10]$ pre $n = 20$ v závislosti od vlnového čísla k.



Obr. 2.11: Priebeh absolútnej hodnoty funkcií amplitúdy $\tilde{c}(\xi)$, $\tilde{w}(\xi)$ a $\tilde{u}(\xi)$ na intervale $[-10, 10]$ pre vlnové čísla $k = 0,1$ a $k = 3$ a príslušné dominantné vlastné hodnoty $\lambda \approx 0,0182$, resp. $\lambda \approx 0,0486$ problému (2.31) s permeabilitou (1.24), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ pre $n = 30$.



Obr. 2.12: Priebeh poruchových funkcií $\hat{c}(\xi, y, t)$, $\hat{w}(\xi, y, t)$ a $\hat{u}(\xi, y, t)$ pre oblasť $[\xi, y]$ na štvorci $[-10, 10] \times [-10, 10]$ a čas $t = 0$ pre vlnové čísla $k = 0,1$ a $k = 3$ a príslušné dominantné vlastné hodnoty $\lambda \approx 0,0182$, resp. $\lambda \approx 0,0486$ problému (2.31) s permeabilitou (1.24), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ pre $n = 30$.

Z obrázka 2.12 si môžeme všimnúť vplyv vlnového čísla v smere y na priebeh linearizovaných poruchových funkcií $\hat{c}$ a $\hat{w}$, čo spôsobuje efekt hrubnúcich prstov na rozhraní postupujúceho reakčného frontu. Takže pri exponenciálne klesajúcej permeabilite vznikajú pre rôzne módy poruchy laminárneho prúdenia v koncentračnom, rýchlostnom a tlakovom poli, ktoré s rastúcim časom t vedú k nestabilite.

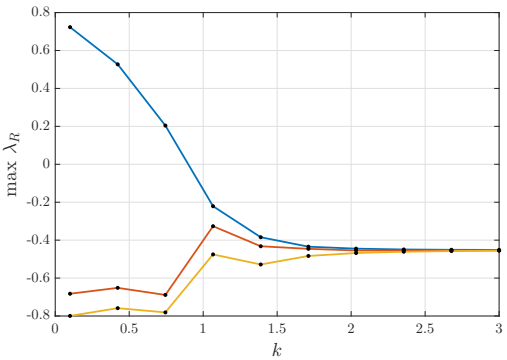
2.6 Numerické výsledky využitím systému Matlab/Chebfun

Výpočty ďalej vykonáme pomocou programu `compute_chebfun.m` v systéme Matlab/Chebfun [5]. Pre permeabilitné vzťahy (1.23) a (1.24) znázorníme získané numerické výsledky pre vlastné hodnoty s najväčšou magnitúdou využitím funkcie `eigs`.

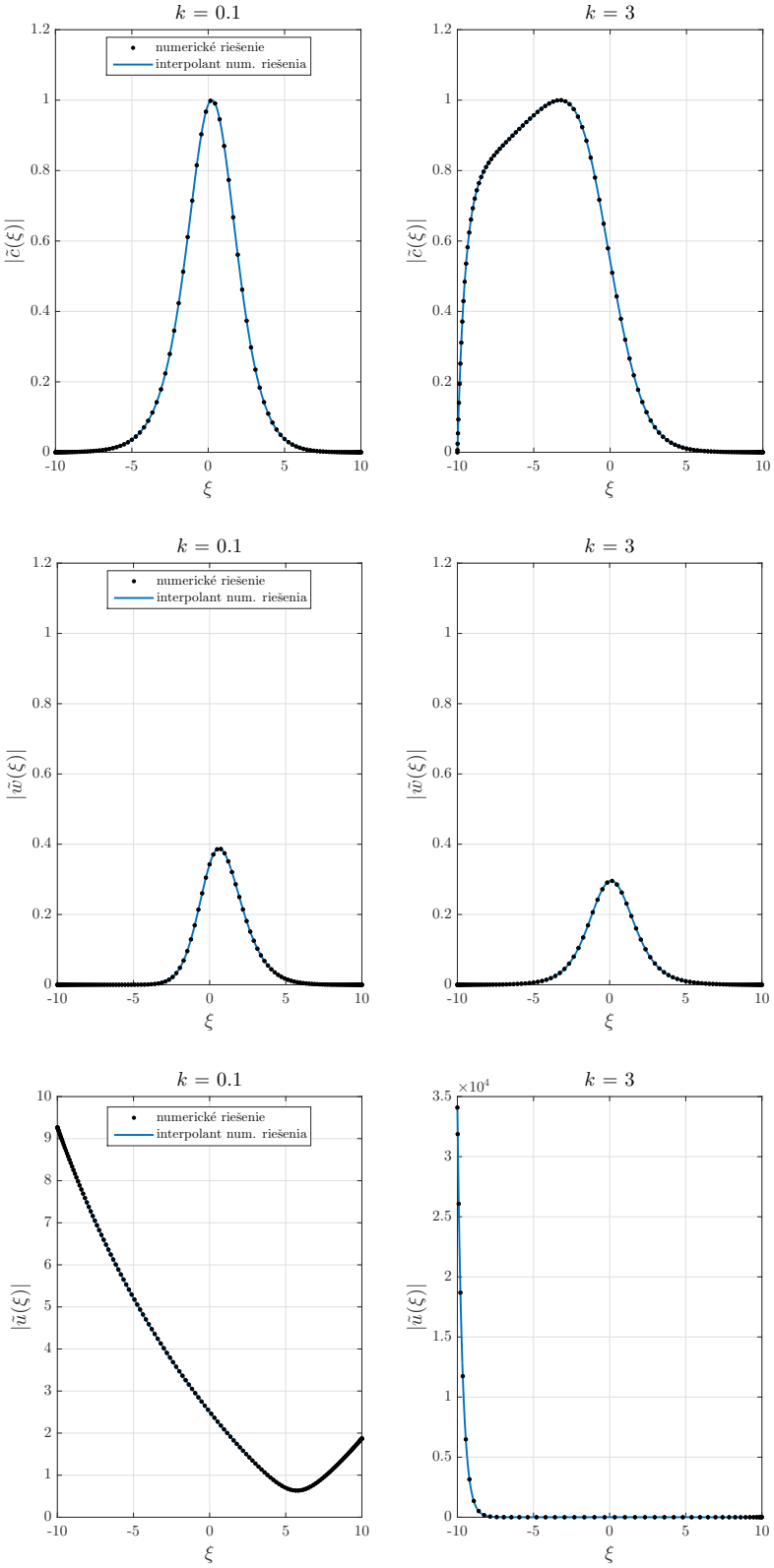
2.6.1 Konštantný vzťah pre permeabilitu

Poradie	λ	
	$k = 0,1$	$k = 3$
1	$0,7231 + 1,341\mathrm{i}$	$-0,4515 + 0,846\mathrm{i}$
2	$-0,6826 + 2,084\mathrm{i}$	$-0,4537 + 0,5291\mathrm{i}$
3	$-0,7995 + 1,4888\mathrm{i}$	$-0,4556 + 0,1865\mathrm{i}$
4	$-0,8991 + 0,8689\mathrm{i}$	–

Tabuľka 2.3: Dominantné vlastné hodnoty λ vzhľadom na ich reálnu časť problému (2.31) s permeabilitou (1.23), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ na intervale $[-10, 10]$ pre vlnové čísla $k = 0,1$ a $k = 3$.



Obr. 2.13: Dominantné reálne vlastné hodnoty λ_R problému (2.31) s permeabilitou (1.23), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ na intervale $[-10, 10]$ v závislosti od vlnového čísla k.



Obr. 2.14: Priebeh absolútnej hodnoty funkcií amplitúdy $\tilde{c}(\xi)$, $\tilde{w}(\xi)$ a $\tilde{u}(\xi)$ na intervale $[-10, 10]$ pre vlnové čísla $k = 0,1$ a $k = 3$ a príslušné dominantné reálne vlastné hodnoty $\lambda_R \approx 0,7231$, resp. $\lambda \approx -0,4515$ problému (2.31) s permeabilitou (1.23), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$.

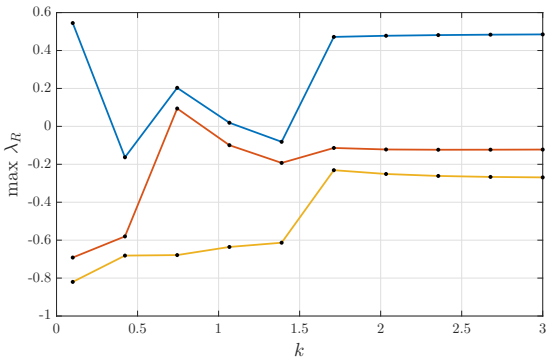
V prípade konštantnej permeability sa výsledky získané v systéme Matlab/Chebfun kvalitatívne odlišujú od výsledkov získaných Čebyševovou kolokačnou metódou v sekcii 2.5.1, pretože pre malé hodnoty vlnového čísla k dostávame kladné dominantné reálne vlastné hodnoty.

2.6.2 Exponenciálny vzťah pre permeabilitu

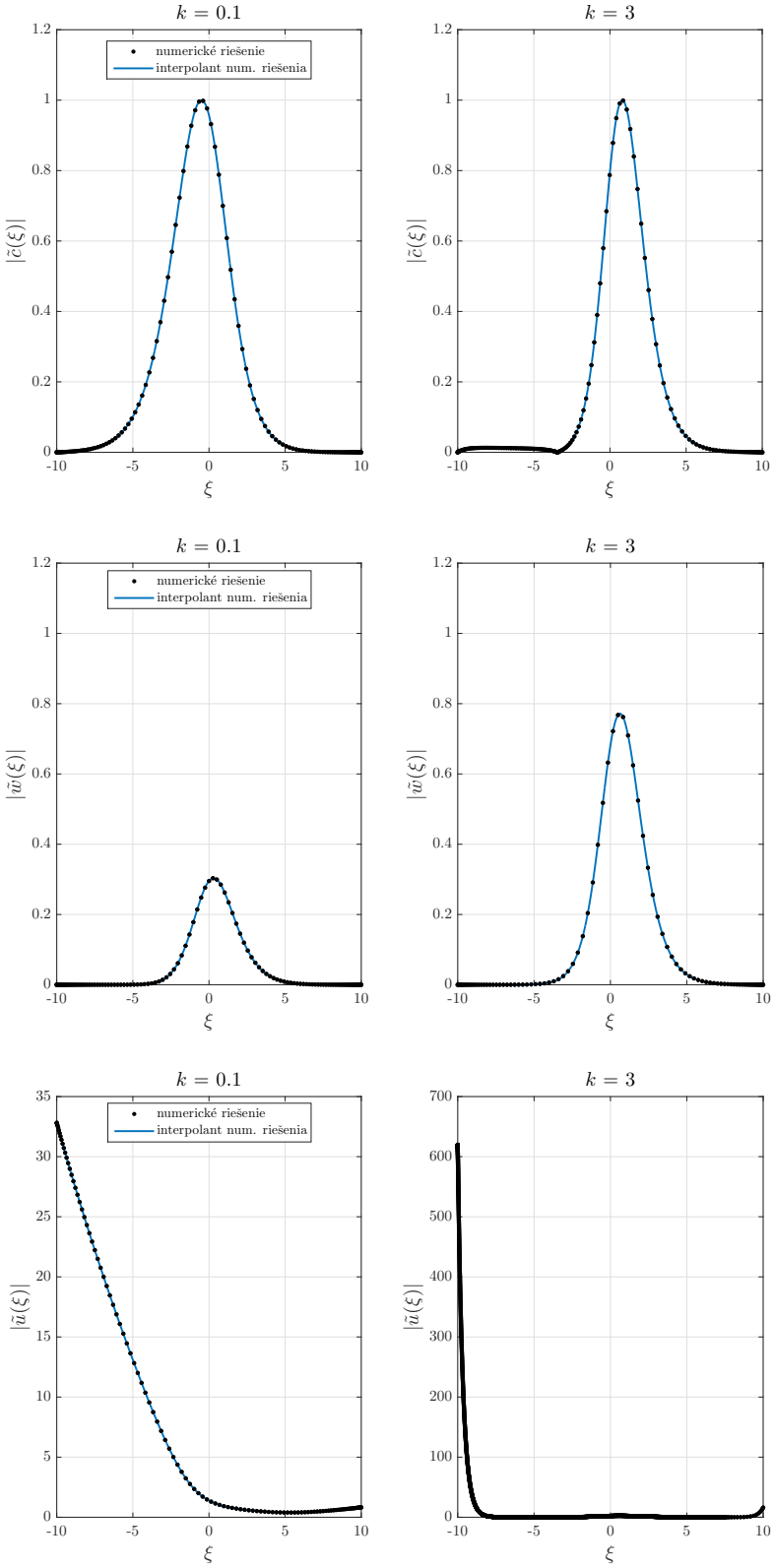
Pre exponenciálnu funkciu permeability získavame kladné dominantné vlastné hodnoty pre väčšie vlnové čísla k. Pre vlnové čísla blízke nule sa vo výpočte objavuje určitá nestabilita, ktorú možno pozorovať na obrázku 2.15. Teda ani v tomto prípade výsledky nie sú v zhode s Čebyševovou kolokačnou metódou.

Poradie	λ	
	$k = 0,1$	$k = 3$
1	$0,5448 + 1,4578\mathrm{i}$	$0,485$
2	$-0,6917 + 1,9753\mathrm{i}$	$-0,1223 + 0,6238\mathrm{i}$
3	$-0,8202 + 1,3901\mathrm{i}$	$-0,269 + 1,2321\mathrm{i}$
4	$-0,9162 + 0,7850\mathrm{i}$	$-0,6034 + 1,2839\mathrm{i}$

Tabuľka 2.4: Dominantné vlastné hodnoty λ vzhľadom na ich reálnu časť problému (2.31) s permeabilitou (1.24), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ na intervale $[-10, 10]$ pre vlnové čísla $k = 0,1$ a $k = 3$.



Obr. 2.15: Dominantné reálne vlastné hodnoty λ_R problému (2.31) s permeabilitou (1.24), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ na intervale $[-10, 10]$ v závislosti od vlnového čísla k.



Obr. 2.16: Priebeh absolútnej hodnoty funkcií amplitúdy $\tilde{c}(\xi)$, $\tilde{w}(\xi)$ a $\tilde{u}(\xi)$ na intervale $[-10, 10]$ pre vlnové čísla $k = 0,1$ a $k = 3$ a príslušné dominantné reálne vlastné hodnoty $\lambda_R \approx 0,5448$, resp. $\lambda \approx 0,485$ problému (2.31) s permeabilitou (1.24), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$.

3 Hermitova spektrálna kolokačná metóda

V kapitole 1 sme sformulovali problém lineárnej stability (1.39) s hraničnými podmienkami (1.40). Na riešenie teraz použijeme alternatívnu Hermitovu spektrálnu kolokačnú metódu [15], ktorá je vhodná pre problémy definované na nekonečnej oblasti s nulovými hraničnými podmienkami. Výpočty vykonáme taktiež použitím systému Matlab/Hydrostab, ktorý vychádza z pôvodného zdroja [15]. Tento systému využíva univerzálny kód na riešenie problémov hydrodynamickej stability v programovacom prostredí systému Matlab. Hydrostab analyzuje normálne módy linearizovaných poruchových rovníc a hraničných podmienok, prevádza problém stability na zovšeobecnený vlastnohodnotový problém a na riešenie využíva funkciu `eig` systému Matlab.

3.1 Hermitove body a diferenčné matice

Uvažujme množinu $n+1$ Hermitových bodov $\zeta_0, \zeta_1, \ldots, \zeta_n$, ktoré sú definované ako korene Hermitovho polynómu $H_{n+1}(\zeta)$ stupňa $n+1$, ktorý je podľa [15] daný Rodriguesovým vzťahom

$$H_{n+1}(\zeta) = \frac{(-1)^{n+1}}{2^{n+1}} \mathrm{e}^{\zeta^2} \frac{\mathrm{d}^{n+1}}{\mathrm{d}\zeta^{n+1}} \mathrm{e}^{-\zeta^2}, \qquad n \geq 0. \tag{3.1}$$

Poznamenajme, že vďaka uvedenej definícii Hermitových bodov sa s rastúcim n dĺžka intervalu $[\zeta_0, \zeta_n]$, na ktorom ležia, zväčšuje. Vo všeobecnosti dĺžka tohto intervalu je $2\zeta_n$, pretože korene Hermitovho polynómu $H_{n+1}(\zeta)$ sú symetricky distribuované okolo bodu 0, čo vyplýva zo symetrie $(n+1)$-ej derivácie funkcie $\mathrm{e}^{-\zeta^2}$. Keďže veľkosť intervalu $[\zeta_0, \zeta_n]$ závisí od n, množinu Hermitových bodov je praktické škálovať.

Pre ilustráciu vypočítame niekoľko Hermitových bodov pomocou (3.1). Zoberme $n = 1$ a hľadajme korene Hermitovho polynómu $H_2(\zeta)$ stupňa 2, kde

$$H_2(\zeta) = \zeta^2 - \frac{1}{2}.$$

Tento polynóm má 2 korene, teda 2 Hermitove body sú $\zeta_0 = -\sqrt{2}/2$ a $\zeta_1 = \sqrt{2}/2$. Pre $n = 2$ dostávame polynóm $H_3(\zeta)$ stupňa 3 v tvare

$$H_3(\zeta) = \zeta^3 - \frac{3}{2}\zeta.$$

V tomto prípade je množina Hermitových bodov $\zeta_0 = -\sqrt{6}/2$, $\zeta_1 = 0$ a $\zeta_2 = \sqrt{6}/2$.

Ďalej uvažujme interpolačný polynóm p stupňa n, ktorý interpoluje množinu funkčných hodnôt $\{f_j\}_{j=0}^n$ na množine Hermitových bodov $\zeta_0, \zeta_1, \ldots, \zeta_n$, t. j. $p(\zeta_j) = f_j$ pre $j = 0, 1, \ldots, n$. Ak jeho l-tú deriváciu v bode ζ_j označíme $p^{(l)}(\zeta_j) = f_j^{(l)}$ pre každé j a $l = 1, 2, \ldots, m$, potom platí

$$\boldsymbol{f}^{(l)} = D^{(l)}\boldsymbol{f}, \tag{3.2}$$

kde vektor $\boldsymbol{f} = (f_0, f_1, \ldots, f_n)^T$ a $\boldsymbol{f}^{(l)} = \left(f_0^{(l)}, f_1^{(l)}, \ldots, f_n^{(l)}\right)^T$ a matica $D^{(l)}$ je $(n+1) \times (n+1)$ Hermitova diferenčná matica l-tého rádu.

Na vytvorenie Hermitovej diferenčnej matice l-tého rádu $D^{(l)}$ zo vzťahu (3.2) použijeme Lagrangeov interpolačný polynóm s váhou $\mathrm{e}^{-\frac{\zeta^2}{2}}$ [15]. Potom interpolačný polynóm p stupňa n na množine $n+1$ Hermitových bodov je definovaný v tvare

$$p_n(\zeta) = \sum_{j=0}^{n} \mathrm{e}^{-\frac{\zeta^2-\zeta_j^2}{2}} \prod_{\substack{k=0 \\ k\neq j}}^{n} \frac{\zeta - \zeta_k}{\zeta_j - \zeta_k} f_j. \tag{3.3}$$

Pre l-tú deriváciu interpolačného polynómu p v bode ζ_i platí

$$p_n^{(l)}(\zeta_i) = \sum_{j=0}^{n} \left[\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}\zeta^l} \left(\mathrm{e}^{-\frac{\zeta^2-\zeta_j^2}{2}} \prod_{\substack{k=0 \\ k\neq j}}^{n} \frac{\zeta - \zeta_k}{\zeta_j - \zeta_k} f_j \right) \right]_{\zeta=\zeta_i}, \qquad i = 0, 1, \ldots, n. \tag{3.4}$$

Nech pre každé $n \geq 1$ sú riadky a stĺpce Hermitovej diferenčnej matice l-tého rádu $D^{(l)}$ rozmeru $(n+1) \times (n+1)$ označené od 0 po n. Zo vzťahov (3.2) a (3.4) dostávame zložky Hermitovej diferenčnej matice $D^{(l)}$ v i-tom riadku a j-tom stĺpci

$$D_{ij}^{(l)} = \left[\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}\zeta^l} \left(\mathrm{e}^{-\frac{\zeta^2-\zeta_j^2}{2}} \prod_{\substack{k=0 \\ k\neq j}}^{n} \frac{\zeta - \zeta_k}{\zeta_j - \zeta_k} \right) \right]_{\zeta=\zeta_i}, \qquad i, j = 0, 1, \ldots, n. \tag{3.5}$$

Poznamenajme, že z konštrukcie interpolačného polynómu p vyplýva, že Hermitova diferenčná matica l-tého rádu nie je vo všeobecnosti l-tá mocnina Hermitovej diferenčnej matice prvého rádu, t. j. $D^{(l)} \neq \left(D^{(1)}\right)^l$.

Nech $l = 1$. Pre $n = 1$ využitím predpisu (3.5) môžeme získať Hermitovu diferenčnú maticu prvého rádu $D^{(1)}$ rozmeru 2×2 vo forme

$$D^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\zeta_0 - \zeta_1} - \zeta_0 & \frac{1}{\zeta_1 - \zeta_0} \mathrm{e}^{-\frac{\zeta_0^2 - \zeta_1^2}{2}} \\ \frac{1}{\zeta_0 - \zeta_1} \mathrm{e}^{-\frac{\zeta_1^2 - \zeta_0^2}{2}} & \frac{1}{\zeta_1 - \zeta_0} - \zeta_1 \end{pmatrix}. \tag{3.6}$$

Po vyčíslení Hermitových bodov vo vzťahu (3.6) je 2×2 Hermitovu diferenčnú matica

$$D^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \end{pmatrix}.$$

Analogicky pre $n = 2$ vyjadríme 3×3 diferenčnú maticu $D^{(1)}$, ktorá sa dá napísať v tvare

$$D^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\zeta_0-\zeta_1} + \frac{1}{\zeta_0-\zeta_2} - \zeta_0 & \frac{\zeta_0-\zeta_2}{(\zeta_1-\zeta_0)(\zeta_1-\zeta_2)} \mathrm{e}^{-\frac{\zeta_0^2-\zeta_1^2}{2}} & \frac{\zeta_0-\zeta_1}{(\zeta_2-\zeta_0)(\zeta_2-\zeta_1)} \mathrm{e}^{-\frac{\zeta_0^2-\zeta_2^2}{2}} \\ \frac{\zeta_1-\zeta_2}{(\zeta_0-\zeta_1)(\zeta_0-\zeta_2)} \mathrm{e}^{-\frac{\zeta_1^2-\zeta_0^2}{2}} & \frac{1}{\zeta_1-\zeta_0} + \frac{1}{\zeta_1-\zeta_2} - \zeta_1 & \frac{\zeta_1-\zeta_0}{(\zeta_2-\zeta_0)(\zeta_2-\zeta_1)} \mathrm{e}^{-\frac{\zeta_1^2-\zeta_2^2}{2}} \\ \frac{\zeta_2-\zeta_1}{(\zeta_0-\zeta_1)(\zeta_0-\zeta_2)} \mathrm{e}^{-\frac{\zeta_2^2-\zeta_0^2}{2}} & \frac{\zeta_2-\zeta_0}{(\zeta_1-\zeta_0)(\zeta_1-\zeta_2)} \mathrm{e}^{-\frac{\zeta_2^2-\zeta_1^2}{2}} & \frac{1}{\zeta_2-\zeta_0} + \frac{1}{\zeta_2-\zeta_1} - \zeta_2 \end{pmatrix}. \tag{3.7}$$

Ak vo vzťahu (3.7) vyčíslime množinu Hermitových bodov ζ_0, ζ_1 a ζ_2, tak dostávame 3×3 Hermitovu diferenčnú maticu prvého rádu

$$D^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{2\sqrt{6}}{3}\mathrm{e}^{-\frac{3}{4}} & -\frac{\sqrt{6}}{6} \\ -\frac{\sqrt{6}}{6}\mathrm{e}^{\frac{3}{4}} & 0 & \frac{\sqrt{6}}{6}\mathrm{e}^{\frac{3}{4}} \\ \frac{\sqrt{6}}{6} & -\frac{2\sqrt{6}}{3}\mathrm{e}^{-\frac{3}{4}} & 0 \end{pmatrix}.$$

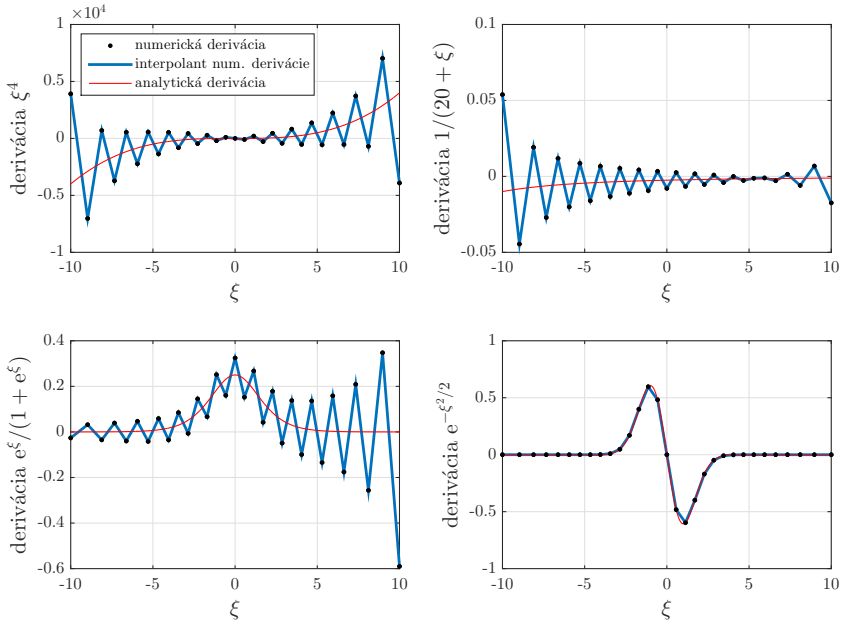
3.2 Presnosť Hermitovej derivácie

V prípade ľubovoľnej funkcie definovanej na množine Hermitových bodov možno jej numerickú deriváciu vyjadriť vzťahom (3.2) pomocou Hermitových diferenčných matíc. Presnosť numerickej derivácie funkcie závisí od presnosti aproximácie tejto funkcie Lagrangeovým polynómom s váhou $\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}}$, ktorý je použitý pri konštrukcii Hermitových diferenčných matíc. Z toho vyplýva, že vysokú presnosť môžeme očakávať pri funkciách, ktoré pre hodnoty z definičného oboru idúce v absolútnej hodnote do nekonečna klesajú k nule podobne ako funkcia typu $\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}}$.

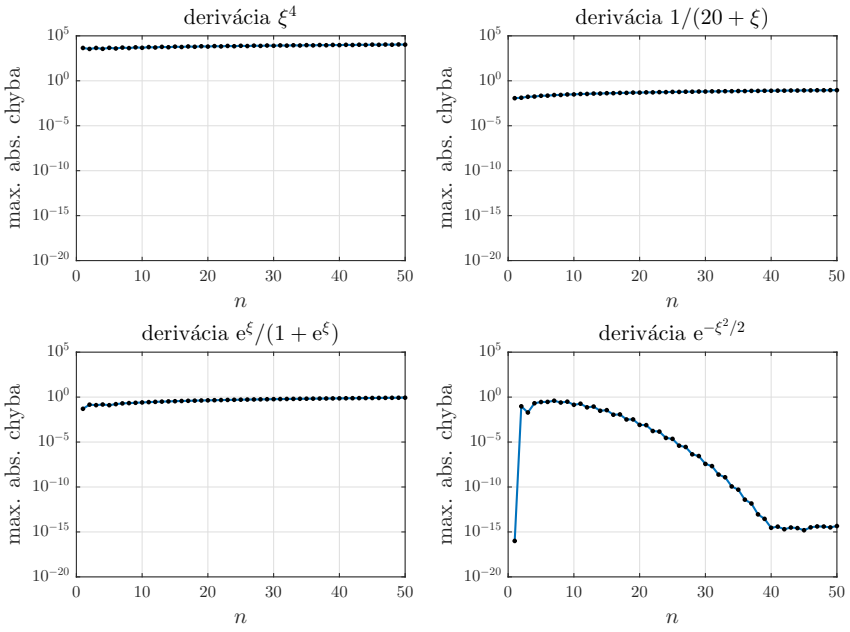
Zoberme funkcie ξ^4, $1/(20+\xi)$, $\mathrm{e}^{\xi}/(1+\mathrm{e}^{\xi})$ a $\mathrm{e}^{-\xi^2/2}$, pre ktoré vypočítame ich numerické derivácie a následne porovnáme ich presnosť. Na nasledujúcom obrázku 3.1 sú zachytené Hermitove spektrálne derivácie na množine 31 Hermitových bodov spolu s ich presnými analytickými deriváciami. Pozorujeme, že pre funkciu ξ^4 je numerická derivácia nepresná a výrazne sa líši od skutočnej hodnoty. Na celom intervale $[-10, 10]$ nekonvergujú ani numerické derivácie funkcií $1/(20+\xi)$ a $\mathrm{e}^{\xi}/(1+\mathrm{e}^{\xi})$, čo nastáva vtedy, keď funkcie na okrajoch intervalu nenadobúdajú nulové hodnoty. Podľa očakávania Hermitova derivácia funkcie $\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}}$ pomerne presne aproximuje jej analytickú deriváciu.

Vzťah medzi maximálnou absolútnou odchýlkou numerickej derivácie od presnej hodnoty na množine $n+1$ Hermitových bodov a spektrálnym rozlíšením n pre jednotlivé funkcie znázorníme na obrázku 3.2. Chyba v numerickej derivácii funkcie ξ^4 sa pohybuje približne na úrovni $\mathcal{O}(10^4)$. Pre funkcie $1/(20+\xi)$ a $\mathrm{e}^{\xi}/(1+\mathrm{e}^{\xi})$ sú odchýlky

pre $n = 50$ na úrovni $\mathcal{O}(10^{-2})$, resp. $\mathcal{O}(10^{-1})$, čo je pomerne nepresný výsledok. Aproximácia derivácie funkcie $\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}}$ má chybu od $n = 40$ na úrovni počítačovej presnosti.



Obr. 3.1: Porovnanie Hermitových spektrálnych a analytických derivácií funkcií ξ^4, $1/(20+\xi)$, $\mathrm{e}^{\xi}/(1+\mathrm{e}^{\xi})$ a $\mathrm{e}^{-\xi^2/2}$ na intervale $[-10, 10]$ pre spektrálne rozlíšenie $n = 30$.



Obr. 3.2: Hodnoty max. abs. chýb Hermitových spektrálnych derivácií funkcií ξ^4, $1/(20+\xi)$, $\mathrm{e}^{\xi}/(1+\mathrm{e}^{\xi})$ a $\mathrm{e}^{-\xi^2/2}$ na intervale $[-10, 10]$ v závislosti od spektrálneho rozlíšenia n.

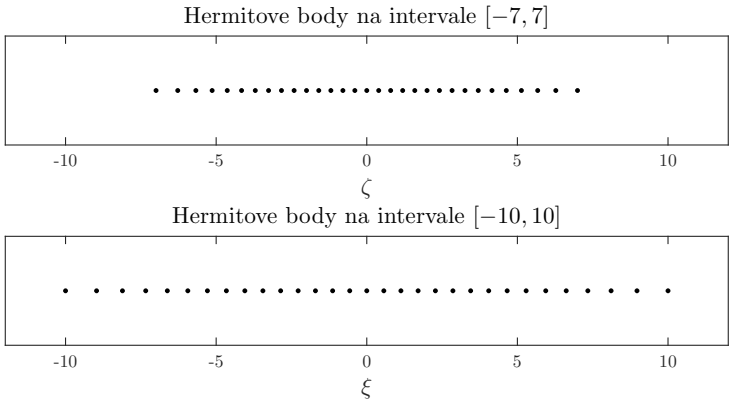
3.3 Implementácia

Uvažujme diskretizáciu spojitej oblasti $\xi \in \mathbb{R}$ na množinu $n+1$ ľubovoľných kolokačných bodov $\xi_0, \xi_1, \ldots, \xi_n$ na intervale $[a, b]$ takých, že platí $a = \xi_0 < \xi_1 < \ldots < \xi_n = b$, kde $a, b \in \mathbb{R}$. Uvažujme diskretizované profily základného stavu $\bar{c}(\xi)$ a $\bar{w}(\xi)$ a amplitúdové funkcie $\tilde{c}(\xi)$, $\tilde{w}(\xi)$ a $\tilde{u}(\xi)$ definované vzťahmi (2.17a-e) na množine kolokačných bodov.

Za množinu kolokačných bodov $\xi_0, \xi_1, \ldots, \xi_n$ zoberieme Hermitove body $\zeta_0, \zeta_1, \ldots, \zeta_n$, ktoré preškálujeme na interval $[a, b]$ vzťahom

$$\xi_j = \frac{b-a}{2\zeta_n}\zeta_j + \frac{a+b}{2}, \qquad j = 0, 1, \ldots, n. \tag{3.8}$$

Analogicky ako v podkapitole 2.3 problém lineárnej stability (1.39) a (1.40) diskretizujeme na množine $n+1$ Hermitových bodov na intervale $[a, b]$ na systém (2.19) s hraničnými podmienkami (2.20). Tento diskretizovaný problém (2.19) a (2.20) pomocou vzťahov pre profily základného stavu a amplitúdové funkcie (2.21) a ich derivácie (2.23) prevedieme na systém rovníc (2.25) s hraničnými podmienkami (2.26) definovaných na intervale $[\zeta_0, \zeta_n]$, kde konštanta $r = (b-a)/2\zeta_n$ vyplýva zo vzťahu (3.8).



Obr. 3.3: Porovnanie Hermitových bodov na intervale $[-7, 7]$ a preškálovaných Hermitových bodov na intervale $[-10, 10]$ pre $n = 30$.

Systém rovníc (2.25) ďalej transformujeme použitím Hermitových diferenčných matíc na zovšeobecnený vlastnohodnotový problém (2.27), kde matica $D^{(i)}$ je $(n+1) \times (n+1)$ Hermitova diferenčná matica i-teho rádu pre $i = 1, 2$. Aplikovaním hraničných podmienok (2.26) na odvodený problém (2.27) dostávame zovšeobecnený vlastnohodnotový problém (2.31), ktorého riešenie zodpovedá numerickému riešeniu problému

lineárnej stability. Pre dostatočne široký interval $[a, b]$ nie je nutné zahrnúť hraničné podmienky (2.26) vzhľadom na konštrukciu Hermitových diferenčných matíc a teda stačí riešiť pôvodný systém (2.27).

3.4 Numerické výsledky

Využitím programu `hermite_method.m` (viď Príloha B), v ktorom sú vlastné hodnoty počítané pomocou funkcie `eig`, znázorníme prehľad numerických výsledkov pre vlnové čísla $k > 0$ v závislosti od permeabilitných vzťahov (1.23) a (1.24). Poznamenajme, že pri tejto metóde sa nevyskytuje fenomén falošných vlastných hodnôt.

3.4.1 Konštantný vzťah pre permeabilitu

Pre konštantnú permeabilitu (1.23) získavame nulovú dominantnú vlastnú hodnotu λ problému (2.31) s parametrami $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ pre vlnové čísla $k > 0$ a spektrálne rozlíšenie $n \in \{10, 12, \ldots, 40\}$, pričom príslušná maximálna absolútna chyba pre n a $n - 2$ dosahuje úroveň počítačovej presnosti.

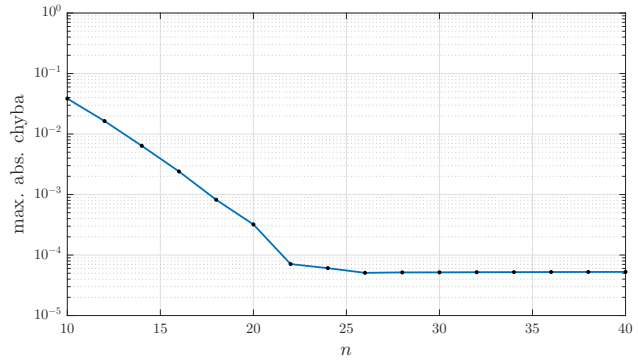
Poradie	λ
	$k > 0$
1	0
2	$-0,4863 + 4,4582\mathrm{i}$
3	$-0,4996 + 3,5533\mathrm{i}$
4	$-0,5005 + 2,8411\mathrm{i}$

Tabuľka 3.1: Dominantné vlastné hodnoty λ vzhľadom na ich reálnu časť problému (2.31) s permeabilitou (1.23), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ na intervale $[-10, 10]$ pre vlnové čísla $k > 0$ a spektrálne rozlíšenie $n = 30$.

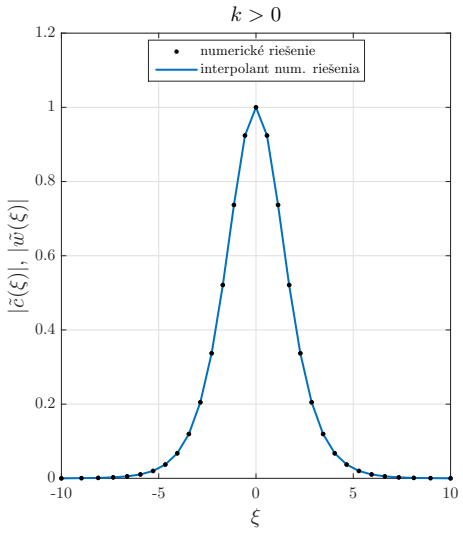
V tomto prípade sa magnitúdy amplitúdových funkcií $\tilde{c}(\xi)$ a $\tilde{w}(\xi)$ na intervale $[-10, 10]$ zhodujú (obr. 3.5). Funkcie amplitúdy $\tilde{u}(\xi)$, $\tilde{v}(\xi)$ a $\tilde{p}(\xi)$ dostávame nulové pre všetky kladné vlnové čísla a dominantné vlastné hodnoty $\lambda \approx 0$. Teda linearizované poruchy laminárneho prúdenia sú v koncentračných poliach c a w konštantné a v rýchlostnom a tlakovom poli zanedbateľné. Z existencie nulovej dominantnej vlastnej hodnoty vyplýva pre systém neutrálna stabilita.

Analogicky ako v sekcii 2.5.1 uvažujeme, že platí $\lambda \equiv 0$ a $\tilde{u}(\xi) \equiv 0$ pre vlnové čísla $k > 0$. Problém lineárnej stability (1.39) a (1.40) je potom ekvivalentný problému (2.33) a (1.40), ktorého riešenie sa dá vyjadriť v explicitnom tvare (2.36).

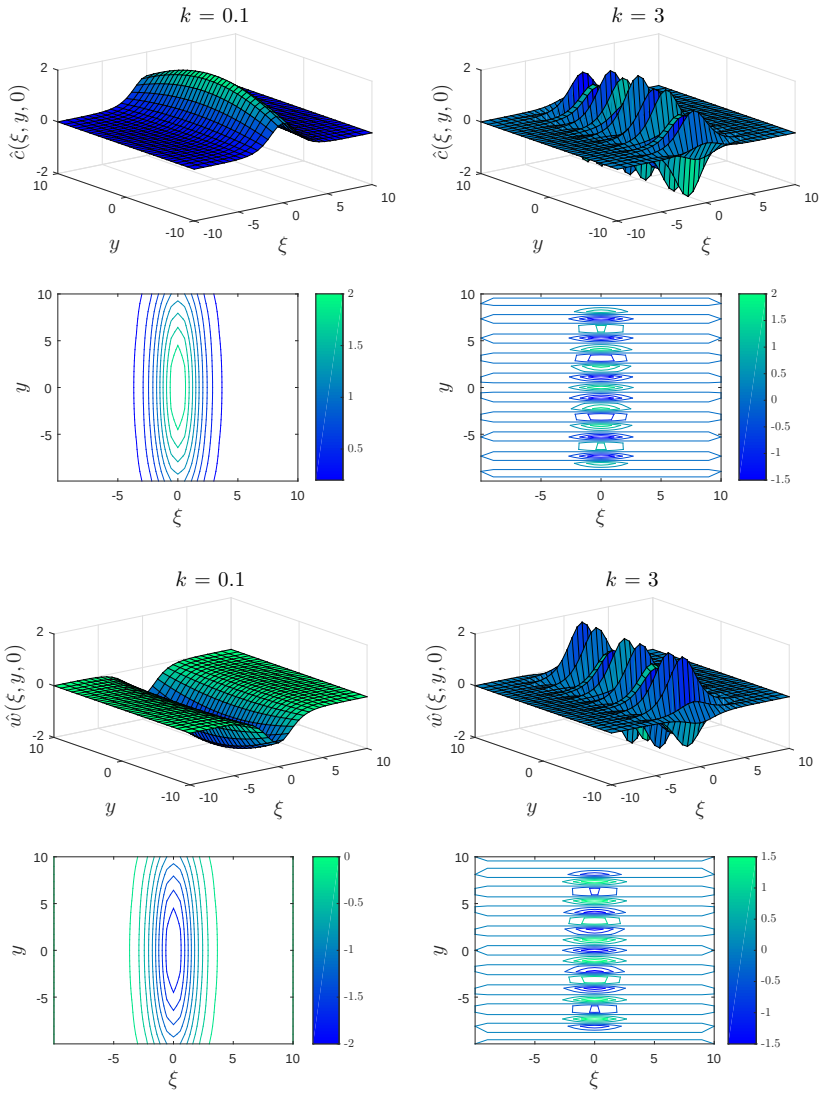
Maximálne absolútne chyby numerického riešenia problému (2.33) a (1.40) na intervale $[-10, 10]$ vypočítaného v programu `hermite_method.m` pre spektrálne rozlíšenie n v rozmedzí od 10 do 40 znázorníme na obrázku 3.4. Môžeme pozorovať, že presnosť riešenia sa pre n od 22 pohybuje na úrovni $\mathcal{O}(10^{-4})$.



Obr. 3.4: Hodnoty max. abs. chýb numerického riešenia problému (2.33) a (1.40) na intervale $[-10, 10]$ v závislosti od spektrálneho rozlíšenia n.



Obr. 3.5: Priebeh absolútnej hodnoty funkcií amplitúdy $\tilde{c}(\xi)$ a $\tilde{w}(\xi)$ na intervale $[-10, 10]$ pre vlnové čísla $k > 0$ a dominantné vlastné hodnoty $\lambda \approx 0$ problému (2.31) s permeabilitou (1.23), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ pre $n = 30$.



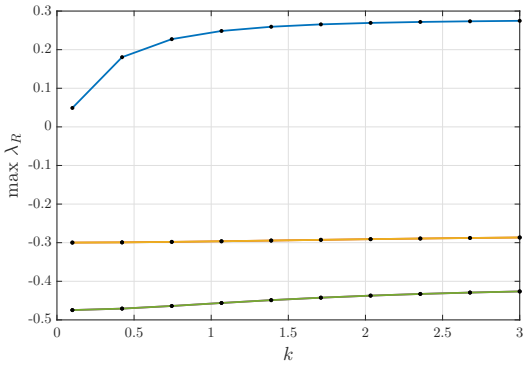
Obr. 3.6: Priebeh poruchových funkcií $\hat{c}(\xi, y, t)$ a $\hat{w}(\xi, y, t)$ pre oblasť $[\xi, y]$ na štvorci $[-10, 10] \times [-10, 10]$ a čas $t = 0$ pre vlnové čísla $k = 0,1$ a $k = 3$ a príslušné dominantné vlastné hodnoty $\lambda \approx 0$ problému (2.31) s permeabilitou (1.23), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ pre $n = 30$.

3.4.2 Exponenciálny vzťah pre permeabilitu

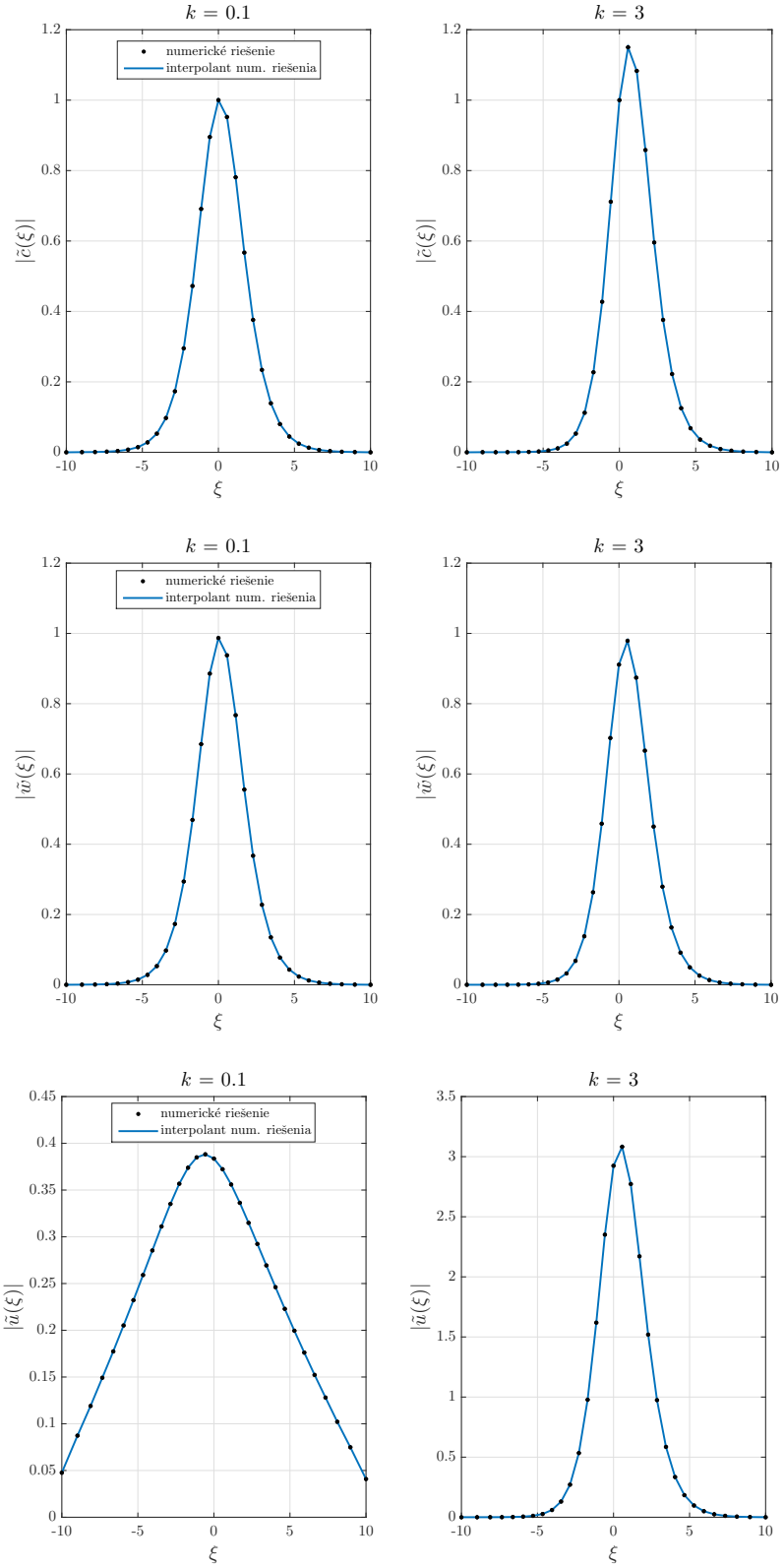
Z obrázka 3.7 vidieť, že existuje kladná dominantná vlastná hodnota pre $k > 0$, ktorá s rastúcim vlnovým číslom rastie a pre $k = 3$ je približne $0,35$. Podobne ako v kapitole 2 pri exponenciálne klesajúcej permeabilite získavame netriviálne linearizované poruchy v koncentračnom, rýchlostnom aj tlakovom poli, ktoré sa v čase ďalej zväčšujú a tým spôsobujú nestabilitu reaktívneho prúdenia.

n	$k = 0,1$		$k = 3$	
	λ	abs. chyba	λ	abs. chyba
20	$0,049$	$0,0021$	$0,2747$	$0,0151$
22	$0,0509$	$0,0019$	$0,2905$	$0,0158$
24	$0,0526$	$0,0017$	$0,3049$	$0,0145$
26	$0,0542$	$0,0016$	$0,319$	$0,014$
28	$0,0557$	$0,0015$	$0,3323$	$0,0134$
30	$0,0571$	$0,0014$	$0,3452$	$0,0129$

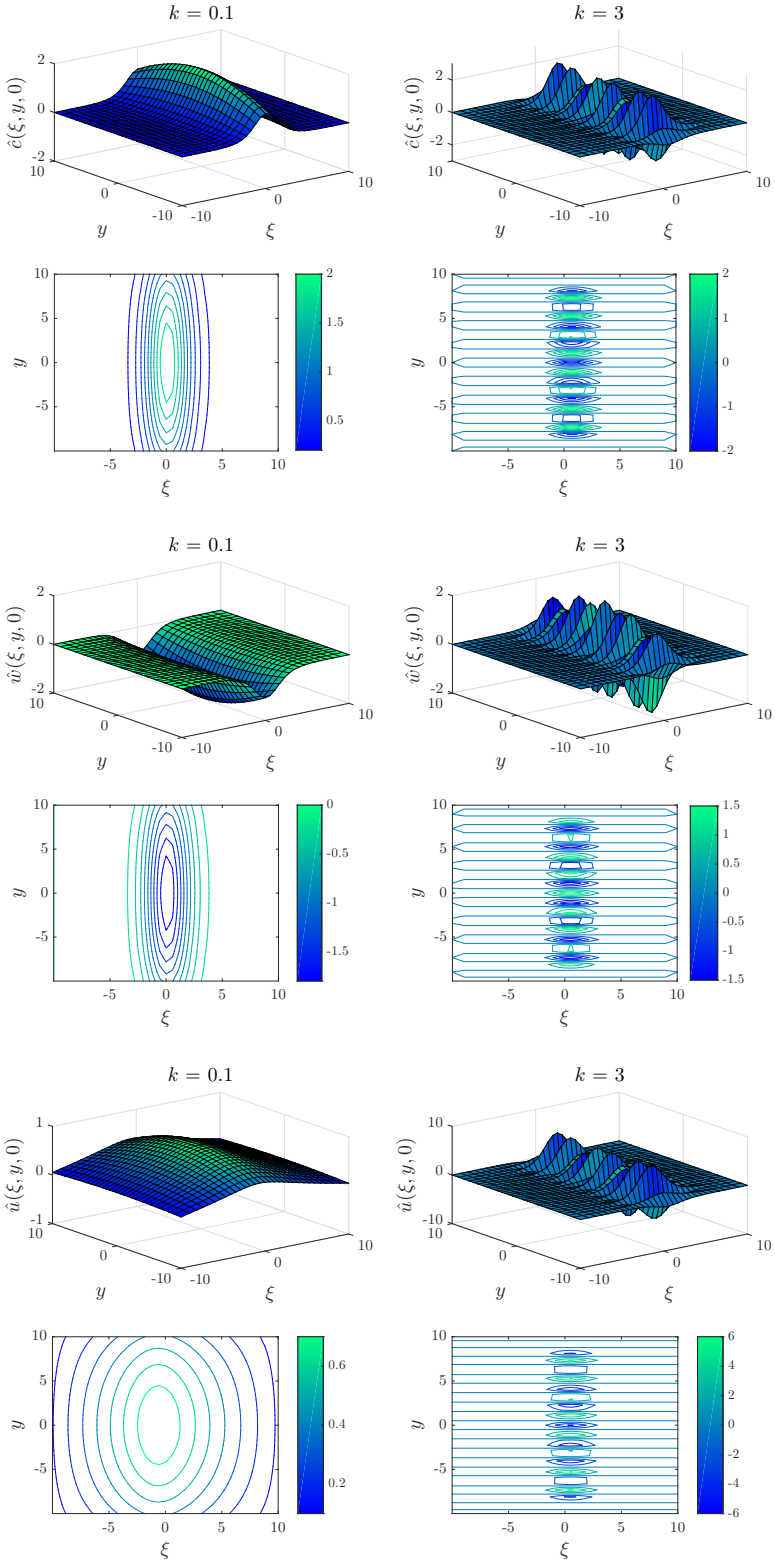
Tabuľka 3.2: Dominantné vlastné hodnoty λ vzhľadom na ich reálnu časť s príslušnou abs. chybou medzi vlastnými hodnotami pre n a $n-2$ problému (2.31) s permeabilitou (1.24), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ na intervale $[-10, 10]$ pre vlnové čísla $k = 0,1$ a $k = 3$ v závislosti od spektrálneho rozlíšenia n.



Obr. 3.7: Dominantné reálne vlastné hodnoty λ_R problému (2.31) s permeabilitou (1.24), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ na intervale $[-10, 10]$ pre $n = 20$ v závislosti od vlnového čísla k.



Obr. 3.8: Priebeh absolútnej hodnoty funkcií amplitúdy $\tilde{c}(\xi)$, $\tilde{w}(\xi)$ a $\tilde{u}(\xi)$ na intervale $[-10, 10]$ pre vlnové čísla $k = 0,1$ a $k = 3$ a príslušné dominantné vlastné hodnoty $\lambda \approx 0,0571$, resp. $\lambda \approx 0,3452$ problému (2.31) s permeabilitou (1.24), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ pre $n = 30$.



Obr. 3.9: Priebeh poruchových funkcií $\hat{c}(\xi, y, t)$, $\hat{w}(\xi, y, t)$ a $\hat{u}(\xi, y, t)$ pre oblasť $[\xi, y]$ na štvorci $[-10, 10] \times [-10, 10]$ a čas $t = 0$ pre vlnové čísla $k = 0,1$ a $k = 3$ a príslušné dominantné vlastné hodnoty $\lambda \approx 0,0571$, resp. $\lambda \approx 0,3452$ problému (2.31) s permeabilitou (1.24), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ pre $n = 30$.

3.5 Numerické výsledky využitím systému Matlab/Hydrostab

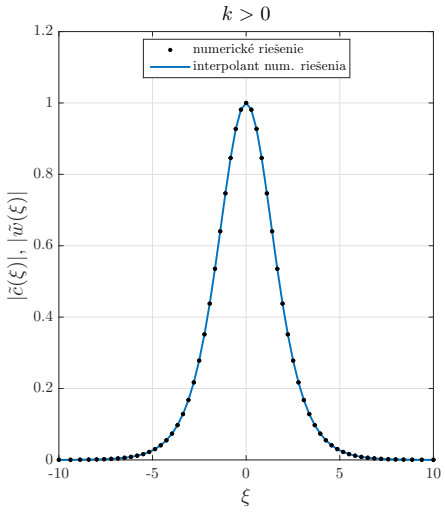
Výpočty realizujeme tiež v programe `compute_hydrostab.m` pre vlnové čísla $k > 0$. Numerické výsledky uvedieme pre jednotlivé permeabilitné vzťahy pri zvolenom spektrálnom rozlíšení $n = 60$, ktoré zaručuje vysokú presnosť riešenia.

3.5.1 Konštantný vzťah pre permeabilitu

V systéme Matlab/Hydrostab dostávame pre konštantnú permeabilitu dominantnú vlastnú hodnotu, ktorá je nulová pre kladné vlnové čísla k s presnosťou na úrovni $\mathcal{O}(10^{-14})$. Rovnako ako v prípade Hermitovej kolokačnej metódy linearizované poruchové funkcie $\hat{c}$ a $\hat{w}$ sú v čase konštantné a $\hat{u}$, $\hat{v}$ a $\hat{p}$ sú nulové.

Poradie	λ
	$k > 0$
1	0
2	$-0,5002 + 9,8261\mathrm{i}$
3	$-0,5002 + 5,7607\mathrm{i}$
4	$-0,5002 + 6,1009\mathrm{i}$

Tabuľka 3.3: Dominantné vlastné hodnoty λ vzhľadom na ich reálnu časť problému (2.31) s permeabilitou (1.23), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ na intervale $[-10, 10]$ pre vlnové čísla $k > 0$.



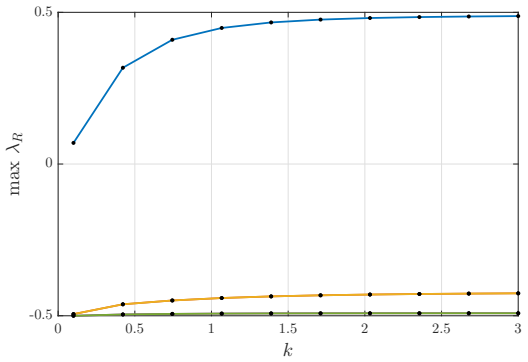
Obr. 3.10: Priebeh absolútnej hodnoty funkcií amplitúdy $\tilde{c}(\xi)$ a $\tilde{w}(\xi)$ na intervale $[-10, 10]$ pre vlnové čísla $k > 0$ a dominantné vlastné hodnoty $\lambda \approx 0$ problému (2.31) s permeabilitou (1.23), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$.

3.5.2 Exponenciálny vzťah pre permeabilitu

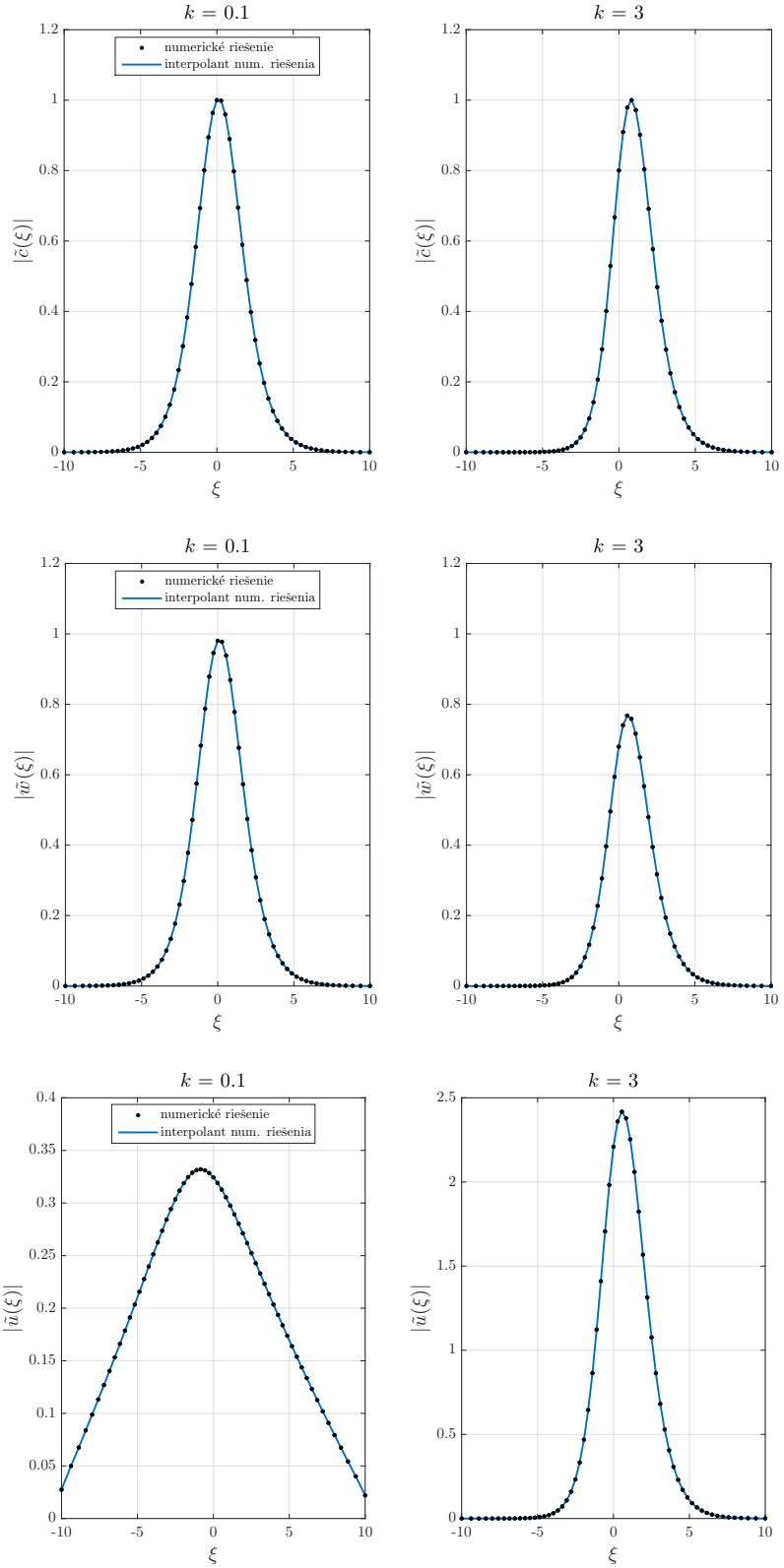
V prípade exponenciálneho vzťahu (1.24) získavame pre vlnové číslo $k = 0,1$ dominantnú vlastnú hodnotu $\lambda \approx 0,0697$ s presnosťou $\mathcal{O}(10^{-5})$ a pre $k = 3$ dominantná vlastná hodnota je $\lambda \approx 0,4876$, pričom presnosť dosahuje úroveň $\mathcal{O}(10^{-7})$ pre zvolené spektrálne rozlíšenie $n = 60$. Pre všetky kladné vlnové čísla existujú kladné dominantné vlastné hodnoty problému (2.31) s prislúchajúcimi netriviálnymi amplitúdovými, resp. poruchovými funkciami.

Poradie	λ	
	$k = 0,1$	$k = 3$
1	$0,0697$	$0,4876$
2	$-0,4947 + 0,1729\mathrm{i}$	$-0,4262 + 0,094\mathrm{i}$
3	$-0,5002 + 9,8261\mathrm{i}$	$-0,4918 + 0,4429\mathrm{i}$
4	$-0,5002 + 5,7607\mathrm{i}$	$-0,4961 + 0,7714\mathrm{i}$

Tabuľka 3.4: Dominantné vlastné hodnoty λ vzhľadom na ich reálnu časť problému (2.31) s permeabilitou (1.24), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ na intervale $[-10, 10]$ pre vlnové čísla $k = 0,1$ a $k = 3$.



Obr. 3.11: Dominantné reálne vlastné hodnoty λ_R problému (2.31) s permeabilitou (1.24), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$ na intervale $[-10, 10]$ v závislosti od vlnového čísla k.



Obr. 3.12: Priebeh absolútnej hodnoty funkcií amplitúdy $\tilde{c}(\xi)$, $\tilde{w}(\xi)$ a $\tilde{u}(\xi)$ na intervale $[-10, 10]$ pre vlnové čísla $k = 0,1$ a $k = 3$ a pre príslušné dominantné vlastné hodnoty $\lambda \approx 0,0697$ a $\lambda \approx 0,4876$ problému (2.31) s permeabilitou (1.24), $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$.

4 Metóda konečných prvkov

V tejto kapitole predstavíme metódu konečných prvkov a uvedieme výsledky numerickej simulácie získané aplikáciou tejto metódy v systéme COMSOL Multiphysics. Pre ilustráciu ukážeme najskôr implementáciu tejto metódy na jednoduchom dvojrozmernom príklade. Základné teoretické poznatky o existencii a konvergencii riešenia preberáme zo zdroja [11].

4.1 MKP pre 2D úlohy: Ilustratívny príklad

Uvažujme Poissonovu rovnicu v dvojrozmernom prípade v tvare

$$-\Delta u = f(\boldsymbol{x}), \qquad \boldsymbol{x} \in \Omega, \tag{4.1a}$$

$$u = 0, \qquad \boldsymbol{x} \in \partial\Omega, \tag{4.1b}$$

kde $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2)^T$, Ω je ohraničená dvojrozmerná oblasť s hranicou $\partial\Omega$, $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ je po častiach spojitá ohraničená funkcia na oblasti Ω a Laplaceov operátor Δ je definovaný ako

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2}.$$

Ďalej uvažujme lineárny priestor

$$V = \{v : v \text{ je spojitá na } \Omega, \frac{\partial v}{\partial x_1} \text{ a } \frac{\partial v}{\partial x_2} \text{ sú po častiach spojité na } \Omega \text{ a } v = 0 \text{ na } \partial\Omega\}. \tag{4.2}$$

Vynásobením rovnice (4.1a) ľubovoľnou funkciou $v \in V$, ktorá sa nazýva testovacia funkcia, integrovaním na oblasti Ω, využitím Greenovej formuly

$$\int_\Omega (v\Delta u + \boldsymbol{\nabla} u \cdot \boldsymbol{\nabla} v)\,\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2 = \oint_{\partial\Omega} v\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}}\,\mathrm{d}s,$$

kde $\partial u/\partial \boldsymbol{n}$ je derivácia u v smere vonkajšej normály $\boldsymbol{n}$ na element krivky $\mathrm{d}s$, a aplikovaním homogénnej hraničnej podmienky (4.1b) dostávame variačný problém pre funkciu $u \in V$ v tvare

$$a(u, v) = (f, v), \qquad v \in V, \tag{4.3}$$

kde

$$a(u, v) = \int_\Omega \boldsymbol{\nabla} u \cdot \boldsymbol{\nabla} v\,\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2, \qquad (u, v) = \int_\Omega fv\,\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2. \tag{4.4a,b}$$

Variačný problém (4.3) je ekvivalentný pôvodnému problému (4.1) za predpokladu, že derivácie $\partial^2 u/\partial x_1^2$ a $\partial^2 u/\partial x_2^2$ sú po častiach spojité a ohraničené na oblasti Ω.

Teraz je potrebné skonštruovať konečno-rozmerný podpriestor V_h priestoru V. Pre jednoduchosť uvažujme, že Ω je mnohouholníková oblasť, ktorú možno rozdeliť na množinu T_h neprekrývajúcich sa trojuholníkov K, t. j.

$$\Omega = \bigcup_{K \in T_h} K,$$

takých, že žiadny vrchol trojuholníka neleží na vnútornej hrane iného trojuholníka. Na meranie jemnosti triangularizovanej oblasti sa používa miera

$$h = \max_{K \in T_h} \operatorname{diam}(K), \qquad \text{kde} \quad \operatorname{diam}(K) = \text{ najdlhšia strana } K.$$

Vytvorený konečno-rozmerný priestor k uvažovanej množine T_h je

$$\begin{aligned} V_h = \{&v : v \text{ je spojitá na } \Omega, v \text{ je lineárna na každom trojuholníku } K \in T_h \\ &\text{a } v = 0 \text{ na } \partial\Omega\}, \end{aligned}$$

pričom zo vzťahu (4.2) vyplýva vlastnosť $V_h \subset V$.

Uvažujme, že množina T_h obsahuje n vnútorných vrcholov $\boldsymbol{x}_i$, kde $i = 1, 2, \ldots, n$, potom môžeme definovať bázovú funkciu $\phi_j \in V_h$ pre každý vnútorný vrchol, ktorá spĺňa vzťah

$$\phi_j(\boldsymbol{x}_i) = \begin{cases} 1, & \text{ak } i = j, \\ 0, & \text{ak } i \neq j. \end{cases} \tag{4.5}$$

Navyše, každá funkcia $v \in V_h$ má jednoznačnú reprezentáciu vo forme

$$v(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{n} v_j \phi_j(\boldsymbol{x}), \qquad \boldsymbol{x} \in \Omega, \tag{4.6}$$

kde $v_j = v(\boldsymbol{x}_j)$ pre každé j, čo znamená, že V_h je lineárny priestor dimenzie n tvorený bázovými funkciami $\{\phi_j\}_{j=1}^n$. Výberom bázovej funkcie ϕ_j sa dá výrazne ovplyvniť presnosť získaných výsledkov. Medzi typické bázové funkcie patria lineárne, kvadratické a kubické funkcie.

Na základe vyššie uvedeného možno problém (4.1) formulovať ako problém pre funkciu $u_h \in V_h$ v tvare

$$a(u_h, v) = (f, v), \qquad v \in V_h. \tag{4.7}$$

Po uvažovaní riešenia problému (4.7) v tvare

$$u_h(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{n} u_j \phi_j(\boldsymbol{x}), \qquad \boldsymbol{x} \in \Omega,$$

kde $u_j = u_h(\boldsymbol{x}_j)$ pre každé j, a zvolení $v = \phi_i(\boldsymbol{x})$ pre každé i dostávame

$$\sum_{j=1}^{n} a(\phi_j, \phi_i) u_j = (f, \phi_i), \qquad i = 1, 2, \ldots, n, \tag{4.8}$$

čo je lineárny systém n rovníc o n neznámych premenných u_j. Tento systém sa dá zapísať v nasledujúcej maticovej forme

$$A\boldsymbol{u} = \boldsymbol{F}, \tag{4.9}$$

kde A je $n \times n$ matica so zložkami $a(\phi_j, \phi_i)$ v i-tom riadku a j-tom stĺpci, $\boldsymbol{F} = (F_1, F_2, \ldots, F_n)^T$ je $n \times 1$ vektor so zložkami $F_i = (f, \phi_i)$ a $\boldsymbol{u} = (u_1, u_2, \ldots, u_n)^T$ je $n \times 1$ vektor so zložkami u_i, ktoré zodpovedajú numerickej aproximácii riešenia (4.1).

Všimnime si, že zložky matice A spĺňajú $a(\phi_j, \phi_i) = a(\phi_i, \phi_j)$ pre každé i a j. Pre maticu A zároveň platí nerovnosť

$$\boldsymbol{v}^T A \boldsymbol{v} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} v_j a(\phi_j, \phi_i) v_i = \int_\Omega \left[\left(\sum_{j=1}^{n} v_j \boldsymbol{\nabla} \phi_j \right) \cdot \left(\sum_{i=1}^{n} v_i \boldsymbol{\nabla} \phi_i \right) \right] \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2 \geq 0, \tag{4.10}$$

pričom rovnosť nastáva len vtedy, ak $\boldsymbol{\nabla} v = (0, 0)^T$, kde funkcia v je definovaná v tvare (4.6) a $\boldsymbol{v} = (v_1, v_2, \ldots, v_n)^T$ je $n \times 1$ vektor so zložkami v_j. Z podmienky $v = 0$ na hranici $\partial\Omega$ a spojitosti funkcie v vyplýva, že $\boldsymbol{\nabla} v = (0, 0)^T$ je ekvivalentné $v(\boldsymbol{x}) \equiv 0$ alebo $v_j = 0$ pre každé j. Teda matica A je symetrická a kladne definitná, čo zaručuje jej regularitu, t. j. lineárny systém (4.9) má jednoznačné riešenie.

4.2 Existencia a konvergencia riešenia

Uvažujme abstraktný variačný problém pre také $u \in V$, že

$$A(u, v) = F(v), \qquad v \in V, \tag{4.11}$$

kde $F \in V'$, V označuje reálny Hilbertov priestor a V' označuje duálny priestor k V. Nasledujúca Veta 4.1, ktorú preberáme z [11], hovorí o existencii a jednoznačnosti riešenia problému (4.11). Dôkaz tejto vety možno nájsť v [3].

Veta 4.1. *(Lax-Milgramova lema) Nech V je reálny Hilbertov priestor s normou $\|\cdot\|_V$, $A(\cdot,\cdot) : V \times V \to \mathbb{R}$ je kvadratická forma a $F(\cdot) : V \to \mathbb{R}$ je lineárny spojitý funkcionál. Navyše predpokladajme, že $A(\cdot,\cdot)$ je ohraničená zhora, t. j.*

$$\exists \beta > 0 : \qquad |A(w,v)| \leq \beta \|w\|_V \|v\|_V, \qquad \forall w, v \in V, \tag{4.12}$$

a špeciálne zdola, t. j.

$$\exists \alpha > 0 : \qquad |A(v,v)| \geq \alpha \|v\|_V^2, \qquad \forall v \in V. \tag{4.13}$$

Potom existuje jednoznačné riešenie $u \in V$ problému (4.11) *a platí*

$$\|u\|_V \leq \frac{1}{\alpha} \|F\|_{V'}, \tag{4.14}$$

kde V' označuje duálny priestor k V.

Ďalej uvažujme, že trieda konečno-rozmerných podpriestorov V_h je skonštruovaná na aproximovanie nekonečno rozmerného priestoru V, t. j.

$$\inf_{v_h \in V_h} \|v - v_h\|_V \to 0 \quad \text{pre} \quad h \to 0, \qquad v \in V.$$

Pomocou metódy konečných prvkov hľadáme pre problém (4.11) také $u_h \in V_h$, že platí

$$A(u_h, v_h) = F(v_h), \qquad v_h \in V_h. \tag{4.15}$$

O konvergencii riešenia u_h získaného touto metódou hovorí ďalšia Veta 4.2 uvedená spolu s dôkazom v [11].

Veta 4.2. *(Céaova lema) Za predpokladov Vety 4.1 existuje jednoznačné riešenie u_h problému* (4.15) *a platí*

$$\|u_h\|_V \leq \frac{1}{\alpha} \|F\|_{V'}. \tag{4.16}$$

Navyše, ak u označuje riešenie problému (4.11)*, potom*

$$\|u - u_h\|_V \leq \frac{\beta}{\alpha} \inf_{v_h \in V_h} \|u - v_h\|_V, \tag{4.17}$$

t. j. u_h konverguje k u pre $h \to 0$.

Dôkaz. Pre všetky $v_h \in V_h \subset V$ vyplýva z Vety 4.1 existencia jednoznačného riešenia $u_h \in V_h$, pre ktoré platí vzťah (4.16).

Zo vzťahov (4.11) a (4.15) dostávame

$$A(u - u_h, v_h) = 0, \qquad \forall \in V_h. \tag{4.18}$$

Po aplikovaní identity (4.18) a ohraničení (4.12) a (4.13) pre $A(\cdot, \cdot)$ platí nerovnosť

$$\alpha \|u - u_h\|_V^2 \leq |A(u - u_h, u - u_h)| = |A(u - u_h, u - v_h)| \leq \beta \|u - u_h\|_V \|u - v_h\|_V,$$

ktorá zodpovedá (4.17). □

4.3 Numerické riešenie využitím systému COMSOL Multiphysics

V systéme COMSOL Multiphysics numericky simulujeme bezrozmerný model reaktívneho prúdenia (1.17) a (1.18) definovaný na oblasti štvorca $L_x \times L_y$ vo vybraných časových úsekoch. Pri výpočte metódou konečných prvkov použijeme tzv. voľnú trojuholníkovú diskretizáciu určenú pre hydrodynamický problém s adaptívnym zjemňovaním (obr. 4.1b). Koncentračné pole pre rozpúšťadlo c a prímes w a tlakové pole p sú aproximované lineárnymi bázovými funkciami. Na modelovanie postupujúceho reakčného frontu potrebujeme dva rôzne integrované fyzikálne moduly – *Darcy's law (dl)* a *Transport of dilute species in porous media (tds)*. Výpočty realizujeme priamou metódou s absolútnou tolerančnou konštantou 0,01 pomocou tzv. MUMPS solvera, ktorý je založený na LU rozklade.

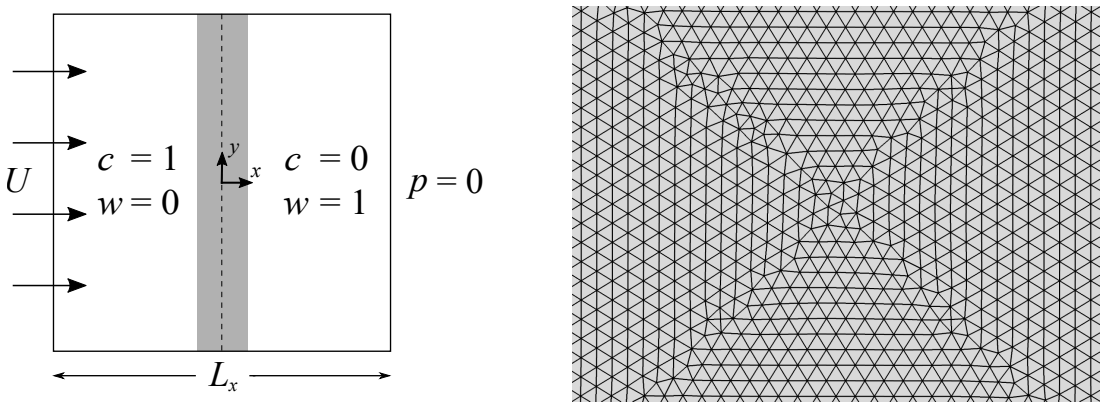
Rovnice použité v moduli *Darcy's law (dl)* pre popis prúdenia pomocou Darcyho zákona majú tvar

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_p \rho) + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho \boldsymbol{u}) = Q_m, \tag{4.19a}$$

$$\boldsymbol{u} = -\frac{\kappa}{\mu} \boldsymbol{\nabla} p, \tag{4.19b}$$

kde ϵ_p je pórovitosť média a ρ je hustota kvapalnej fázy. Pre konštantnú pórovitosť, konštantnú hustotu a nulový zdrojový člen ($Q_m = 0$) je rovnica kontinuity (4.19a) ekvivalentná rovnici (1.17d).

Počiatočná podmienka na hranici vtoku je $\boldsymbol{u} = (U, 0)^T$ a na hranici výtoku je $p = 0$. Žiadny tok nie je prítomný na horizontálnych hraniciach uvažovanej oblasti. Za počiatočnú podmienku pre tlak zvolíme profil tlaku pre laminárne prúdenie (1.22).



(a) (b)

Obr. 4.1: (a) Schematický diagram výpočtovej oblasti pre modelovanie reaktívneho prúdenia v pórovitom médiu. Prerušovaná čiara v sivom pásme znázorňuje rozhranie postupujúceho reakčného frontu v základnom stave. (b) Ilustrácia triangularizovanej výpočtovej oblasti, ktorá má maximálnu veľkosť elementu 0,268 a minimálnu 0,0008.

Modul *Transport of dilute species in porous media (tds)* použijeme na modelovanie presunu rozpúšťadla a zmeny koncentrácie rozpúšťadla a rozpustiteľnej látky v pórovitom médiu pri prúdení, ktoré sa riadi Darcyho zákonom. Model *(tds)* je popísaný nasledujúcimi rovnicami:

$$P_{1,i}\frac{\partial c_i}{\partial t} + P_{2,i} + \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\Gamma}_i = R_i + S_i, \tag{4.20a}$$

$$P_{1,i} = \epsilon_p, \tag{4.20b}$$

$$P_{2,i} = c_i\frac{\partial \epsilon_p}{\partial t}, \tag{4.20c}$$

$$\boldsymbol{N}_i = \boldsymbol{\Gamma}_i = -D_{e,i}\boldsymbol{\nabla}c_i + \boldsymbol{u}c_i, \tag{4.20d}$$

$$D_{e,i} = D_{F,i}, \tag{4.20e}$$

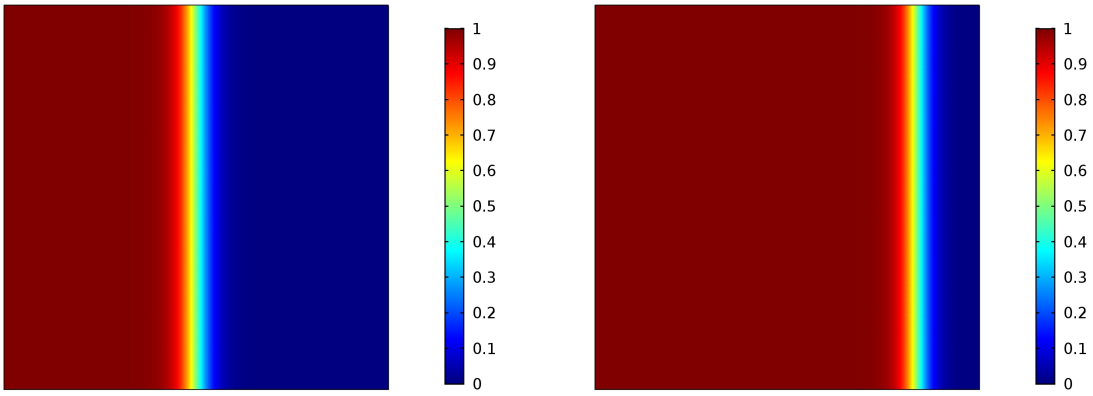
kde $\boldsymbol{\Gamma}_i$ je difúzny tok, R_i je reakčný rýchlostný člen, S_i je zdrojový člen, $D_{e,i}$ je efektívny difúzny koeficient, $D_{F,i}$ je molekulárny difúzny koeficient kvapalnej fázy i-tej zložky pre $i = 1, 2$. V rovniciach pre $i = 1, 2$ uvažujeme konštantnú pórovitosť ($\epsilon_p = 1$), $D_{F,i} = 0$ a $S_i = 0$. Potom rovnice (4.20a-e) pre $i = 1$ zodpovedajú rovnici pre koncentráciu rozpúšťadla (1.17a). Na získanie rovnice pre prímes (1.17b) vypustíme z rovnice (4.20a) pre $i = 2$ konvekčný člen $\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u}c_i$.

Koncentrácia rozpúšťadla a prímesi na hranici vtoku je $c = 1$, resp. $w = 0$ a na hra-

nici výtoku je $c = 0$, resp. $w = 1$. Na horizontálnych hraniciach nie sú dané žiadne podmienky na tok. Počiatočné podmienky pre koncentráciu rozpúšťadla a rozpustiteľnej látky definujeme ako ich profily pre základný stav (1.20a), resp. (1.20b). Model *(tds)* je zviazaný s modelom *(dl)* cez rýchlostné pole $\boldsymbol{u}$.

4.3.1 Konštantný vzťah pre permeabilitu

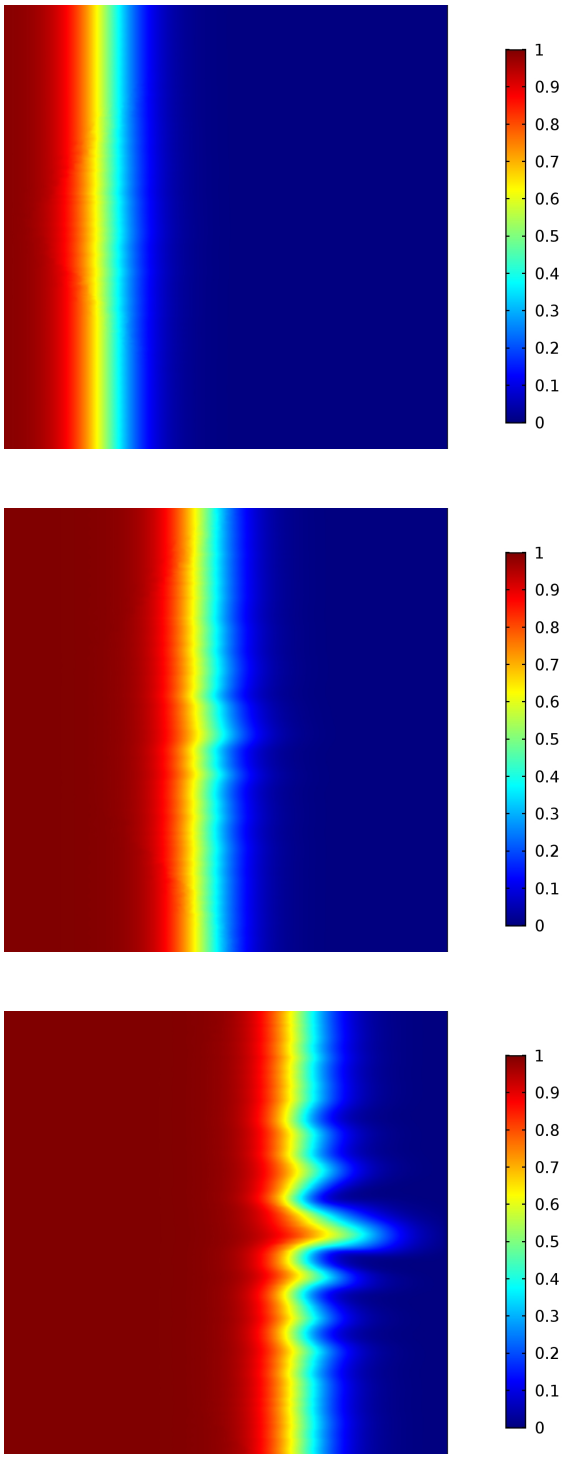
Po vykonaní výpočtov v systéme COMSOL Multiphysics pozorujeme, že pre konštantnú funkciu permeability (1.23) nevzniká s rastúcim časom nestabilita reaktívneho prúdenia. Na obrázku 4.2 je znázornené koncentračné pole rozpúšťadla c pre čas $t = 0$ a 15.



Obr. 4.2: Časo-priestorový vývoj koncentrácie rozpúšťadla c zobrazený pre $t = 0$ a 15 pre model (1.17) a (1.18) s permeabilitou (1.23), $L_x = 40$, $L_y = 40$, $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$.

4.3.2 Exponenciálny vzťah pre permeabilitu

Obrázok 4.3 ilustruje koncentračné pole rozpúšťadla c v časoch $t = 5; 10$ a 15. Z tohto obrázka vidieť, ako sa s rastúcim časom t objavujú poruchy základného stavu, ktoré formujú na rozhraní postupujúceho frontu efekt hrubnúcich prstov.



Obr. 4.3: Časo-priestorový vývoj koncentrácie rozpúšťadla c zobrazený pre $t = 5; 10$ a 15 pre model (1.17) a (1.18) s permeabilitou (1.24), $L_x = 40$, $L_y = 40$, $\alpha = 1$, $\phi = 0,11$ a $\delta = 3$.

Záver

Cieľom tejto diplomovej práce bolo analyzovať stabilitu reaktívneho prúdenia v pórovitom médiu pomocou spektrálnych numerických metód. Na charakterizovanie lineárnej stability sme aplikovali kolokačné metódy a pre porovnanie sme tento problém riešili aj inými nástrojmi založenými na tomto numerickom prístupe. V práci sme uviedli taktiež numerickú simuláciu pre prípad nelineárnej nestability.

V prvej kapitole sme predstavili základný model konvekcie v reaktívnych pórovitých prostrediach na dvojrozmernej neohraničenej oblasti podľa [8]. Za predpokladu homogénneho jednosmerného toku kvapalnej fázy a transformovaním systému do pohyblivej súradnicovej sústavy sme vyjadrili profily pre základný stav v explicitnom tvare. Výberom vhodných škál sme dostali bezrozmernú formuláciu modelu s tromi charakteristickými parametrami a bezrozmernými profilmi základného stavu pre koncentračné polia (1.20) a tlakové (1.22). Poruchy zapríčiňujúce nestabilitu systému predstavovali odchýlky v priestore a čase od základného stavu, ktoré spĺňali riadiace rovnice modelu. Linearizáciou porúch a ich rozkladom na nezávislé módy meniace sa v čase sme sformulovali problém lineárnej stability (1.39) a (1.40), ktorý vedie po diskretizácii a fixovaní parametra pre vlnové číslo na zovšeobecnený vlastnohodnotový problém.

V práci sme sa ďalej venovali detailnému odvodeniu zovšeobecneného vlastnohodnotového problému (2.31) implementáciou Čebyševovej a Hermitovej spektrálnej kolokačnej metódy. Numerické riešenie problému lineárnej stability sme hľadali pre konštantný a exponenciálne klesajúci vzťah permeability. Čebyševovou metódou sme pre konštantnú funkciu permeability dostali nulovú dominantnú vlastnú hodnotu a netriviálne vlastné vektory pre amplitúdové funkcie koncetračných polí pre všetky kladné vlnové čísla, čo znamenalo v zmysle stability neutrálne stabilné prúdenie. V prípade exponenciálneho vzťahu permeability boli pre všetky kladné vlnové čísla dominantné vlastné hodnoty väčšie ako nula. Zo štruktúry znázornených poruchových funkcii možno očakávať, že postupujúci reakčný front bude s rastúcim časom podliehať nestabilite typu fingering. Najväčšou nevýhodou pri riešení Čebyševovou metódou bola prítomnosť tzv. falošných vlastných hodnôt, ktoré sa objavovali pri zväčšovaní spektrálneho rozlíšenia. Na eliminovanie tohto javu sme popísali pomerne účinnú metódu, ktorá však pre veľké hodnoty spektrálneho rozlíšenia zlyhávala, čo ale tiež mohlo súvisieť so zlou podmie-

nenosťou celého systému. Určitý typ nestability sa vyskytol aj pri vlnových číslach blízkych nule. Podobnú kvalitu výsledkov sme získali aj v systéme Matlab/Chebfun.

Hermitova metóda bola druhou alternatívnou kolokačnou metódou, ktorá je špeciálne určená pre problémy definované na nekonečnej oblasti. Získané numerické výsledky pre problém lineárnej stability mali rovnaký charakter pre oba permeabilitné vzťahy ako v prípade Čebyševovej metódy. Hoci v porovnaní s predchádzajúcou metódou bola Hermitova stabilnejšia, s rastúcim spektrálnym rozlíšením vôbec nekonvergovala. Hlavnou nevýhodou tejto metódy je zväčšovanie spektrálneho rozlíšenia na získanie pomerne hladkých amplitúdových funkcií, keďže inak sa pri interpolácii numerického riešenia môže objavovať tzv. Rungeho fenomén zapríčinený nedostatočne hustou distribúciou kolokačných bodov pri okrajoch diskretizovanej oblasti. Problém lineárnej stability sme riešili v systéme Matlab/Hydrostab, pričom vypočítané dominantné vlastné hodnoty pre exponenciálnu funkciu permeability sa najviac zhodovali s numerickými výsledkami uverejnenými v [8].

V štvrtej kapitole sme aplikovali na bezrozmerný model reaktívneho prúdenia (1.17) a (1.18) metódu konečných prvkov použitím systému COMSOL Multiphysics. Numerické výsledky stability pre konštantnú aj exponenciálnu permeabilitu získané pre linearizované poruchy súhlasia s výsledkami metódou konečných prvkov. Navyše, v prípade nestability sme získali časo-priestorový vývoj koncentračného poľa rozpúšťadla s nelinearizovanými poruchami.

Zoznam použitej literatúry

[1] Boyd, J. P.: *Chebyshev and Fourier Spectral Methods*, Dover Publications, New York, 2000

[2] Chadam, J., et al.: *Reactive Infiltration Instabilities*, J. Appl. Maths. 36 (1986), 207–221

[3] Ciarlet, P. G.: *The Finite Element Method for Elliptic Problems*, North-Holland, Amsterdam, 1978

[4] Drazin, P. G.: *Introduction to Hydrodynamic Stability*, Cambridge University Press, Cambridge, 2002

[5] Driscoll, T. A., Hale, N., Trefethen, L. N.: *Chenfun Guide*, Pafnuty Publications, Oxford, 2014

[6] Guba, P., Anderson, D. M.: *Diffusive and phase change instabilities in a ternary mushy layer*, J. Fluid Mech. 760 (2014), 634–669

[7] Guba, P., Anderson, D. M.: *Pattern selection in ternary mushy layers*, J. Fluid Mech. 825 (2017), 853–886

[8] Hinch, E. J., Bhatt, B. S.: *Stability of an acid front moving through porous rock*, J. Fluid Mech. 212 (1990), 279–288

[9] Hurtiš, R.: *Využitie systému Chebfun/Matlab na riešenie diferenciálnych úloh*, Bakalárska práca, FMFI UK, Bratislava, 2017

[10] Kumar, A., Pramanik, S., Mishra, M.: *COMSOL multiphysics modeling in darcian and non-darcian porous media*, COMSOL Conference, Bangalore (2016)

[11] Li, J., Chen, Y.: *Computational partial differential equations using MATLAB*, Chapman and Hall/CRC, Boca Raton, 2008

[12] Szymczak, P., Ladd, A. J. C.: *Interacting length scales in the reactive-infiltration instability*, Geophys. Res. Lett. 40 (2013), 3036–3041

[13] Trefethen, L. N.: *Spectral Methods in MATLAB*, SIAM, Philadelphia, 2000

[14] Trefethen, L. N.: *Approximation Theory and Approximation Practice*, SIAM, Philadelphia, 2013

[15] Weideman, J. A. C., Reddy, S. C.: *A MATLAB Differentiation Matrix Suite*, ACM Trans. Math. Software 26 (2000), 465–519

Príloha A

V tomto dodatku uvádzame krátky súhrn niektorých poznatkov z teórie Čebyševových polynómov [1, 14], ktoré využívame pri dôkaze Vety 2.1 o štruktúre Čebyševovej diferenčnej matice.

A.1 Čebyševove polynómy

Definícia A.1. *Čebyševov polynóm stupňa n na intervale $[-1, 1]$ je definovaný ako*

$$T_n(x) = \cos(n\theta), \qquad n \geq 0, \tag{A.1}$$

kde $x = \cos\theta$ pre $x \in [-1, 1]$.

Poznámka: Hodnoty Čebyševových polynómov v krajných bodoch ± 1 sú $T_n(1) = 1$ a $T_n(-1) = (-1)^n$ pre každé n. Z uvedeného vzťahu (A.1) vyplýva, že T_n spĺňa $-1 \leq T_n(x) \leq 1$ pre všetky $x \in [-1, 1]$. Extremálne body Čebyševovho polynómu T_n (Chebyshev extreme points), v ktorých nadobúda hodnoty ± 1, možno vyjadriť predpisom (2.1).

A.2 Derivácie Čebyševových polynómov

Definícia A.2. *Čebyševova diferenciálna rovnica druhého rádu má tvar*

$$(1 - x^2)\frac{\mathrm{d}^2 T_n(x)}{\mathrm{d}x^2} - x\frac{\mathrm{d}T_n(x)}{\mathrm{d}x} + n^2 T_n(x) = 0, \qquad x \in [-1, 1], \tag{A.2}$$

kde $n \geq 0$.

Veta A.2. *Derivácie Čebyševovho polynómu T_n prvého rádu v krajných bodoch sú v tvare*

$$\left.\frac{\mathrm{d}T_n(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=1} = n^2, \qquad \left.\frac{\mathrm{d}T_n(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=-1} = -(-1)^n n^2 \tag{A.3}$$

a druhého rádu

$$\left.\frac{\mathrm{d}^2 T_n(x)}{\mathrm{d}x^2}\right|_{x=1} = \frac{1}{3}(n^2 - 1)n^2, \qquad \left.\frac{\mathrm{d}^2 T_n(x)}{\mathrm{d}x^2}\right|_{x=-1} = \frac{(-1)^n}{3}(n^2 - 1)n^2, \tag{A.4}$$

kde $n \geq 0$.

Dôkaz. Derivácie Čebyševových polynómov prvého a druhého rádu vyplývajú z tvaru Čebyševovej diferenciálnej rovnice (A.2). □

Príloha B

V tejto časti sú uvedené výpisy kódov z programov softvérového systému Matlab.

```
%%% Konštrukcia Čebyševovej diferenčnej matice D na množine n+1 Čebyševových
%%% bodov x

function [D,x] = cheb(n)

if n == 0, D = 0; x = 1; return, end

x = cos(pi*(0:n)/n)';

c = [2; ones(n-1,1); 2].*(-1).^(0:n)';
X = repmat(x,1,n+1);
dX = X-X';

D = (c*(1./c)')./(dX+(eye(n+1))); % nediagonálne prvky
D = D - diag(sum(D')); % diagonálne prvky
```

Obr. B.1: Výpis programu `cheb.m` [13].

```
%%% Výpočet minimálnej absolútnej chyby (difference) medzi reálnymi vlastnými
%%% hodnotami bez komplexných párov (lambda_real) pre hodnoty spektrálneho
%%% rozlíšenia n a n-dif a zvolenú tolerančnú chybu (error)

function [difference,arg_lam,lambdaNP1]=get_min_nearest_difference(LAM,n,dif,error)

n1 = n;
n2 = n1-dif;

if n2 > 0

lambda1(1,1) = LAM(1,n1);
lambda1(1,2) = 1;
lambda1(:,3) = 0;
i = 2; j = 2;

while i <= length(LAM(:,n1))

   if LAM(i,n1) == 0 || (real(LAM(i,n1)) == real(LAM(i-1,n1)))
     i = i + 1;
   else
     lambda1(j,1) = LAM(i,n1);
     lambda1(j,2) = i;

     if lambda1(j-1,1) > 0 && LAM(i,n1) < 0
     lambda1(j,3) = j;
     end

    i = i + 1;
    j = j + 1;
   end

end
lambdaNP1 = real(lambda1(:,1));

lambda2(1,1) = LAM(1,n2);
i = 2; j = 2;

while i <= length(LAM(:,n2))

   if LAM(i,n2) == 0 || (real(LAM(i,n2)) == real(LAM(i-1,n2)))
     i = i + 1;
   else
     lambda2(j,1) = LAM(i,n2);
     i = i + 1;
     j = j + 1;

   end

end
lambdaNP2 = real(lambda2');

NM = length(lambdaNP1);

delta_nearest = zeros(NM,1);
jj = 1;
difference = Inf;

while difference > error

```

Obr. B.2: Výpis programu `get_min_nearest_difference.m` (1. časť).

```
61      delta_nearest(jj,1) = min( abs(lambdaNP1(jj,1) - lambdaNP2) );
62
63      difference = delta_nearest(jj,1);
64
65      jj = jj + 1;
66
67      if jj > NM
68
69      [difference,arg_lam] = min(delta_nearest);
70      break
71
72      end
73
74  end
75
76  arg_lam = lambda1(jj-1,2);
77
78  else
79
80  difference = Inf;
81  arg_lam = 1;
82
83  end
```

Obr. B.3: Výpis programu `get_min_nearest_difference.m` (2. časť).

```
%%% Riešenie zovšeobecneného vlastnohodnotového problému
%%% implementovaním Čebyševovej spektrálnej kolokačnej metódy

clc; clear;
close all;
format long;

% Počiatočné parametre
N = 30; % spektrálne rozlíšenie
i = 20; n = i;
tol = 1e-2;
LAM = zeros(3*N-1,N);

fprintf('=================================================== \n');
fprintf('  n  |   Max. real. lambda   |    Min delta nearest   \n');
fprintf('=================================================== \n');
while n < N
% Počet uzlových bodov = n + 1
n = i;

% Zúženie nekonečnej oblasti na interval [a,b]
d = 10;
a = -d; b = d;

% Predpísané parametre
alpha = 1; phi = 0.11; delta = 3;
% vlnové číslo
k = 0.1; % k = 0.1; k = 3;

% Funkcie cbar, wbar a ubar a ich derivácie dcbar a dwbar
cbar = @(x) 1./(1+exp(x));
wbar = @(x) exp(x)./(1+exp(x));
ubar = phi+1/alpha;
dcbar = @(x) -exp(x)./((1+exp(x)).^2);
dwbar = @(x) exp(x)./((1+exp(x)).^2);

% Funkcia permeability kappa, jej inverzná funkcia invkappa a derivácia dkappa
% konštantný vzťah:
kappa = @(x) ones(length(x),1)/(1+delta);
invkappa = @(x) ones(length(x),1)*(1+delta);
dkappa = @(x) zeros(length(x),1);
% exponenciálny vzťah:
% kappa = @(x) exp(-delta*x);
% invkappa = @(x) exp(delta*x);
% dkappa = @(x) -delta*exp(-delta*x);

% Konštrukcia Čebyševových bodov zeta a Čebyševovej diferenčnej matice D1,
% resp. D2, pomocou programu cheb.m
[D1,zeta] = cheb(n);
D2 = D1^2;

% Preškálovanie Čebyševových bodov na interval [a,b]
r = (b-a)/2; s = (a+b)/2;
xi = r*zeta + s; % zeta z [-1,1] a xi z [a,b]

% Matica A rozmeru (3n+3)x(3n+3)
A = [alpha*(ubar-phi)*D1/r + diag(wbar(xi)), diag(cbar(xi)), alpha*diag(dcbar(xi))/r;
     diag(wbar(xi)), -D1/r + diag(cbar(xi)), zeros(n+1);
     zeros(n+1), (k^2)*ubar*diag(invkappa(wbar(xi)).*dkappa(wbar(xi))), ...
     -diag(invkappa(wbar(xi)).*dkappa(wbar(xi)).*dwbar(xi))*D1/(r^2) + D2/(r^2) ...
```

Obr. B.4: Výpis programu `chebyshev_method.m` (1. časť).

```
61      - (k^2)*eye(n+1)];
62
63 % Matica B rozmeru (3n+3)x(3n+3)
64 B = -[alpha*phi*eye(n+1), zeros(n+1), zeros(n+1);
65       zeros(n+1), eye(n+1), zeros(n+1);
66       zeros(n+1,3*(n+1))];
67
68 % Hraničné podmienky ctilde_0 = 0, ctilde_n = 0, wtilde_0 = 0, wtilde_n = 0:
69 %  zmazanie 4 rovníc pre ctilde_0, ctilde_n, wtilde_0 a wtilde_n
70 A1 = [A(2:n,:); A(n+3:2*n+1,:); A(2*n+3:3*n+3,:)];
71 B1 = [B(2:n,:); B(n+3:2*n+1,:); B(2*n+3:3*n+3,:)];
72 %  zmazanie 4 stĺpcov pre premenné ctilde_0, ctilde_n, wtilde_0 a wtilde_n
73 Atilde = [A1(:,2:n), A1(:,n+3:2*n+1), A1(:,2*n+3:3*n+3)];
74 Btilde = [B1(:,2:n), B1(:,n+3:2*n+1), B1(:,2*n+3:3*n+3)];
75
76 % Výpočet spektra vlastných hodnôt (matica E) a prislúchajúcich vlastných
77 % vektorov (matica V)
78 [V,E] = eig(Atilde,Btilde);
79
80 % Usporiadanie vypočítaných vlastných hodnôt (eig_sorted) podľa reálnej
81 % časti zostupne pomocou programu sort_eigs_real.m
82 [eig_sorted,eig_label,beta] = sort_eigs_real(diag(E));
83
84 % Výpočet minimálnej absolútnej chyby (difference) medzi reálnymi vlastnými
85 % hodnotami bez komplexných párov (lambda_real) pre hodnoty spektrálneho
86 % rozlíšenia n a n-2 a zvolenú tolerančnú chybu (tol) pomocou programu
87 % get_min_nearest_difference.m
88 LAM(1:length(eig_sorted),i) = eig_sorted;
89 [difference,arg_eig_sorted,lambda_real] = get_min_nearest_difference(LAM,n,2,tol);
90
91 % Dominantná vlastná hodnota po eliminácii falošných vlastných hodnôt
92 lambda = eig_sorted(arg_eig_sorted);
93
94 % Prislúchajúci vlastný vektor ftilde k dominantnej vlastnej hodnote
95 index = eig_label(arg_eig_sorted);
96 ftilde = V(:,index);
97
98 i = i + 2;
99
100 % Výpis n, max. reálnej vlastnej hodnoty a min. abs. reálnej chyby
101 fprintf('%3d  |  %+-19.13f  |  %19.15f  \n',n,real(lambda),difference);
102 end
103 fprintf('======================================================= \n');
104
105 % Eliminácia nekonečných vlastných hodnôt
106 for j = 1:length(eig_sorted)
107    if beta(j) == 0, break; else lam(j,1) = eig_sorted(j); end
108 end
109
110 % Zhrnutie výsledkov
111 % vlastné hodnoty:
112 vlastne_hodnoty = lam;
113 max_vlastna_hodnota = lambda;
114
115 % vlastný vektor prislúchajúci k dominantnej vlastnej hodnote:
116 ctilde = [0;V(1:n-1,index);0];
117 wtilde = [0;V(n:2*n-2,index);0];
118 utilde = V(2*n-1:3*n-1,index);
119 vlastny_vektor = [ctilde;wtilde;utilde];
```

Obr. B.5: Výpis programu `chebyshev_method.m` (2. časť).

```
%%% Riešenie zovšeobecneného vlastnohodnotového problému
%%% využitím systému Matlab/Chebfun

clc; clear;
close all;
format long;

% Predpísané parametre
alpha = 1; phi = 0.11; delta = 3;
% vlnové číslo
k = 0.1; % k = 0.1; k = 3

% Zúženie nekonečnej oblasti na interval [a,b]
d = 10;
a = -d; b = d;

% Konštrukcia funkcie chebfun
x = chebfun('x', [a,b]);

% Funkcie cbar, wbar a ubar a ich derivácie dcbar a dwbar
cbar = chebfun(@(x) 1./(1+exp(x)), [a,b]);
wbar = chebfun(@(x) exp(x)./(1+exp(x)), [a,b]);
ubar = phi+1/alpha;
dcbar = chebfun(@(x) -exp(x)./((1+exp(x)).^2), [a,b]);
dwbar = chebfun(@(x) exp(x)./((1+exp(x)).^2), [a,b]);

% Funkcia permeability kappa, jej inverzná funkcia invkappa a derivácia dkappa
% konštantný vzťah:
kappa = 1/(1+delta) + 0.*wbar;
invkappa = 1./kappa;
dkappa = 0.*wbar;
% exponenciálny vzťah:
% kappa = exp(-delta*wbar);
% invkappa = 1./kappa;
% dkappa = -delta*exp(-delta*wbar);

% Konštrukcia operátorov chebfun
A = chebop(a,b);
B = chebop(a,b);

% Operátor pre maticu A
A.op = @(x,chat,what,uhat) [ ...
       -alpha*phi*diff(chat)+alpha*ubar*diff(chat)+alpha*uhat.*dcbar(x)+ ...
        wbar(x).*chat+cbar(x).*what; ....
       -diff(what)+wbar(x).*chat+cbar(x).*what; ...
        diff(uhat,2)-invkappa.*dkappa.*dwbar.*diff(uhat)-k^2*uhat+ ...
        k^2*ubar*invkappa.*dkappa.*what];

% Operátor pre maticu B
B.op = @(x,chat,what,uhat) [ ...
       -alpha*phi*chat; ...
       -what; ...
        0*uhat];

% Hraničné podmienky pre A
A.bc = @(x,chat,what,uhat)[...
       chat(a); ...
       chat(b); ...
       what(a); ...
       what(b)];
```

Obr. B.6: Výpis programu `compute_chebfun.m` (1. časť).

```
61
62 % Počet vlastných čísel s najväčšou magnitúdou
63 eig_num = 4; % eig_num =4; eig_num = 5;
64
65 % Výpočet spektra vlastných hodnôt (matica E) a prislúchajúcich vlastných
66 % vektorov (matica V) (s najväčšou magnitúdou)
67 [V,E] = eigs(A,B,eig_num);
68
69 % Usporiadanie vypočítaných vlastných hodnôt (eig_sorted) podľa reálnej
70 % časti zostupne pomocou programu sort_eigs_real.m
71 [eig_sorted,eig_label,beta] = sort_eigs_real(diag(E));
72
73 % Dominantná vlastná hodnota
74 lambda = eig_sorted(1);
75
76 % Zhrnutie výsledkov
77 % vlastné hodnoty:
78 vlastne_hodnoty  = eig_sorted;
79 max_vlastna_hodnota = lambda;
80
81 % vlastný vektor prislúchajúci k dominantnej vlastnej hodnote:
82 ctilde = V{1,eig_label(1)};
83 wtilde = V{2,eig_label(1)};
84 utilde = V{3,eig_label(1)};
85 vlastny_vektor = [ctilde;wtilde;utilde];
```

Obr. B.7: Výpis programu `compute_chebfun.m` (2. časť).

```
%%% Riešenie zovšeobecneného vlastnohodnotového problému
%%% implementovaním Hermitovej spektrálnej kolokačnej metódy

clc; clear;
close all;
format long;

% Počiatočné parametre
N = 30; % spektrálne rozlíšenie
i = 20; n = i;
lambda_old = Inf;

fprintf('=================================================== \n');
fprintf('  n   |    Max. real. lambda    |     Abs. real. chyba  \n');
fprintf('=================================================== \n');
while n < N
% Počet uzlových bodov = n + 1
n = i;

% Zúženie nekonečnej oblasti na interval [a,b]
d = 10;
a = -d; b = d;

% Predpísané parametre
alpha = 1; phi = 0.11; delta = 3;
% vlnové číslo
k = 0.1; % k = 0.1; k = 3;

% Funkcie cbar, wbar a ubar a ich derivácie dcbar a dwbar
cbar = @(x) 1./(1+exp(x));
wbar = @(x) exp(x)./(1+exp(x));
ubar = phi+1/alpha;
dcbar = @(x) -exp(x)./((1+exp(x)).^2);
dwbar = @(x) exp(x)./((1+exp(x)).^2);

% Funkcia permeability kappa, jej inverzná funkcia invkappa a derivácia dkappa
% konštantný vzťah:
kappa = @(x) ones(length(x),1)/(1+delta);
invkappa = @(x) ones(length(x),1)*(1+delta);
dkappa = @(x) zeros(length(x),1);
% exponenciálny vzťah:
% kappa = @(x) exp(-delta*x);
% invkappa = @(x) exp(delta*x);
% dkappa = @(x) -delta*exp(-delta*x);

% Konštrukcia Hermitových bodov zeta a Hermitovej diferenčnej matice D1,
% resp. D2, pomocou programu herdif.m
[zeta,D] = herdif(n+1,2,1);
D1 = D(:,:,1);
D2 = D(:,:,2);

% Preškálovanie Hermitových bodov na interval [a,b]
r = (b-a)/(2*zeta(n+1)); s = (a+b)/2;
xi = r*zeta + s; % zeta z [-1,1] a xi z [a,b]

% Matica A rozmeru (3n+3)x(3n+3)
A = [alpha*(ubar-phi)*D1/r + diag(wbar(xi)), diag(cbar(xi)), alpha*diag(dcbar(xi))/r;
     diag(wbar(xi)), -D1/r + diag(cbar(xi)), zeros(n+1);
     zeros(n+1), (k^2)*ubar*diag(invkappa(wbar(xi)).*dkappa(wbar(xi))), ...
     -diag(invkappa(wbar(xi)).*dkappa(wbar(xi)).*dwbar(xi))*D1/(r^2) + D2/(r^2) ...
```

Obr. B.8: Výpis programu `hermite_method.m` (1. časť).

```
61      - (k^2)*eye(n+1)];
62
63 % Matica B rozmeru (3n+3)x(3n+3)
64 B = -[alpha*phi*eye(n+1), zeros(n+1), zeros(n+1);
65       zeros(n+1), eye(n+1), zeros(n+1);
66       zeros(n+1,3*(n+1))];
67
68 % Hraničné podmienky ctilde_0 = 0, ctilde_n = 0, wtilde_0 = 0, wtilde_n = 0:
69 %  zmazanie 4 rovníc pre ctilde_0, ctilde_n, wtilde_0 a wtilde_n
70 A1 = [A(2:n,:); A(n+3:2*n+1,:); A(2*n+3:3*n+3,:)];
71 B1 = [B(2:n,:); B(n+3:2*n+1,:); B(2*n+3:3*n+3,:)];
72 %  zmazanie 4 stĺpcov pre premenné ctilde_0, ctilde_n, wtilde_0 a wtilde_n
73 Atilde = [A1(:,2:n), A1(:,n+3:2*n+1), A1(:,2*n+3:3*n+3)];
74 Btilde = [B1(:,2:n), B1(:,n+3:2*n+1), B1(:,2*n+3:3*n+3)];
75
76 % Výpočet spektra vlastných hodnôt (matica E) a prislúchajúcich vlastných
77 % vektorov (matica V)
78 [V,E] = eig(Atilde,Btilde);
79
80 % Usporiadanie vypočítaných vlastných hodnôt (eig_sorted) podľa reálnej
81 % časti zostupne pomocou programu sort_eigs_real.m
82 [eig_sorted,eig_label,beta] = sort_eigs_real(diag(E));
83
84 % Dominantná vlastná hodnota
85 lambda = eig_sorted(1);
86
87 % Výpočet absolútnej reálnej chyby (difference) medzi reálnymi vlastnými
88 % hodnotami pre hodnoty spektrálneho rozlíšenia n a n-2
89 difference = abs(real(lambda-lambda_old));
90 lambda_old = lambda;
91
92 % Prislúchajúci vlastný vektor ftilde k dominantnej vlastnej hodnote
93 index = eig_label(1);
94 ftilde = V(:,index);
95
96 i = i + 2;
97
98 % Výpis n, max. reálnej vlastnej hodnoty a min. abs. reálnej chyby
99 fprintf('%3d  |  %+-19.13f  |  %19.15f  \n',n,real(lambda),difference);
100 end
101 fprintf('=========================================================== \n');
102
103 % Eliminácia nekonečných vlastných hodnôt
104 for j = 1:length(eig_sorted)
105    if beta(j) == 0, break; else lam(j,1) = eig_sorted(j); end
106 end
107
108 % Zhrnutie výsledkov
109 % vlastné hodnoty:
110 vlastne_hodnoty = lam;
111 max_vlastna_hodnota = lambda;
112
113 % vlastný vektor prislúchajúci k dominantnej vlastnej hodnote:
114 ctilde = [0;V(1:n-1,index);0];
115 wtilde = [0;V(n:2*n-2,index);0];
116 utilde = V(2*n-1:3*n-1,index);
117 vlastny_vektor = [ctilde;wtilde;utilde];
```

Obr. B.9: Výpis programu `hermite_method.m` (2. časť).

```
%%% Riešenie problému lineárnej stability využitím systému Matlab/Hydrostab

clc; clear;
close all;
format long;
warning off;

% Počiatočné parametre
N = 60; % spektrálne rozlíšenie
i = 50; n = i;
lambda_old = Inf;

fprintf('=================================================== \n');
fprintf('  n  |   Max. real. lambda   |     Abs. real. chyba  \n');
fprintf('=================================================== \n');
while  n < N
% Počet uzlových bodov = n + 1
n = i;

% Zúženie nekonečnej oblasti na interval [-d,d]
d = 10;

% Predpísané parametre
alpha = 1; phi = 0.11; delta = 3;
% vlnové číslo
k = 3; % k = 0.1; k = 3

% Konštrukcia objektu hydrostab
% zmena označenia: xi -> y; y -> x
% normálne módy v tvare exp(i*k*x-i*lambda*t)
hs = hydrostab(1);

% Funkcie cbar, wbar a ubar a ich derivácie dcbar a dwbar
cbar = func('1/(1+exp(y))');
wbar = func('exp(y)/(1+exp(y))');
ubar = phi+1/alpha;
dcbar = func('-exp(y)/((1+exp(y))^2)');
dwbar = func('exp(y)/((1+exp(y))^2)');

% Funkcia permeability kappa, jej inverzná funkcia invkappa a derivácia dkappa
% konštantný vzťah:
kappa = 1/(1+delta);
invkappa = 1+delta;
dkappa = 0;
% exponenciálny vzťah:
% kappa = func(@(y) exp(-delta*exp(y)/(1+exp(y))));
% invkappa = func(@(y) exp(delta*exp(y)/(1+exp(y))));
% dkappa = func(@(y) -delta*exp(-delta*exp(y)/(1+exp(y))));

% Oblasť a počet kolokačných bodov pre hs
hs = set_interval(hs,1,-Inf,Inf,n+1);

% Zúženie na interval [-d,d]
hs = setscale(hs,1,d);

% Fixovanie vlnového čísla k
hs = setk(hs,k);

% Premenné chat, what a uhat
hs = addvar(hs,1,'chat','what','uhat');
```

Obr. B.10: Výpis programu `compute_hydrostab.m` (1. časť).

```
61
62 % Systém rovníc
63 hs = addeq(hs,alpha*phi*dt(chat)-alpha*phi*dy(chat)+alpha*ubar*dy(chat) ...
64      +alpha*uhat*dcbar+chat*wbar+what*cbar==0);
65 hs = addeq(hs,dt(what)-dy(what)+chat*wbar+what*cbar==0);
66 hs = addeq(hs,dy2(uhat)-invkappa*dkappa*dwbar*dy(uhat)+dx2(uhat) ...
67      -(phi+1/alpha)*invkappa*dkappa*dx2(what)==0);
68
69 % Výpočet spektra vlastných hodnôt
70 hs = compute(hs);
71
72 % Eliminácia nekonečných (veľkých) vlastných hodnôt
73 eige = eigenvalue(hs,1e8);
74
75 % Usporiadanie vypočítaných vlastných hodnôt (eig_sorted) podľa imaginárnej
76 % časti zostupne pomocou programu sort_eigs.m
77 [eig_sorted,eig_label,beta] = sort_eigs(eige);
78
79 % Dominantná vlastná hodnota (pre normálne módy v tvare exp(lambda*t+i*k*y))
80 lambda = eig_sorted(1)*(-1i);
81
82 % Výpočet absolútnej reálnej chyby (difference) medzi reálnymi vlastnými
83 % hodnotami pre hodnoty spektrálneho rozlíšenia n a n-2
84 difference = abs(lambda - lambda_old);
85 lambda_old = lambda;
86
87 i = i + 2;
88
89 % Výpis n, max. reálnej vlastnej hodnoty a min. abs. reálnej chyby
90 fprintf('%3d  |  %+-19.13f  |  %19.15f  \n',n,real(lambda),difference);
91 end
92 fprintf('======================================================= \n');
93
94 % Zhrnutie výsledkov
95 % vlastné hodnoty:
96 vlastne_hodnoty  = eig_sorted*(-1i); % pre normálne módy v tvare exp(lambda*t+i*k*y)
97 max_vlastna_hodnota = lambda;
98
99 % vlastný vektor prislúchajúci k dominantnej vlastnej hodnote:
100 ctilde = retrieve(hs,chat,eige(eig_label(1)));
101 wtilde = retrieve(hs,what,eige(eig_label(1)));
102 utilde = retrieve(hs,uhat,eige(eig_label(1)));
103 vlastny_vektor = [ctilde;wtilde;utilde];
```

Obr. B.11: Výpis programu `compute_hydrostab.m` (2. časť).