
4.VAJA: PARALELNO PROGRAMIRANJE, PARCIALNE DIFERENCIALNE ENĀČBE

Dominik Primožič

13. APRIL 2025

1. naloga

Substrat difundira in reagira v enodimenzionalnem mediju dolžine l . Reakcija sledi Michaelis-Mentenovi kinetiki. Začetna koncentracija v mediju je c_0 , na robovih pa je enaka 0. Zapišite enačbe sistema v brezdimenzijskih enotah in rešite difuzijsko-reakcijsko enačbo. Od katerih količin so rešitve odvisne? Kako je rešitev odvisna od teh količin?

Metode

Naloga postavlja difuzijski problem z reakcijskim členom, ki sledi časovni evoluciji. Sistem opisuje naslednja enačba:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{Vc}{K + c}$$

kjer je D difuzijska konstanta, V in K pa parametra Michaelis-Menten kinetike. Za lažje reševanje uvedemo brez dimenzijske količine:

$$z = \frac{c}{c_0}, \quad y = \frac{x}{h}, \quad \tau = \frac{t}{T}$$

Diferencialna enačba potem postane:

$$\frac{c_0}{T} \frac{\partial z}{\partial \tau} = D \frac{c_0}{h^2} \frac{\partial^2 z}{\partial y^2} - \frac{V c_0 z}{K + c_0 z}$$

Uvedemo brezdimenzijski števili:

$$Da = \frac{VT}{c_0(K + c_0)}$$

$$Pe = \frac{DT}{h^2}$$

Enačba potem postane:

$$\frac{\partial z}{\partial \tau} = Pe \frac{\partial^2 z}{\partial y^2} - \frac{Da \cdot z}{1 + z}$$

To enačbo lahko rešimo z metodo končnih diferenc, v diskretni obliki se glasi:

$$z_i^{n+1} = z_i^n + Pe \cdot \Delta \tau \cdot \frac{z_{i+1}^n - 2z_i^n + z_{i-1}^n}{(\Delta y)^2} - \Delta \tau \cdot Da \cdot \frac{z_i^n}{1 + z_i^n}$$

Paziti moramo le na pogoj stabilnosti, ki se v tem primeru glasi:

$$Pe \frac{dt}{dy^2} \leq \frac{1}{2}$$

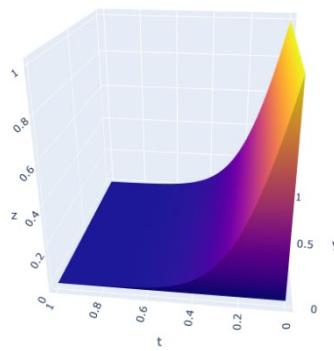
Reševanje je zelo preprosto za sprogramirati:

1. Iz vhodnih podatkov preračunamo brezdimenzijski števili
2. Vhodni parameter je tudi začetni koncentracijski profil, ki ga prevedemo v reducirano obliko
3. Izberemo prostorski in časovni korak
4. Koncentracijo prevajamo na naslednjo točko v času dokler ne dosežemo končnega časa

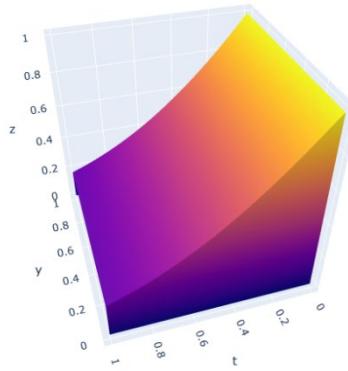
Rezultati

Sprva sem preveril delovanje programa, tako da sem izračunal nekaj koncentracijskih profilov ob končnem času ($\tau=1$).

Pod slikami so zapisani, ključni parametri.

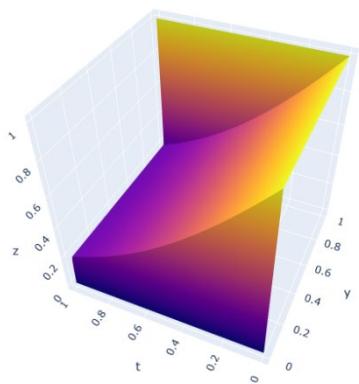


Slika 1: $D=1e-5$, $V=100$, $K=10$, $dy=0.001$, $dt=0.001$



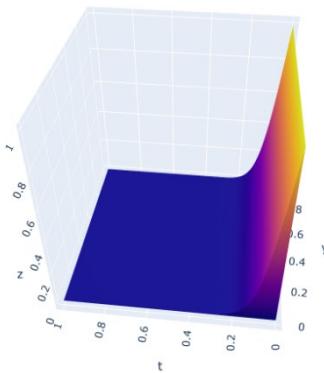
Slika 2: $D=1e-5$, $V=10$, $K=3$, $dy=0.001$, $dt=0.001$

Iz slik 1 in 2 je razvidno, da ima V velik vpliv na hitrost vpada začetne koncentracije.



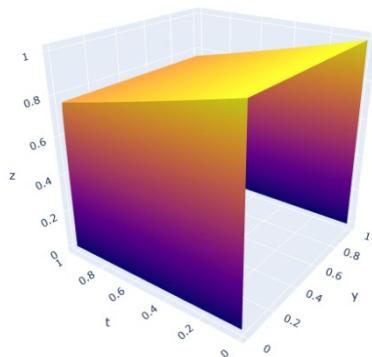
Slika 3: $D=1e-5$, $V=100$, $K=10$, $dy=0.001$, $dt=0.001$

Preveril sem tudi vpliv robnih pogojev, enega sem nastavil na 0 drugega na c_0 . Spreminjanje profila je v tem primeru veliko manjše kot na sliki 1.



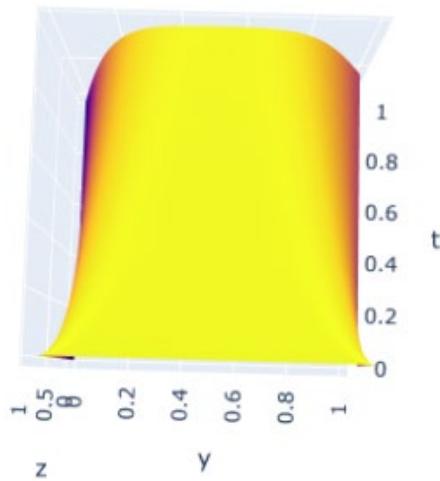
Slika 4: $D=1e-5$, $V=100$, $K=3$, $dy=0.001$, $dt=0.001$

Iz slike 4 je razvidno, da je V zares odločilen za hiter vpad koncentracije.



Slika 5: $D=1e-5$, $V=2$, $K=3$, $dy=0.001$, $dt=0.001$

To sem dodatno preveril še na sliki 5, kjer se profil spreminja zelo počasi.

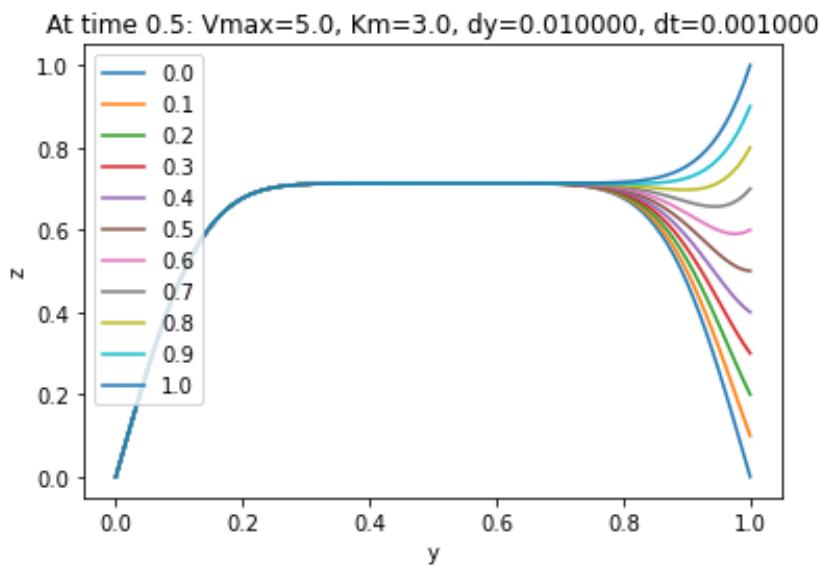


Slika 6: $D=0.01$, $V=1$, $K=50$, $dy=0.01$, $dt=0.001$

Povečan koeficient difuzivnosti pa vpliva na obliko profila, postane bolj paraboličen.

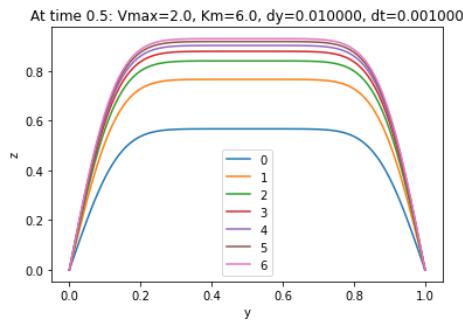
Za časovni potek profila sem za vse te slike naredil tudi animacije.

V nadaljevanju sem preverjal vpliv parametrov na profil. Rešitve sistema so odvisne od vseh vnesenih parametrov, ker so kar vhodne spremenljivke v program, kjer se nato preračunajo v reducirane. Za vse te parametre sem preveril nekaj trendov.



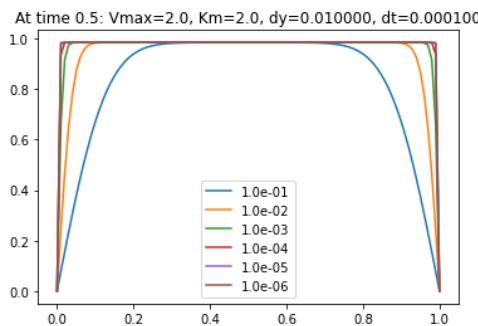
Slika 7: Spreminjanje koncentracije na robu

Pri izbranih parametrih sprememjanje robne koncentracije ne vpliva na celoten profil, kar je nepričakovano. Vpliv je le na zadnji tretjini profila, če bi vzel izsek iz nekega srednjega časa bi verjeto opazil večji vpliv.



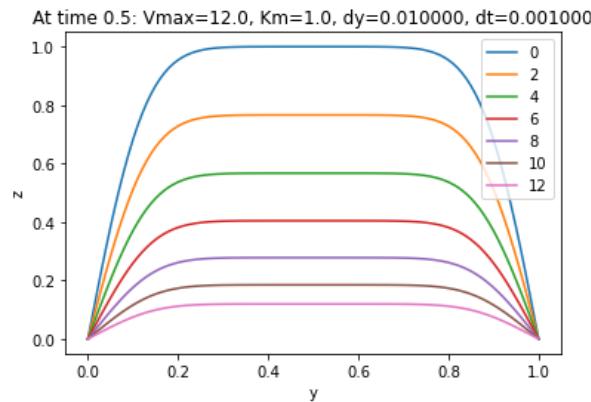
Slika 8: Spreminjanje K_m

Povečevanje K_m parametra kinetike povzroča vedno počasnejšo reakcijo, zato je profil vedno bolj podoben začetnemu.



Slika 9: Spreminjanje difuzijskega koeficienta

Večji kot je difuzijski koeficient hitreje se manjša koncentracija proti središču. Tu so nastavljeni parametri za počasnejšo kinetiko, da se bolje opazi vpliv same difuzije. Pri zelo majhnih difuzivnosti se profil praktično ne spremeni.



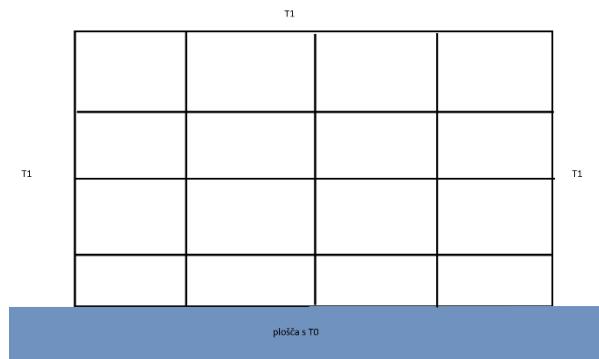
Slika 10: Spreminjanje V

Podobno kot sem sklepal že prej visoka vrednost kinetičnega parametra V povzroči hitrejšo spremembo začetnega profila, torej hitrejši vpad po celotni dolžini.

2. naloga

Zelo dolga palica s kvadratnim presekom je postavljena na ploščo s temperaturo T_0 . Kakšen je profil temperature v palici, če je v okolini palice temperatura T_1 in se palica ohlaja s stikom? Kaj pa imamo v primeru, če je zgornja plošča izolirana oziroma se ohlaja s konvekcijo? Kako pa je v primeru, če je v palici enakomerno porazdeljen radioaktivnem izotop, ki enakomerno segreva palico?

Metode



Slika 11: Slikovna predstavitev problema

Opisan problem ustreza naslednji diferencialni enačbi:

$$\lambda \nabla^2 T + q = 0$$

kjer je $q=0$ za prvi del problema, za drugi del pa je člen povezan s sevanjem izotopa.

To diferencialno enačbo v dveh dimenzijah diskretiziramo:

$$\lambda \left(\frac{T_{i+1,j} + T_{i-1,j} + T_{i,j+1} + T_{i,j-1} - 4T_{i,j}}{h^2} \right) + q_{i,j} = 0$$

To lahko zapišemo kot matrično enačbo:

$$T_{i+1,j} + T_{i-1,j} + T_{i,j+1} + T_{i,j-1} - 4T_{i,j} = -h^2 S_{i,j}$$

Matriko temperatur raztegnemo v eno dimenzionalni vektor:

$$DT = -S$$

kjer je:

$$D = \begin{bmatrix} A & I & \cdots & & \\ I & A & I & & \\ \vdots & I & \ddots & \ddots & \\ & & \cdots & A & \end{bmatrix}$$

in je:

$$A = \begin{bmatrix} -4 & 1 & \cdots & & \\ 1 & -4 & 1 & & \\ \vdots & 1 & \ddots & \ddots & \\ & & \cdots & -4 & \end{bmatrix}$$

I je identiteta, T je mreža temperaturnih točk razvlečenih v column-major vektor. S pa je vektor desne strani, ki je 0 ali pa enak izvornemu profilu. Za shranjevanje temperature sem napisal svoj objekt za matriko:

```
matrix::matrix(size_t n1, size_t n2): rows_(n1), cols_(n2){  
    data.resize(n1*n2,0);  
  
}  
  
void matrix::set(const std::vector<double>& data_given){  
    data=data_given;  
}  
  
size_t matrix::rows() const { return rows_; }  
size_t matrix::cols() const { return cols_; }  
  
double& matrix::operator()(int i, int j){  
    return data[i + rows_ * j];  
}  
  
const double& matrix::operator()(int i, int j) const{  
    return data[i + rows_ * j];  
}
```

Sama matrika koeficientov (D) je redka matrika, zato sem uvedel še objekt, ki jo shranjuje v CSR zapisu, za hitrejše izračune.

```

void csr::block_tridiagonal(const csr& A, const csr& B) {
    int block_size = A.row.size() - 1;
    int block_count = B.row.size() - 1;
    int total_size = block_count * block_size;
    row.clear();
    col.clear();
    value.clear();
    row.push_back(0);
    for (int i = 0; i < block_count; ++i) {
        int block_start = i * block_size;
        for (int r = 0; r < block_size; ++r) {
            int row_offset = block_start + r;
            for (int j = A.row[r]; j < A.row[r + 1]; ++j) {
                value.push_back(A.value[j]);
                col.push_back(block_start + A.col[j]);}
            if (i > 0) {
                for (int j = B.row[r]; j < B.row[r + 1]; ++j) {
                    value.push_back(B.value[j]);
                    col.push_back((i - 1) * block_size + B.col[j]);}}
            if (i < block_count - 1) {
                for (int j = B.row[r]; j < B.row[r + 1]; ++j) {
                    value.push_back(B.value[j]);
                    col.push_back((i + 1) * block_size + B.col[j]);}}
            row.push_back(value.size());}}}

```

Za reševanje pa sem napisal Conjugate-Gradient solver:

```

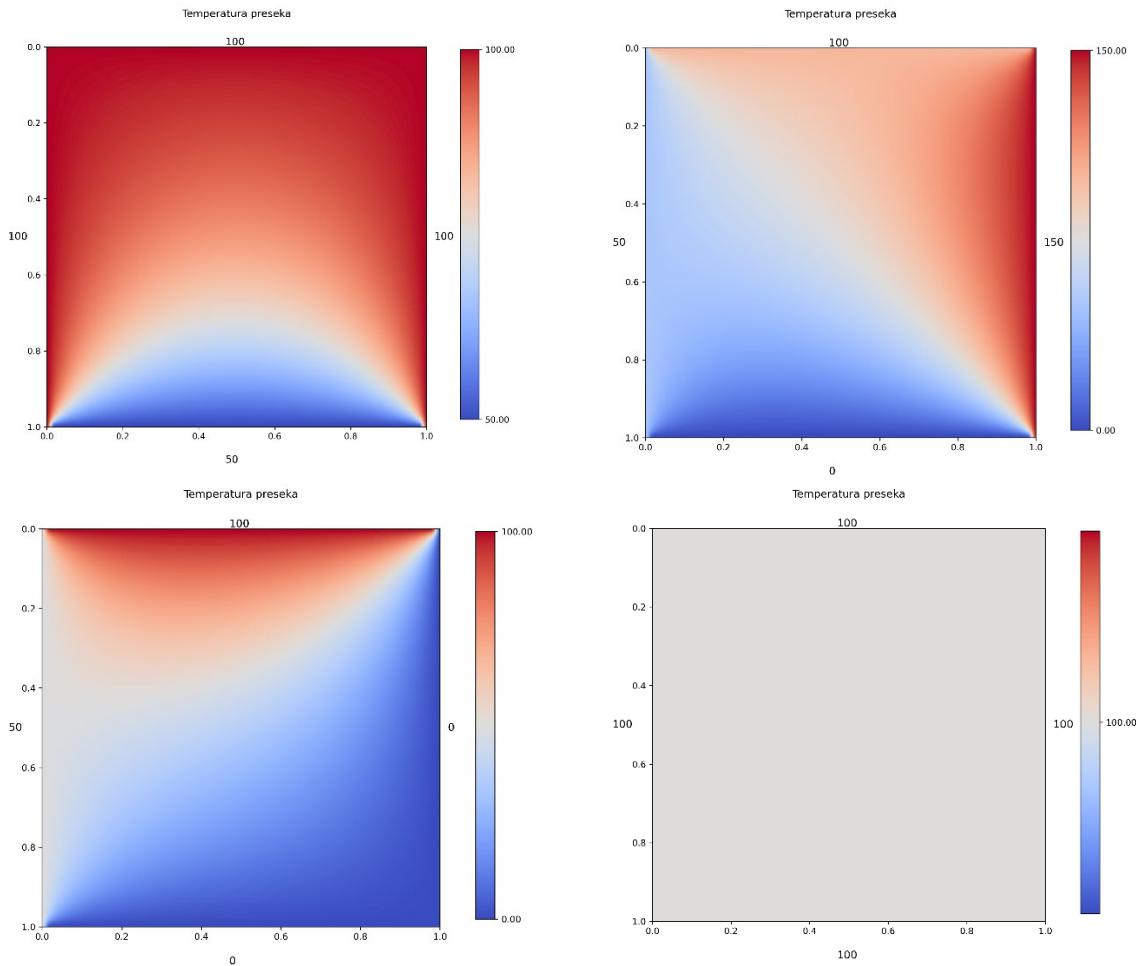
std::vector<double> GC_solver(const csr& A,const std::vector<double>& b, double tol, int max_iter){
    int n=b.size();
    std::vector<double> M(n,0);
    std::vector<double> r=b - A.matvec(M);
    std::vector<double> p=r;
    std::vector<double> rs_old=r;
    std::vector<double> rs_new;
    for (int iter=0;iter<max_iter;iter++){
        std::vector<double> Ap=A.matvec(p);
        double alpha= dot(rs_old,rs_old) / dot(p,Ap);
        M=M+p*alpha;
        r=r-Ap*alpha;
        rs_new=r;
        if (std::sqrt(dot(rs_new,rs_new))<tol) break;
        p=r+ p* (dot(rs_new,rs_new)/dot(rs_old,rs_old));
        rs_old = rs_new;
    }
    return M;
}

```

Za prvi del so robni pogoji zelo preprosti, na robovih v vektorju \mathbf{T} le odštejemo robne vrednosti. Za izoliran rob je potrebno spremeniti tudi blok matrike A na ustreznih mestih. Za konvekcijo so spremembe malo drugačne, tega mi ni uspelo sprogramirati v matrični obliki, zato sem sistem rešil z dvema zankama, kjer je lažje eksplizitno upoštevati robne pogoje.

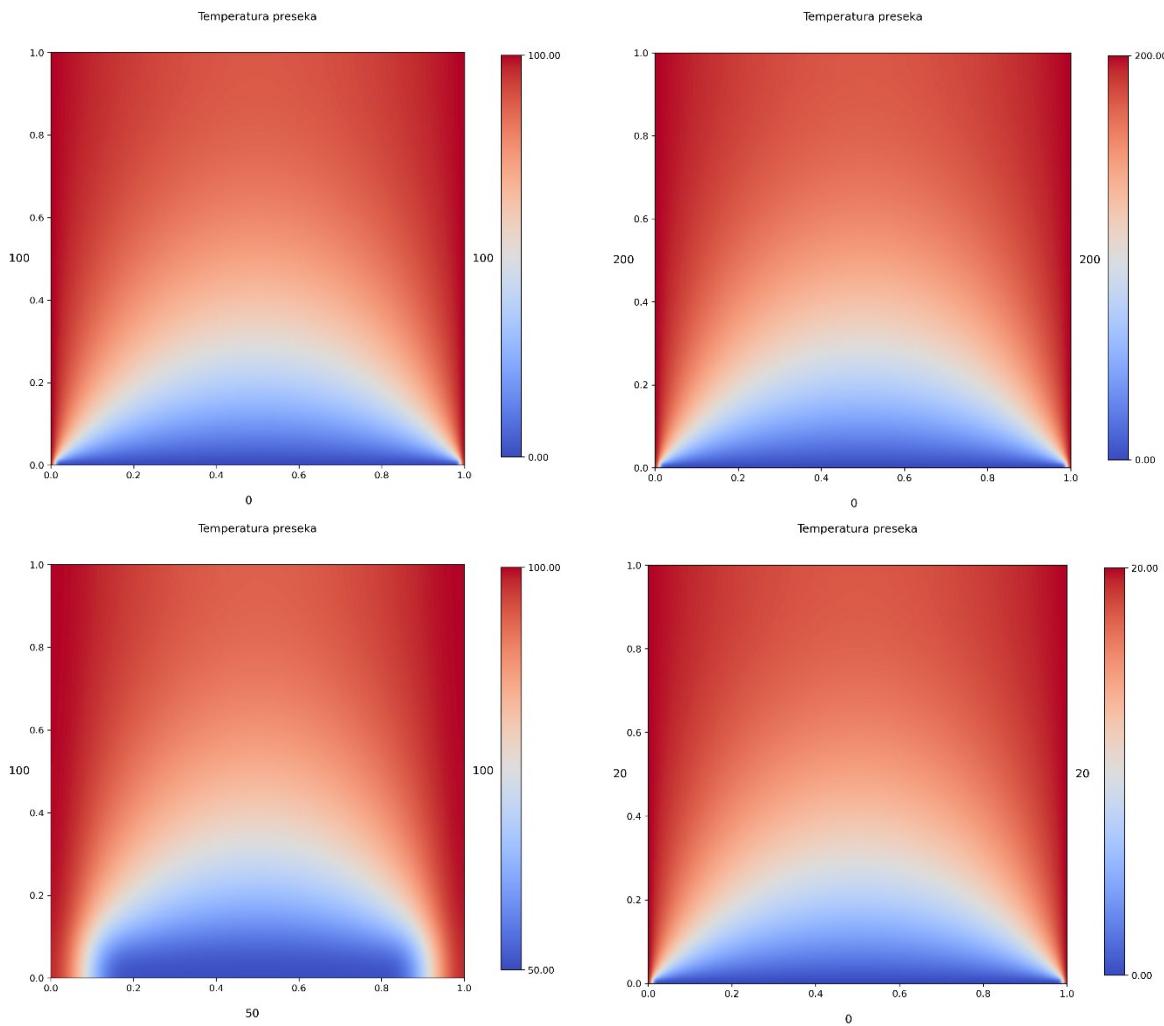
Rezultati

Za presek brez vira položen na ploščo z drugačno temperaturo sem preveril nekaj različnih vrednosti temperature plošče in okolice, tako simetrične kot asimetrične. Rezultati so v skladu s pričakovanji.



Slika 12: Temperurni profili preseka brez vira

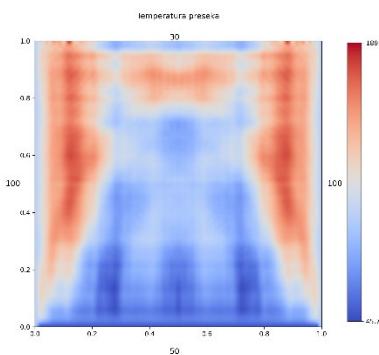
Podobno sem preveril tudi z Neumanovim robnim pogojem na vrhu.



Slika 13: Temperurni profili preseka brez vira z izolirano zgornjo stranjo

Opazno je, da je na vrhnji strani izolacija in se temperatura spodnje ploskve razširi višje gor.

Matrično sem poskusil rešiti še za konvekcijo, pa mi ni uspelo.

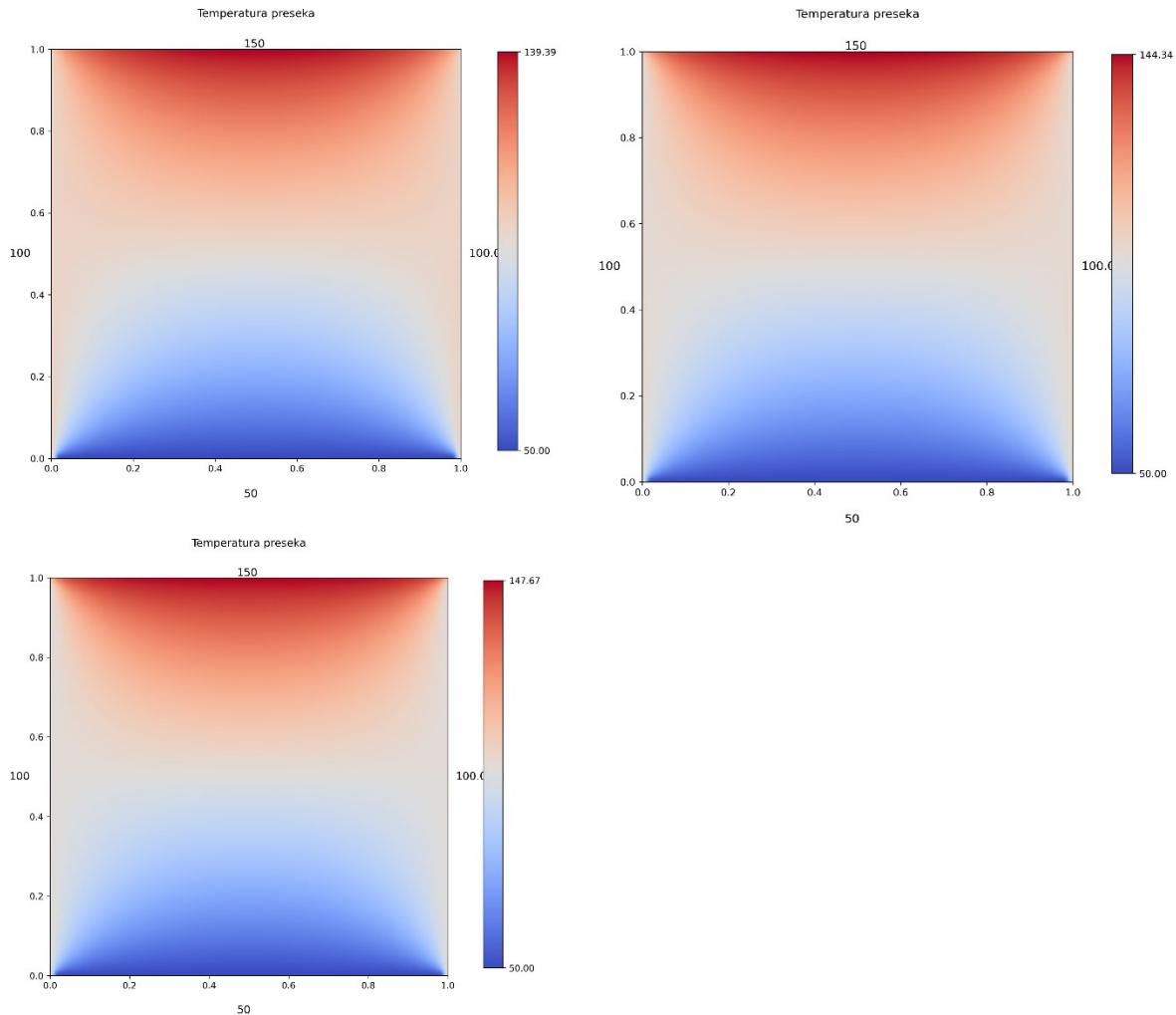


Slika 14. Neuspeli poskus konvekcije

Narobe sem nastavil matrik D in verjetno tudi vektor **S**. Problem sem zato rešil na preprostejši način. Malo sem tudi spremenjal koeficient toplotne prestopnosti v konvekcijskem robnem pogoju, ki sledi iz enačbe na vrhu preseka:

$$\frac{dT}{dy} = h(T - T_{\infty})$$

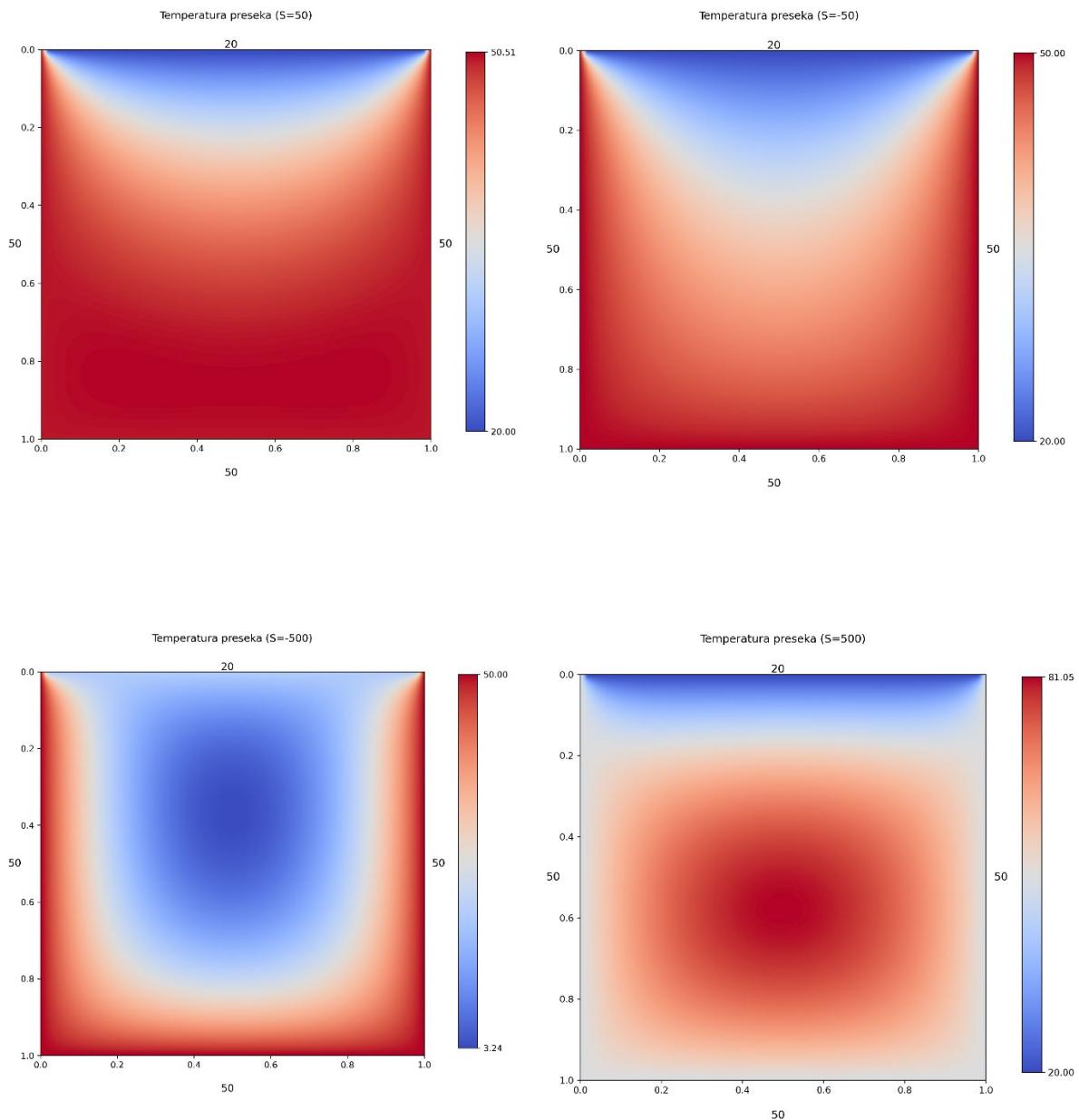
Na sliki je na vrhu označena T_∞ .



Slika 15: Temperurni profili preseka brez vira s konvekcijo na vrhu (koeficienti prestopnosti od leve proti desni so: 10, 20, 50)

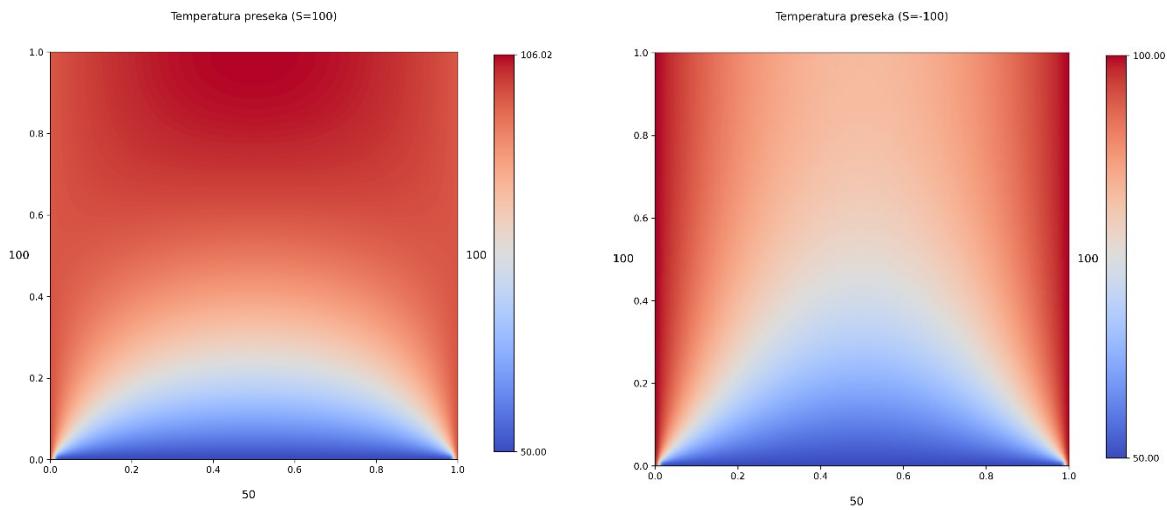
Večja kot je toplotna prestopnost bolj se segreje zgornji del plošče in dlje v središče se segreje.

Potem sem vsem trem sistemom dodal še vir in preveril kako se razlikuje sistem, če je vir pozitiven ali negativen.



Slika 16: Temperaturni profili preseka z virom (vrednost vira je v naslovu grafov)

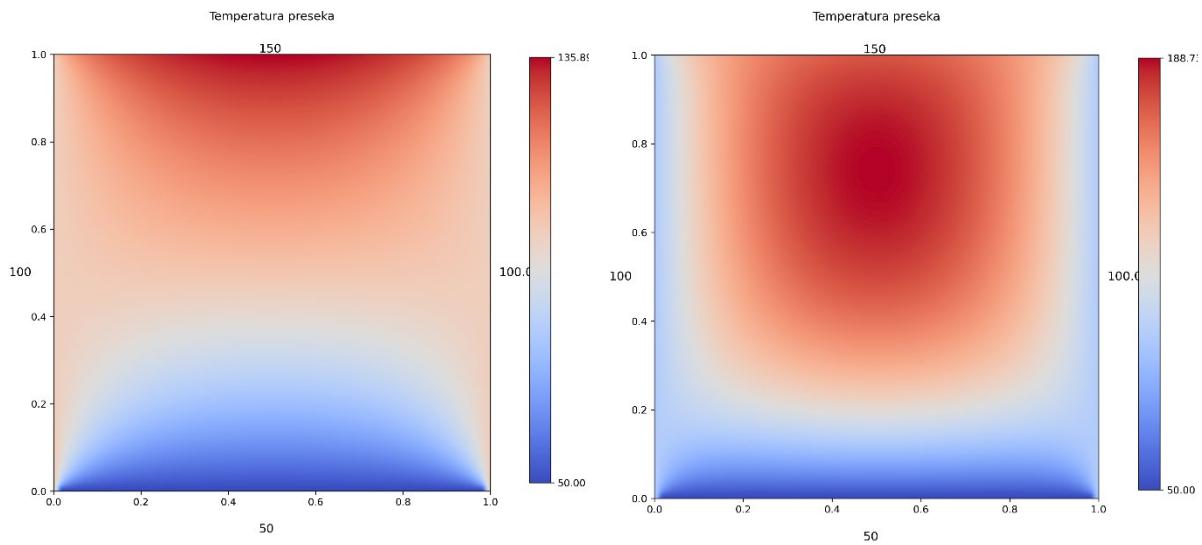
Pričakovano ima velikost vira velik vpliv, ko ta po absolutni vrednosti postane večji od temperature okolice.



Slika 17: Temperaturni profili preseka z virom z izolirano zgornjo stranjo

Tudi pri izolirani strani se vpliv vira vidno pozna, bolj jasno pa se tudi opazi efekt izolacije, kjer se profil skoraj ne spreminja po zgornji sredini.

Za konvekcijo sem preveril le vpliv velikosti vira. V prvem primeru je le 100, v drugem pa je 1000. Pri drugem se jasno opazi, da se telo močno segreva v središču, kjer se ne ohlaja dovolj hitro. Opazna pa je tudi razlika v načinu ohlajanja (konvekcija zgoraj, prevajanje na nižjo temperaturo spodaj in na srednji ob strani).



Slika 18: Temperaturni profili preseka z virom s konvekcijo na vrhu; vir na levi $S=100$, na desni $S=1000$