Protokol z projektu

Projekt na Numerické metody pro inženýry (P413003)
Zadání č. 9
Vypracoval Ing. Jiří Zbytovský (email)
Odevzdáno 30.01.2023

Úloha 1

Původní diferenciální rovnice popisující izotermní vnitřní difúzi v porézením katalyzátoru:

$$\frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}x^2} + \frac{a}{x}\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = \Phi^2 y^n \tag{1}$$

S okrajovými podmínkami:

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}(0) = 0 \tag{2}$$

$$y(1) = 1 \tag{3}$$

Kde y je bezrozměrná koncentrace, x bezrozměrná souřadnice poloměru (0 je střed částice, 1 je její okraj), $a = 1$ charakterizuje tvar částice (váleček), $\Phi = 1$ Thieleho modul a $n = 2$ řád reakce.

Diferenciální rovnici (DR) druhého řádu je třeba nahradit soustavou dvou DR prvního řádu, kde závislé proměnné jsou y_1 a y_2:

$$y_1 = y \tag{4}$$

$$y_2 = y' = \mathrm{d}y/\mathrm{d}x \tag{5}$$

Výsledkem je tato soustava DR (s dosazením Φ, n, a):

$$\frac{\mathrm{d}y_1}{\mathrm{d}x} = y_1' = f_1(x, y_1, y_2) = y_2 \tag{6}$$

$$\frac{\mathrm{d}y_2}{\mathrm{d}x} = y_2' = f_2(x, y_1, y_2) = -\frac{a}{x}y_2 + \Phi^2 y_1^n = y_1^2 - y_2/x \tag{7}$$

S okrajovými podmínkami:

$$y_2(0) = 0 \tag{8}$$

$$y_1(1) = 1 \tag{9}$$

Tento okrajový problém nyní řeším převedením na počáteční problém metodou střelby s variačními rovnicemi. Volím proto η jako odhad počáteční hodnoty $y_1(0) = \eta$ (zatímco $y_2(0)$ je dáno přesně). Volba η je přijatelná tehdy, když je přibližně splněna okrajová podmínka vyjádřená jako $\phi(\eta) = 0$, kde funkce ϕ vyjadřuje residuum rovnice okrajové podmínky při odhadu η:

$$\phi(\eta) = y_1(1, \eta) - 1 \tag{10}$$

Aby byla přibližně splněna okrajová podmínka, použiji Newtonovu metodu na získání vhodnější hodnoty η (iteruji s čítačem k):

$$\eta_{k+1} = \eta_k + \frac{\phi(\eta_k)}{\phi'(\eta_k)} \tag{11}$$

Kde $\phi'(\eta_k)$ je derivace ϕ podle η. Pro její vyčíslení zavedu variační rovnice pro nové závislé veličiny p_1, p_2:

$$p_1 = \frac{\partial y_1}{\partial \eta} \tag{12}$$

$$p_2 = \frac{\partial y_2}{\partial \eta} \tag{13}$$

Jejich derivace lze vyjádřit řetízkovým pravidlem, čímž jsou získány další diferenciální rovnice do výše uvedené soustavy DR:

$$p_1' = \frac{\partial p_1}{\partial x} = \frac{\partial^2 y_1}{\partial x \partial \eta} = \frac{\partial f_1}{\partial \eta} = \frac{\partial f_1 \partial y_1}{\partial y_1 \partial \eta} + \frac{\partial f_1 \partial y_2}{\partial y_2 \partial \eta} = \frac{\partial f_1}{\partial y_1} p_1 + \frac{\partial f_1}{\partial y_2} p_2 = p_2 \tag{14}$$

$$p_2' = \frac{\partial p_2}{\partial x} = \frac{\partial^2 y_2}{\partial x \partial \eta} = \frac{\partial f_2}{\partial \eta} = \frac{\partial f_2 \partial y_1}{\partial y_1 \partial \eta} + \frac{\partial f_2 \partial y_2}{\partial y_2 \partial \eta} = \frac{\partial f_2}{\partial y_1} p_1 + \frac{\partial f_2}{\partial y_2} p_2 = 2 y_1 p_1 - p_2/x \tag{15}$$

S odpovídajícími počátečními podmínkami:

$$p_1(0) = \frac{\partial y_1}{\partial \eta}(0) = 1 \tag{16}$$

$$p_2(0) = \frac{\partial y_2}{\partial \eta}(0) = 0 \tag{17}$$

Nyní lze vyjádřit derivaci $\phi'(\eta_k)$:

$$\phi' = \frac{\partial \phi}{\partial \eta} = \frac{\partial (y_1(1, \eta) - 1)}{\partial \eta} = p_1(1, \eta) \tag{18}$$

A tedy dosadit do vzorce pro Newtonovu metodu:

$$\eta_{k+1} = \eta_k + \frac{y_1(1, \eta) - 1}{p_1(1, \eta)} \tag{19}$$

Řeším tedy následující počáteční problém pomocí Runge-Kuttovy metody (použita implementace z open-source knihovny scipy).

$$y_1' = y_2 \qquad y_1(0) = \eta_k \tag{20}$$

$$y_2' = y_1^2 - y_2/x \qquad y_2(0) = 0 \tag{21}$$

$$p_1' = p_2 \qquad p_1(0) = 1 \tag{22}$$

$$p_2' = 2 y_1 p_1 - p_2/x \qquad p_2(0) = 0 \tag{23}$$

Postup zahájím volbou např. $\eta = \frac{1}{2}$ a výše uvedený postup iteruji přes k.
Iteraci k ukončím tehdy, když $|\eta_{k+1} - \eta_k| < \epsilon$, kde ϵ je zvolená mez pro stanovení konvergence.
Následně řeším soustavu DR bez variačních rovnic, čili pouze rovnice 20 a 21.
Řešením soustavy jsou vektory x, y_1 a y_2, což je výsledek této úlohy.

Implementace tohoto postupu je v souboru *app/uloha_1.py*.
Výsledky jsou uvedeny v poslední kapitole.

Úloha 2

Původní parciální diferenciální rovnice (PDR) popisující dynamiku vnitřní difúze v částici katalyzátoru s reakcí druhého řádu:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \delta u^2 \tag{24}$$

S počáteční podmínkou:

$$u(x,0) = 4(x - \tfrac{1}{2})^2 \qquad x \in \langle 0, 1\rangle \tag{25}$$

A s okrajovými podmínkami:

$$u(0,t) = u(1,t) = 1 \qquad t > 0 \tag{26}$$

Přičemž u značí koncentraci, x prostorovu souřadnici průměru (od kraje ke kraji), t čas a δ rychlostní konstantu reakce (všechny veličiny v bezrozměrném tvaru).
Pozn.: před člen s druhou derivací dle x by bylo možné přidat D, bezrozměrný difúzní koecifient, aby byl systém plně parametrizován.

Tato PDR bude řešena metodou Crankovou-Nicholsonové pro $t \in \langle 0, 1\rangle$ a $\delta = 1$. Aby ji bylo možné touto metodou řešit, je třeba provést linearizaci.

Nejprve však na intervalech $x \in \langle 0, 1\rangle$, $t \in \langle 0, 1\rangle$ tabeluji hodnoty nezávislých veličin:

$$x_i = ih \qquad h = 1/n \qquad i = 0...n \tag{27}$$

$$t_j = jk \qquad k = 1/m \qquad j = 0...m \tag{28}$$

Řešení tedy budu hledat na této množině:

$$D^{h,k} = \{(x_i, t_j), i = 0...n, j = 0...m\} \tag{29}$$

Na této množině provedu náhradu derivací diferenčními formulemi, abych získal přibližné řešení: $u(x_i, t_j) \approx u_i^j$
Takto vyjádřím derivace v bodě i, $j+1$:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_{j+1}) = \frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{k} \tag{30}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_{j+1}) = \frac{1}{2}\frac{u_{i-1}^{j+1} - 2u_i^{j+1} + u_{i+1}^{j+1}}{h^2} + \frac{1}{2}\frac{u_{i-1}^j - 2u_i^j + u_{i+1}^j}{h^2} \tag{31}$$

Dále, nelineární člen $(u_i^{j+1})^2$ linearizuji jako $u_i^j u_i^{j+1}$

Aproximaci PDR na množině $D^{h,k}$ pak lze sestavit takto:

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{k} = \frac{1}{2}\frac{u_{i-1}^{j+1} - 2u_i^{j+1} + u_{i+1}^{j+1}}{h^2} + \frac{1}{2}\frac{u_{i-1}^j - 2u_i^j + u_{i+1}^j}{h^2} + u_i^j u_i^{j+1} \tag{32}$$

Pro přehlednost definuji $\alpha = k/h^2$ a PDR upravím:

$$-\frac{\alpha}{2}u_{i-1}^{j+1} + (1+\alpha+ku_i^j)u_i^{j+1} - \frac{\alpha}{2}u_{i+1}^{j+1} = \frac{\alpha}{2}\left(u_{i-1}^j - 2u_i^j + u_{i+1}^j\right) + u_i^j \tag{33}$$

Řešením této aproximované PDR je matice $U = \left(u_i^j\right)$. Postup k jejímu získání je následující: na počátku znám první řádek $u_i^0 = 4(x_i - \frac{1}{2})^2$ a postupně získávám další řádky (iteruji $j+1$).

Z řádku $j+1$ vždy znám hodnoty $u_0^{j+1} = u_n^{j+1} = 1$.

Zbývající hodnoty u_i^{j+1} v $i = 1...(n-1)$ získám řešením soustavy $(n-1)$ lineárních rovnic 33, kde každá tato rovnice vyjadřuje platnost PDR pro bod u_i^{j+1} v daném i.

Tato soustava je zapsána maticově:

$$A^j u^{j+1} = b^j \tag{34}$$

Maticový zápis PDR 33 je rozepsán pro příklad s $n = 5$:

$$\begin{pmatrix} \beta & \frac{\alpha}{2} & 0 & 0 \\ \frac{\alpha}{2} & \beta & \frac{\alpha}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\alpha}{2} & \beta & \frac{\alpha}{2} \\ 0 & 0 & \frac{\alpha}{2} & \beta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_1^{j+1} \\ u_2^{j+1} \\ u_3^{j+1} \\ u_4^{j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\alpha}{2}\left(1 - 2u_1^j + u_2^j\right) + u_1^j + \frac{\alpha}{2} \\ \frac{\alpha}{2}\left(u_{i-1}^j - 2u_i^j + u_{i+1}^j\right) + u_i^j \\ \frac{\alpha}{2}\left(u_{i-1}^j - 2u_i^j + u_{i+1}^j\right) + u_i^j \\ \frac{\alpha}{2}\left(u_{n-2}^j - 2u_{n-1}^j + 1\right) + u_{n-1}^j + \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \tag{35}$$

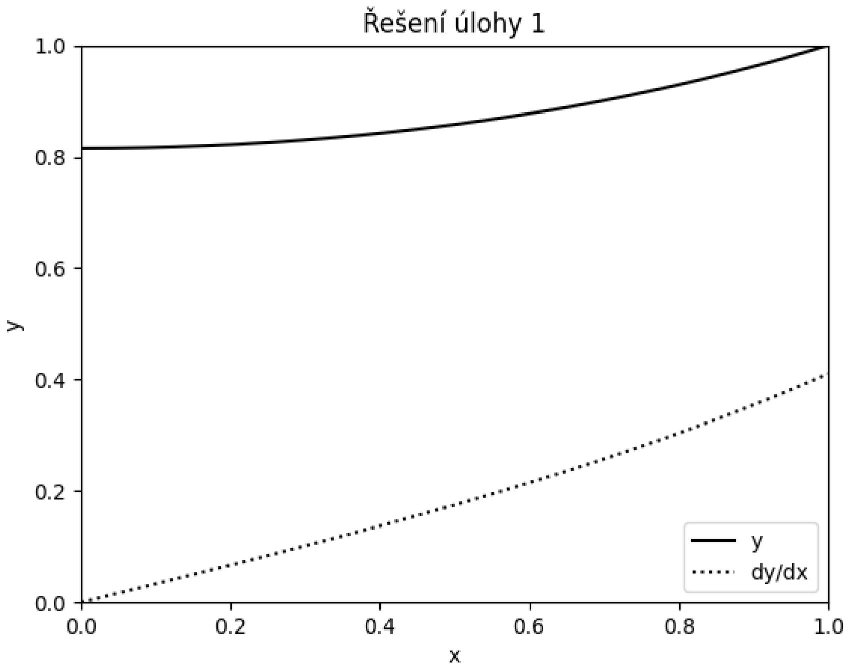
Kde člen β je definován jako $1 + \alpha + ku_i^j$

Řešení soustavy rovnic je realizováno pomocí algoritmu z open-source knihovny numpy.
Tímto postupem je řádek po řádku získána celá matice U.

Implementace tohoto postupu je v souboru *app/uloha_2.py*.
Výsledky jsou uvedeny v poslední kapitole.

Výsledky

Průběh řešení DR z úlohy 1 je znázorněn na grafu níže. Řešení je na pohled hladké, bez oscilací, a splňuje okrajové podmínky se zadanou přesností.



Průběh řešení PDR z úlohy 2 je znázorněn na grafu níže. Není pozorována oscilace, průběh funkce je v obou směrech hladký.