

Projekt zaliczeniowy

laboratorium z przedmiotu Metody Obliczeniowe

autor: Marcin Dzierwa
WFMiI Informatyka 2 rok
nr. albumu: 93978

Temat: Rozwiązanie równania różniczkowego cząstkowego metodami numerycznymi.

Równanie:

$$\frac{\partial U(x,t)}{\partial t} = D \left[\frac{\partial^2 U(x,t)}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \frac{\partial U(x,t)}{\partial x} \right]$$

określone dla współrzędnej przestrzennej $x \in [r, +\infty)$ oraz czasu $t \in [0, t_{\max}]$

warunek początkowy: $U(x,0) = 1$
warunki brzegowe: $U(r, t) = 0$, $U(\infty, t) = 1$

Zagadnienie to może opisywać transport ciepła w ośrodku wokół kuli o promieniu r przy współczynniku transportu ciepła D po raptownym obniżeniu temperatury kuli w chwili $t = 0$.

Rozwiązanie analityczne:

$$U(x,t) = 1 - \frac{r}{x} \operatorname{erfc} \left(\frac{x-r}{2\sqrt{Dt}} \right)$$

gdzie: $\operatorname{erfc}(z) = 1 - \operatorname{erf}(z)$, a $\operatorname{erf}(z)$ jest tzw. funkcją błędu:

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-w^2) dw$$

Założenia:

Do obliczeń numerycznych przedział nieskończony x należy zastąpić przedziałem skończonym $[r, r+a]$, a drugi warunek brzegowy zastąpić warunkiem:

$$U(r+a,t) = 1 - \frac{r}{r+a} \operatorname{erfc} \left(\frac{a}{2\sqrt{Dt}} \right)$$

Do obliczenia funkcji $\operatorname{erfc}(z)$ z dokładnością bliską dokładności maszynowej dla zmiennych typu double należy zastosować pakiet CALERF udostępniony przez prowadzącego zajęcia.

Parametry: $t_{\max} = 2$, $r = 1$, $a = 10$, $D = 1$.

Algorytmy:

Dyskretyzacja: Metoda pośrednia Laasonen, Metoda pośrednia Cranka-Nicolson
Rozwiązanie algebraicznych układów równań liniowych: Algorytm Thomasa

Opis wykorzystanych metod:

- Algorytm Thomasa:

Metoda Thomasa stosowana jest do rozwiązywania algebraicznych układów równań liniowych z macierzą trójdagonalną. Jest to algorytm dokładny bez doboru elementu podstawowego. Polega na przekształceniu macierzy do postaci trójkątnej górnej co powoduje, że układ jest możliwy do rozwiązania bardzo prostą metodą. Jeżeli macierz jest rozmiaru 'n', wektorem szukany jest wektor x_n a elementy wektora wynikowego oznaczmy jako: b_N , elementy głównej przekątnej jako: d_N dla $N \in (1, n)$, elementy na przekątnej powyżej głównej jako: u_N dla $N \in (1, n-1)$ a elementy przekątnej poniżej głównej jako: l_N dla $N \in (2, n)$ to pierwszy wiersz pozostawiamy bez zmian a dla kolejnych wierszy macierzy i elementów wektora b stosujemy algorytm:

$$\begin{aligned} - d_i &= d_i - l_i * d_{i-1}^{-1} * u_{i-1} \quad \text{dla } i \in (2, n) \\ - b_i &= b_i - l_i * d_{i-1}^{-1} * b_{i-1} \quad \text{dla } i \in (2, n) \\ - l_i &= 0 \quad \text{dla } i \in (2, n) \end{aligned}$$

Tak powstały układ z macierzą trójkątną górną rozwiązujemy prostą metodą:

$$\begin{aligned} - x_n &= d_n^{-1} * b_n \\ - x_i &= d_i^{-1} * (b_i - u_i * x_{i+1}) \quad \text{dla } i \in (n-1, 1) \end{aligned}$$

i otrzymujemy szukany wektor x.

- Metoda pośrednia Laasonen:

Jest to metoda niejawną dyskretyzacji równania różniczkowego cząstkowego parabolicznego. Polega ona na zastąpieniu pochodnych w równaniu ich przybliżeniami różnicowymi. Pierwszą pochodną po czasie zastępujemy różnicą progresywną $(u_{i,k+1} - u_{i,k}) / dt$ a drugą pochodną przestrzenną wzorem trzypunktowym $(u_{i-1,k+1} - 2*u_{i,k+1} + u_{i+1,k+1}) / h^2$ gdzie: i - kolejne wartości przestrzenne, k - poziom czasowy, h - krok przestrzenny, dt - krok czasowy. Równanie można wtedy przekształcić do postaci:

$$\lambda u_{i-1,k+1} - (1+2\lambda)u_{i,k+1} + \lambda u_{i+1,k+1} = -u_{i,k} \quad \text{gdzie: } \lambda = D*dt/h^2$$

Z równania powstaje układ z macierzą trójdagonalną zawierającą współczynniki równania który możemy rozwiązać odpowiednią metodą rozwiązywania układów równań liniowych. Aby jednak dało się rozwiązać ten układ potrzebne są warunki brzegowe oraz warunek początkowy.

- Metoda pośrednia Cranka-Nicolson:

Ta niejawną metodą dyskretyzacji polega na zastąpieniu pierwszej pochodnej po czasie różnicą progresywną $(u_{i,k+1} - u_{i,k}) / dt$ a drugiej pochodnej przestrzennej wzorem $1/2 [(u_{i-1,k+1} - 2*u_{i,k+1} + u_{i+1,k+1}) / h^2 + (u_{i-1,k} - 2*u_{i,k} + u_{i+1,k}) / h^2]$ gdzie: i - kolejne wartości przestrzenne, k - poziom czasowy, h - krok przestrzenny, dt - krok czasowy. Zastosowanie współczynnika $1/2$ sprawia, że metoda jest stabilna dla dowolnego λ . Równanie można wtedy przekształcić do postaci:

$$\lambda/2 u_{i-1,k+1} - (1+\lambda)u_{i,k+1} + \lambda/2 u_{i+1,k+1} = - [\lambda/2 u_{i-1,k} + (1-\lambda)u_{i,k} + \lambda/2 u_{i+1,k}]$$

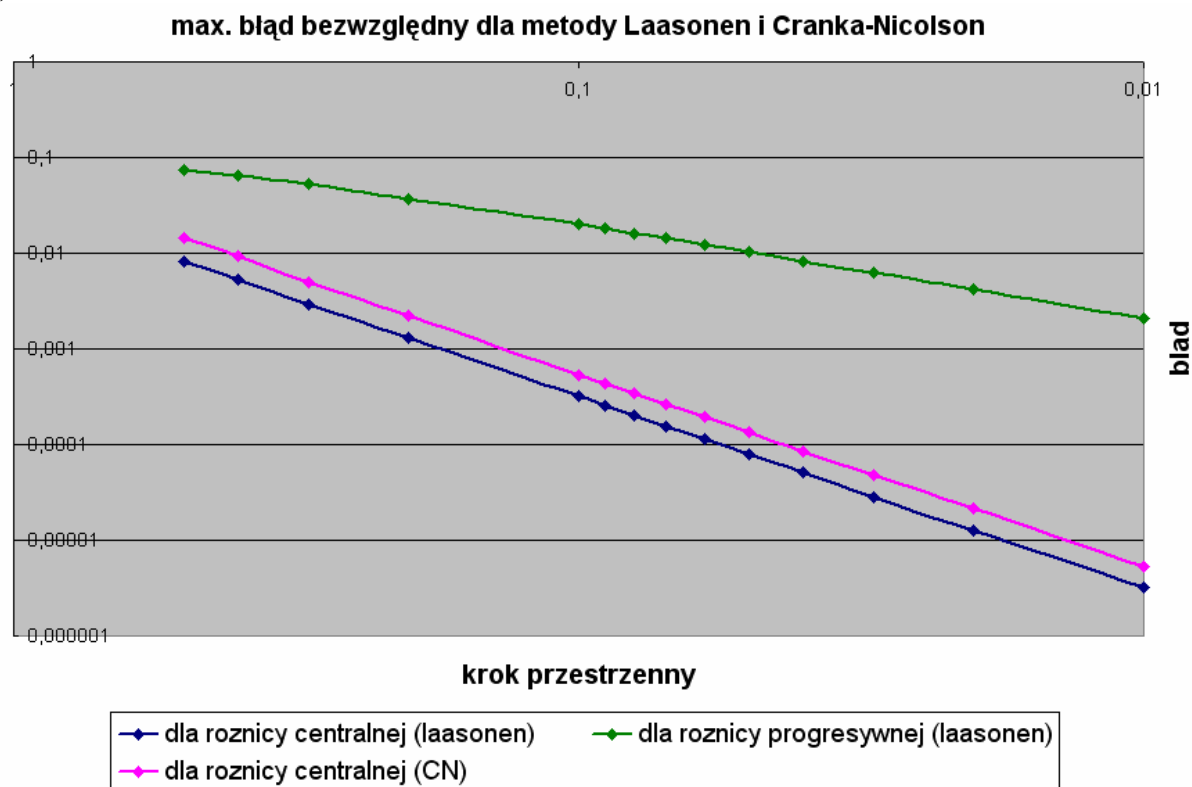
gdzie: $\lambda = D*dt/h^2$

Z równania powstaje układ z dwiema macierzami trójdagonalnymi zawierającymi współczynniki równania który po uwzględnieniu warunku początkowego, wymnożeniu macierzy po prawej stronie przez wektor znanych wartości równania z poziomu czasowego k oraz dodaniu warunków brzegowych można rozwiązać np. poprzez algorytm Thomasa.

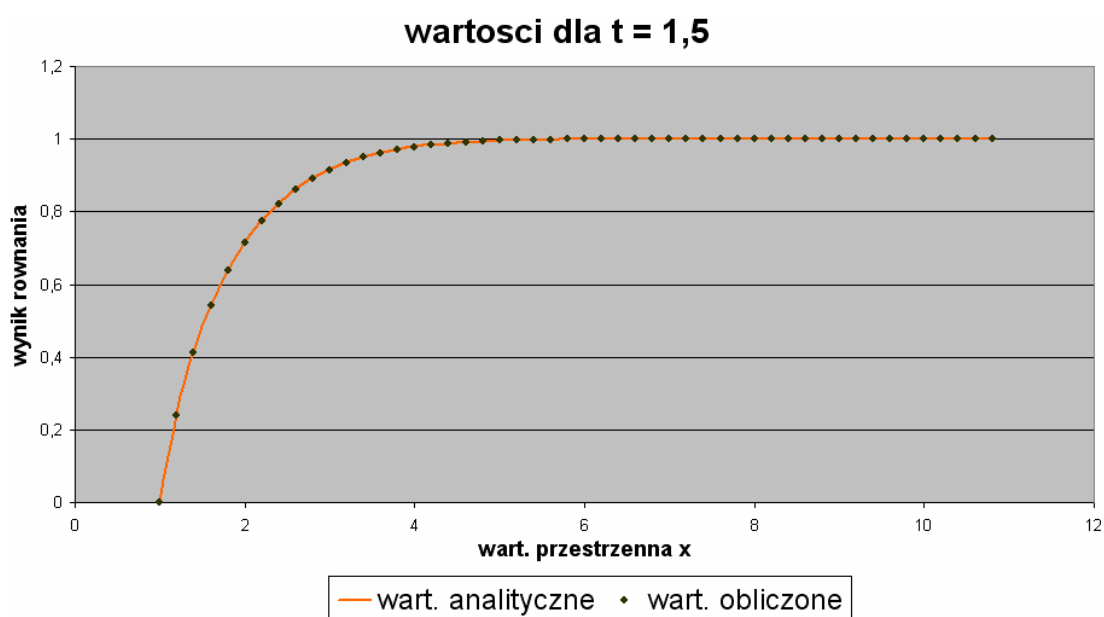
Wyniki i wykresy

Szczegółowe wyniki działania programu jak i wszystkie konieczne wykresy dla poszczególnych metod znajdują się w dołączonych do sprawozdania plikach tekstowych oraz plikach programu Excel. Poniżej znajdują się wykresy.

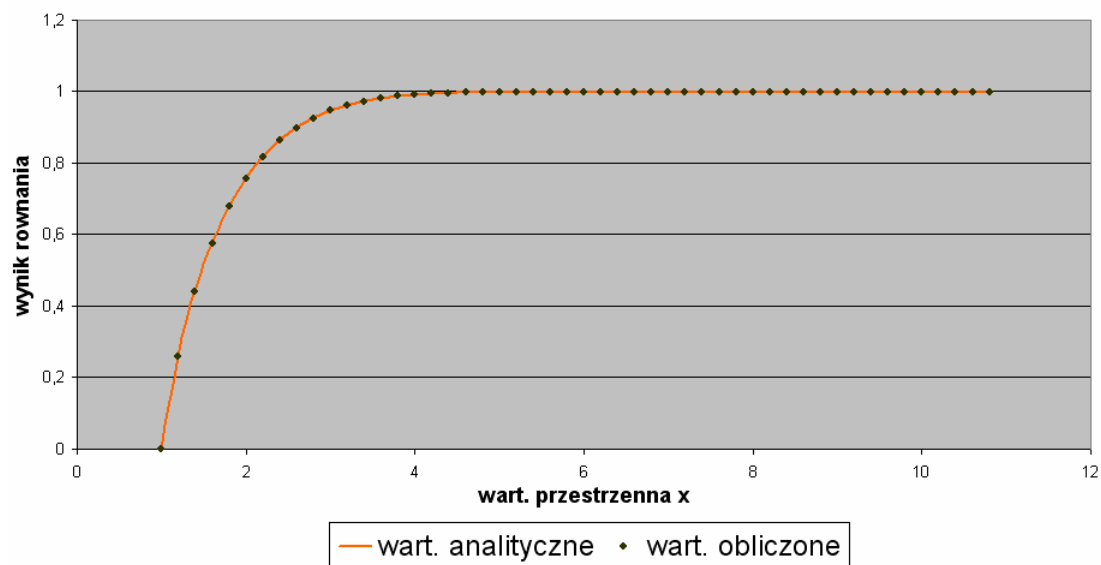
1)



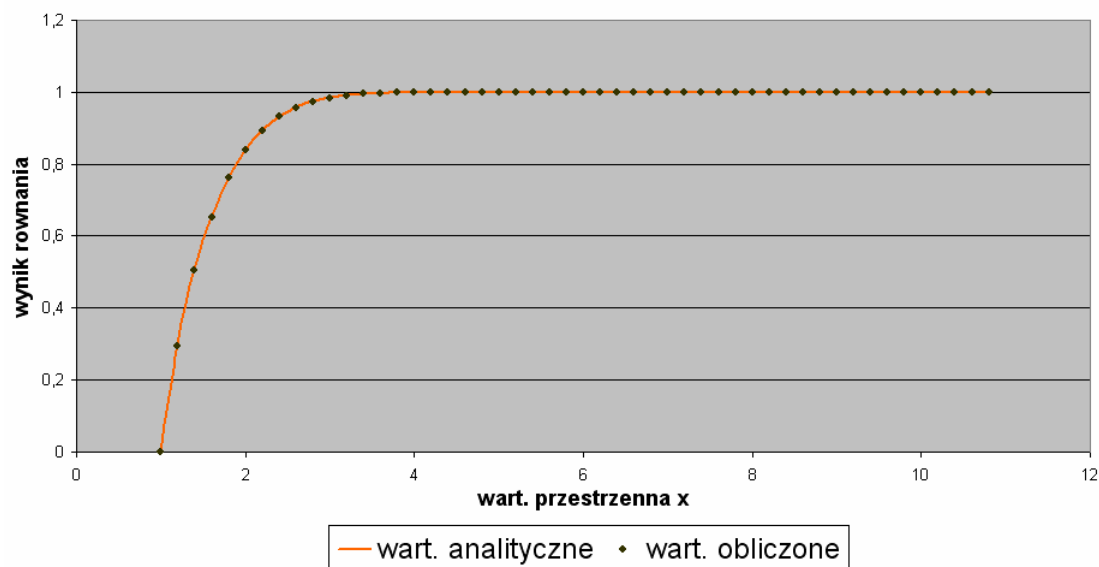
2) Metoda Laasonen



wartosci dla $t = 1$

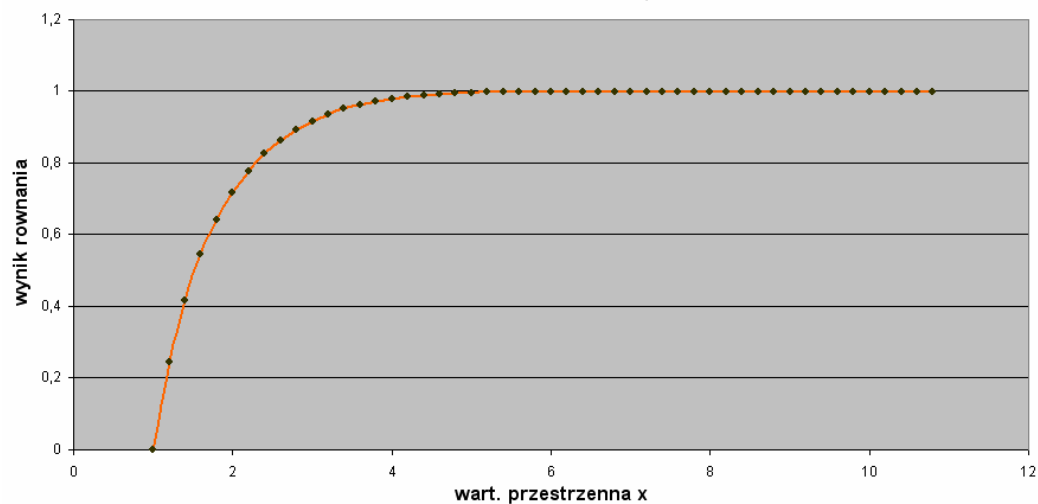


wartosci dla $t = 0.5$

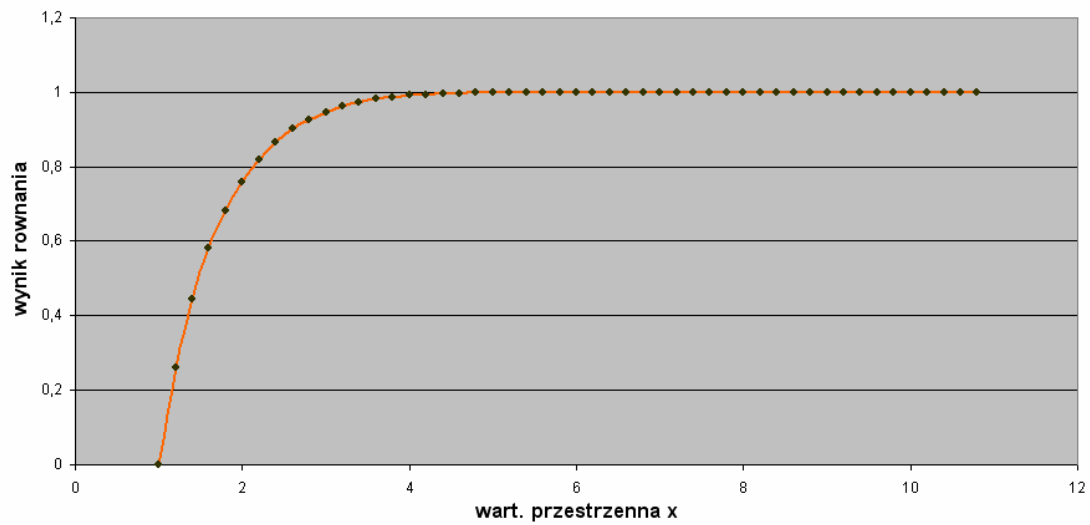


Metoda Cranka-Nicolson

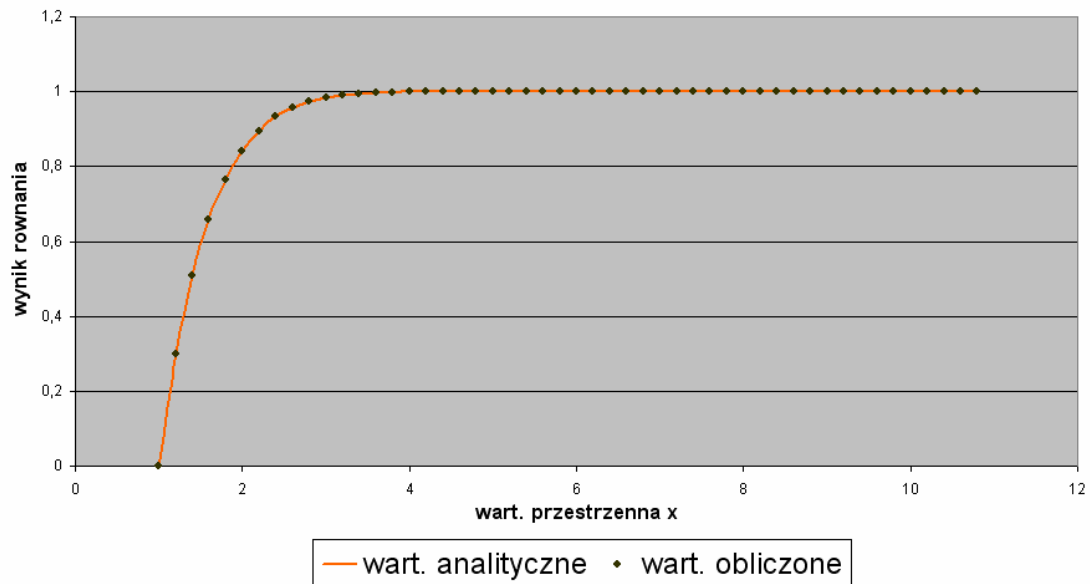
wartosci dla $t = 1,5$



wartosci dla $t = 1$

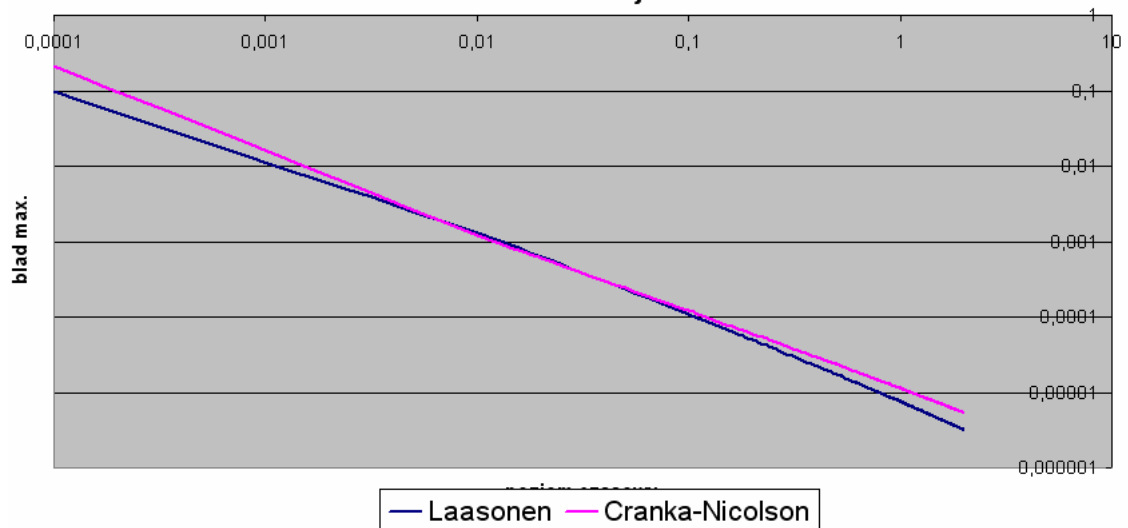


wartosci dla $t = 0.5$



3)

blad max. w funkcji czasu t



Wnioski

Pierwszy wykres zawiera dwa zbiory danych dla metody Laasonen ponieważ postać równania różniczkowego cząstkowego, które trzeba było rozwiązać, posiada dodatkową pierwszą pochodną przestrzenną (dodatkową w stosunku do bazowego równania dla którego opisane są metody dyskretyzacji). Wymagało to drobnego zmodyfikowania współczynników równań poszczególnych metod dyskretyzacji do postaci:

dla Laasonen:

$$\begin{aligned} &\lambda(1 - h/x)u_{i-1,k+1} - (1+2\lambda)u_{i,k+1} + \lambda(1 + h/x)u_{i+1,k+1} \quad (\text{prz. centralne}) \\ &\lambda u_{i-1,k+1} - [1 + \lambda(2 + 2h/x)]u_{i,k+1} + \lambda(1 + 2h/x)u_{i+1,k+1} \quad (\text{prz. progresywne}) \end{aligned}$$

dla Cranka-Nicolson:

$$\begin{aligned} &\lambda(0.5 - h/x)u_{i-1,k+1} - (1 + \lambda)u_{i,k+1} + \lambda(0.5 + h/x)u_{i+1,k+1} \quad (\text{prz. centralne}) \\ &\lambda/2 u_{i-1,k+1} - [1 + \lambda(1 + 2h/x)]u_{i,k+1} + \lambda(0.5 + 2h/x)u_{i+1,k+1} \quad (\text{prz. progresywne}) \end{aligned}$$

Wykres ten zawiera zbiór danych dla przypadku w którym pochodna ta została zastąpiona przybliżeniem progresywnym (tylko dla metody Laasonen) i dla przypadku w którym została zastąpiona przybliżeniem centralnym. Z wykresu widać wyraźnie, że rzędy dokładności potwierdzają teoretyczne przypuszczenia. Dokładność przybliżenia trzypunktowego drugiej pochodnej przestrzennej jest kwadratowa (h^2) jednak w połączeniu z prz. progresywnym dodatkowej pochodnej przestrzennej dokładność staje się liniowa (h). Z prz. centralnym nie ma już tego problemu i widać, że dokładność jest drugiego rzędu (h^2).

Drugi zestaw wykresów przedstawia wartości analityczne oraz obliczone dla pewnych wartości czasu t .

Trzeci wykres pokazuje, że metoda Laasonen jest nieco bardziej dokładna w czasie. Metoda Cranka-Nicolson wykazuje się nieco większą zbieżnością dla początkowych poziomów czasowych. W obu przypadkach błąd maleje liniowo w czasie.