Rozwiązywanie układów równań liniowych metodami iteracyjnymi – transport ciepła

Fabuła:

Jak pokazały liczne próby, spalenie zombie nie jest taką prostą sprawą jak mogłoby się wydawać. Aby zneutralizować wszystkie zagrożenia potrzebna jest temperatura rzędu 1000°C utrzymywana przez przynajmniej godzinę. Z tego powodu piece do spalania zombie muszą posiadać specjalną konstrukcję umożliwiającą nie tylko wytrzymanie odpowiednio wysokiej temperatury, ale także zabezpieczenia pracowników ZTUZ (Zakładów Termicznej Utylizacji Zombie). Waszym pierwszym poważnym zadaniem w agencji GSL jest pomoc przy projektowaniu nowych piecy. Projektanci zaproponowali następującą konstrukcję ściany pieca: 40 cm cegły ogniotrwałej o wysokiej odporności na temperaturę i współczynniku przewodzenia ciepła $\lambda_1 = 0.4\frac{W}{m^2K}$; 30 cm cegły o średniej ogniotrwałości (max temp pracy 800℃) i $\lambda_2 = 0.2\frac{W}{m^2K}$; oraz 30 cm cegły „niskotemperaturowej" $\lambda_2 = 0.1\frac{W}{m^2K}$ + stalowa gazoszczelna powłoka konstrukcyjna. Warunki pracy przyjmują, że temperatura na wewnętrznej granicy ściany będzie wynosić 1000°C a zewnętrznej granicy 100°C. Policzcie rozkład temperatur w stanie ustalonym w ścianie pieca.

BTW, to jednym z podstawowych zastosowań układów równań liniowych jest rozwiązywanie równań różniczkowych. Po wstępie łatwo się domyślić, że do takich równań należy właśnie zagadnienie transportu ciepła, które w przypadku jednowymiarowym można zapisać jako:

$$\rho C_P \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\right)$$

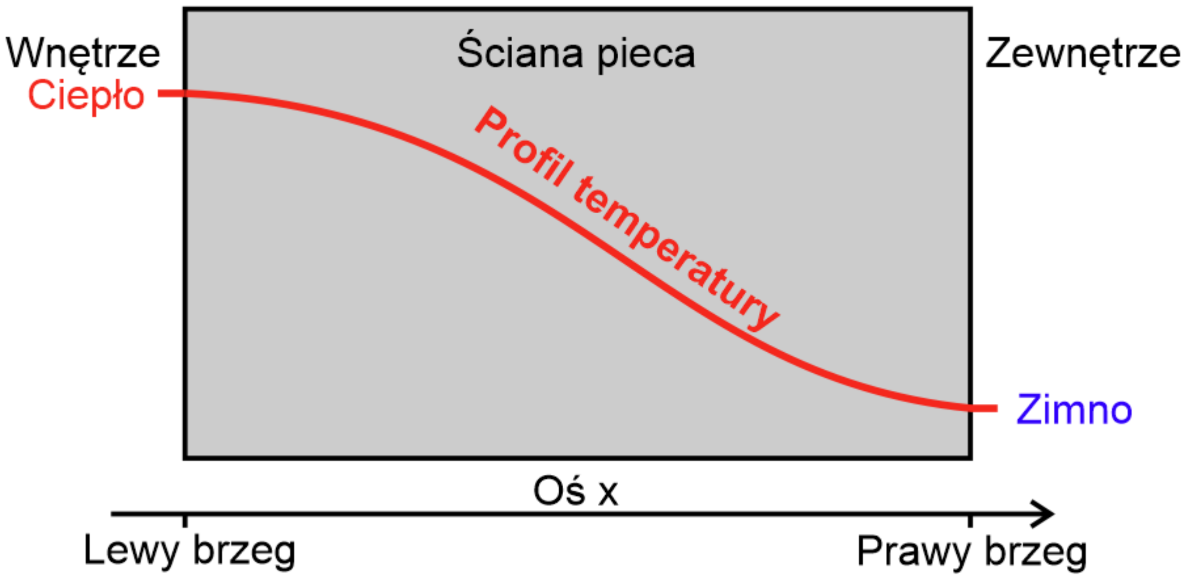
gdzie: ρ to gęstość materiału, C_P – Jego ciepło właściwe a T to temperatura.

***Dyskretyzacja:** czyli jak przejść na coś zrozumiałego dla komputera

Uwaga, dany fragment nie jest konieczny do wykonania ćwiczenia, ale zamieszczam go dla lepszego zrozumienia całej tematyki. Dlatego nie marnujcie tutaj za dużo czasu w tracie ćwiczeń.

Jak stworzyć wykres funkcji (matematycznej) na komputerze? Przyjmijmy, że naszą funkcją będzie coś prostego, tylu $y = x^2 + 2\ dla\ x \in (A,B)$. Jak wiadomo większość funkcji matematycznych przyjmuje nieskończenie wiele argumentów i zwraca nieskończenie wiele wyników. Tylko obliczanie i rysowanie nieskończonej ilości elementów jest czasochłonne i raczej mało praktyczne. Dlatego ograniczamy się do jakiejś skończonej liczby elementów, *n*. Tworzymy 2 wektory, np. x i y, pierwszy z nich będzie zawierał argumenty, a drugi wyniki funkcji. Wektor x najczęściej wypełniamy równo odległymi wartościami, od A do B, tak aby stworzył oś X. Wektor y wypełniamy wynikami funkcji dla każdego x i już możemy plotować. Bardzo proste, ale musiało wybrzmieć.

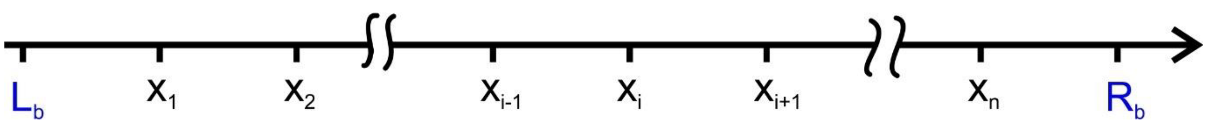
Taką samą metodę przyjmuje się dla wielu obliczeń numerycznych. W naszym przypadku ściany pieca. Tylko funkcje, które wtedy powstają przestają być funkcjami ciągłymi, a zostają funkcjami dyskretnymi. Wymagają trochę innego podejścia matematycznego, ale pozwala ono na wykonywanie obliczeń za pomocą komputera. Tak działa np. Fluent i w sumie to wszystkie programy do obliczeń inżynierskich.



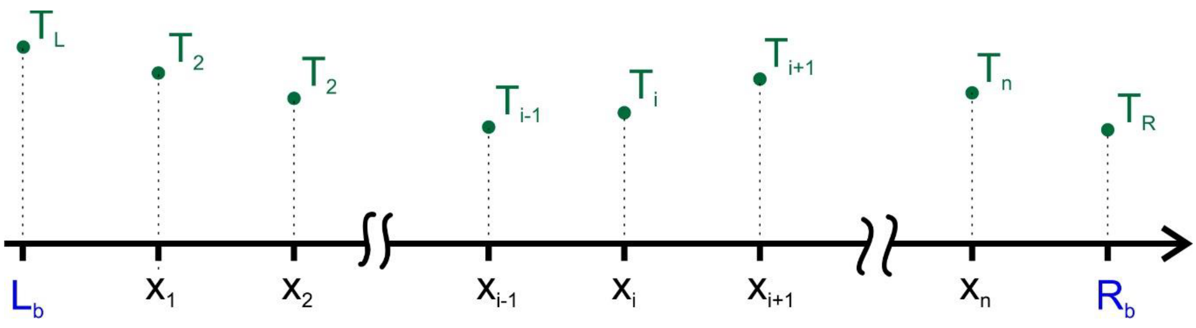
Jak to zrobić:

Pierwszym etapem jest utworzenie siatki obliczeniowej. W przypadku schematycznie przedstawionej powyżej ściany, możemy przyjąć problem za jednowymiarowy. W takim przypadku, siatka obliczeniowa sprowadza się do punktów położonych na osi x, a w programie reprezentowanej przez wektor $\boldsymbol{x}$ - wektor położenia. Ponieważ w tym przypadku temperatura na brzegach jest zadana, same brzegi nie znajdują się w na tej osi.

UWAGA! Rysunki zostały przygotowane dla ceramików, dlatego wektory i macierze numerowane są od 1.



Każdemu punktowi na tej osi przypisana jest wartość temperatury, w postaci wektora $\boldsymbol{t}$. To ten wektor będziemy chcieli obliczyć.



Ponieważ problem transportu ciepła jest stacjonarny, tj. nie ulega zmianie w czasie, to lewa strona równania transportu ciepła wynosi 0.

$$0 = \frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\right)$$

I zapisać je w postaci podzielonej na strumień ciepła i równanie zachowania energii:

$$0 = \frac{-\partial Q}{\partial x}$$

$$Q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}$$

Korzystając z iloczynu różnicowego centralnego i metody różnic skończonych możemy rozpocząć częściową dyskretyzacją wyrażenia na gęstość strumienia ciepła z węzła *i* do węzła *i+1*:

$$Q_{i+\frac{1}{2}} = -\lambda_{i+\frac{1}{2}} \frac{T_{i+1} - T_i}{h}$$

notacja $i + \frac{1}{2}$ oznacza tutaj, że wykorzystujemy wartość dla położenia znajdującego się pomiędzy węzłem *i* i *i+1*, a h jest krokiem metody, czyi odległością pomiędzy węzłami. Ponownie dyskretyzując prawo zachowania energii i podstawiając do niego otrzymane wyrażenie na gęstość strumienia ciepła otrzymamy:

$$0 = -\frac{Q_{i+\frac{1}{2}} - Q_{i-\frac{1}{2}}}{h}$$

$$0 = \frac{\lambda_{i+\frac{1}{2}}(T_{i+1} - T_i) + \lambda_{i-\frac{1}{2}}(T_i - T_{i-1})}{h^2}$$

h jest wartością stałą i rozbijając powyższe równanie na fragmenty otrzymujemy:

$$\lambda_{i-\frac{1}{2}} T_{i-1} + \left(-\lambda_{i-\frac{1}{2}} - \lambda_{i+\frac{1}{2}}\right) T_i + \lambda_{i+\frac{1}{2}} T_{i+1} = 0$$

Rozbijając to na układ równań liniowych otrzymujemy:

$$
\begin{array}{llllll}
\lambda_{0.5}T_0 & +(-\lambda_{0.5}-\lambda_{1.5})T_1 & +\lambda_{1.5}T_2 & & \cdots & =0 \\
& \lambda_{1.5}T_1 & (-\lambda_{1.5}-\lambda_{2.5})T_2 & \lambda_{2.5}T_3 & \cdots & =0 \\
& & \lambda_{2.5}T_2 & +(-\lambda_{2.5}-\lambda_{3.5})T_3 \quad \lambda_{3.5}T_4 & \cdots & =0 \\
& & & \ddots & & \vdots \\
& & & \lambda_{n-0.5}T_{n-1} \quad (-\lambda_{n-0.5}-\lambda_{n+0.5})T_n & \lambda_{n+0.5}T_{n+1} & =0
\end{array}
$$

Układ przypomina już układ równań liniowych. Musimy pozbyć się tylko wartości dla węzłów 0 i n+1, ale te przecież znamy. I bardzo szybko możemy zapisać to jako układ równań $A\boldsymbol{t}=\boldsymbol{b}$:

$$
\begin{bmatrix}
(-\lambda_{0.5}-\lambda_{1.5}) & \lambda_{1.5} & & & \\
\lambda_{1.5} & (-\lambda_{1.5}-\lambda_{2.5}) & \lambda_{2.5} & & \\
& \lambda_{2.5} & (-\lambda_{2.5}-\lambda_{3.5}) & \lambda_{3.5} & \\
& & & \ddots & \vdots \\
& & & \lambda_{n-0.5} & (-\lambda_{n-0.5}-\lambda_{n+0.5})
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ \vdots \\ T_n \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} -\lambda_{0.5}T_L \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ -\lambda_{n+0.5}T_R \end{bmatrix}
$$

Oznaczenie $\lambda_{0.5}$ itd. oznacza, że dana wartość to wartość pomiędzy węzłem 0 a 1. (Nie programuje się go!) Jeżeli np. tworzycie funkcję w stylu double lambda_f(double x), to wywołajcie ją czymś na wzór lambda_f((x[i]+x[i+1])/2).

Jak to rozwiązać

Powyższa macierz jest macierzą trójdiagonalną (posiada wartości jedynie na trzech diagonalach). Z punktu widzenia efektywności rozwiązań, najlepiej zastosować do rozwiązania takich macierzy dedykowane metody bezpośrednie lub iteracyjne, które pozwalają na zapisanie tej macierzy jako trzy wektory. Jednak, ponieważ prowadzący jest wredny, waszym zadaniem będzie rozwiązanie tego **metodą największych spadków**.

Kolejne przybliżenia rozwiązania ww. układu równań otrzymuje się obliczając:

$$\boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{t}_k$$

$$\alpha_k = \frac{\boldsymbol{r}_k^T\boldsymbol{r}_k}{\boldsymbol{r}_k^T A\boldsymbol{r}_k}$$

$$\boldsymbol{t}_{k+1} = \boldsymbol{t}_k + \alpha\boldsymbol{r}_k$$

gdzie: $\boldsymbol{r}_k$ to wektor reszt, a $\boldsymbol{r}_k^T\boldsymbol{r}_k$ sprowadza się do iloczynu skalarnego wektora $\boldsymbol{r}_k$ z samym sobą. Za każdym powtórzeniem powyższych operacji powinniśmy otrzymywać wektor $\boldsymbol{t}$, który coraz lepiej spełnia powyższe równanie. Całość wykonujemy tak długo, aż będziemy zadowoleni z wyniku lub procesor się nie znudzi ;)

Uwaga: pisząc program nie tworzymy setek wektorów $\boldsymbol{t}_0, \boldsymbol{t}_1, \boldsymbol{t}_2$ itd. Wykorzystujemy tylko jeden wektor, który po każdej iteracji zostaje nadpisany nowymi wartościami. Indeksy dolne służą do zaznaczenia, że ww. wartości powstają z poprzednich iteracji. Będzie to miało znaczenie w innych metodach.

Zadanie do wykonania

1. Stwórz program pozwalający na rozwiązanie procesu stacjonarnego transportu ciepła przez ścianę pieca. Oprócz parametrów z pierwszej części zadania wykorzystaj: docelowa ilość węzłów (i rozmiar macierzy) *n=9 oraz 99*. Za warunek końca metody przyjmij wartość normy euklidesowej wektora reszt, $\|\boldsymbol{r}_k\|_2 = \sqrt{\boldsymbol{r}_k^T \boldsymbol{r}_k} < 10^{-6}$ lub ilość iteracji większą od 60 000.

   UWAGA! Aby zachować przejrzystość kodu, poszczególne operacje mnożenia wektorów i macierzy należy zapisać jako funkcje. I ogólnie rzecz biorąc stosować rozsądne gospodarowanie kodem.

2. Przygotuj i sporządź wykres rozkładu temperatury w ścianie pieca, wykresy $\log(\|\boldsymbol{r}_k\|_2) = f(k)\ \ i\ \ \|\boldsymbol{t}_k\|_2 = f(k)$, gdzie k to numer iteracji. (W trakcie zajęć program powinien jedynie wypisywać dane do pliku).

3. Omów otrzymane wyniki. Czy konstrukcja pieca spełnia założenia? Co można wywnioskować z pozostałych wykresów?

4. Jak zmieniać się będzie ilość potrzebnych iteracji w zależności od wartości początkowej wektora $\boldsymbol{t}$?

5. * Dla chętnych. Porównaj wyniki i czasochłonność obliczeń metodą gradientów skończonych i metodą eliminacji zupełnej (lub np. rozkładem LU). Czy wynik będzie ulegał znaczącej zmianie w przypadku zmiany wielkości macierzy?