

**Sprawozdanie z zajęć 11 z przedmiotu “Metody Obliczeniowe”,
prowadzący: dr.hab.inż. L. Bieniasz.**

1. Zadanie:

Zagadnienie z warunkiem początkowym i brzegowym obejmuje:

równanie różniczkowe cząstkowe $\frac{\partial U(x,t)}{\partial t} = D \left[\frac{\partial^2 U(x,t)}{\partial x^2} + \pi^2 \sin(\pi x) \right]$, określone dla współrzędnej

przestrzennej $x \in [0, 1]$ oraz czasu $t \in [0, t_{\max}]$,

warunek początkowy $U(x,0) = 0$, oraz

warunki brzegowe $U(0,t) = 0$, $U(1,t) = 0$.

Zagadnienie to może opisywać powstanie stanu ustalonego dla stężenia substancji o współczynniku dyfuzji D , w membranie o grubości 1 i przenikalnych ściankach, w wyniku ucieczki substancji z membrany wskutek transportu dyfuzyjnego, oraz powstawania tej substancji wewnątrz membrany.

Rozwiązanie analityczne tego zagadnienia ma postać: $U(x,t) = [1 - \exp(-\pi^2 Dt)] \sin(\pi x)$.

Należy rozwiązać to zagadnienie stosując zaznaczoną niżej kombinację algorytmów numerycznych oraz podane wartości parametrów. Należy przyjąć ustaloną wartość $\lambda = D \delta t / h^2$, możliwie najbliższą $\lambda = 0.4$ dla metody bezpośredniej lub $\lambda = 1$ dla metod pośrednich (uwaga na ograniczenia stabilności numerycznej!). Rozwiązania numeryczne należy porównać z analitycznymi i wyznaczyć błędy bezwzględne rozwiązań numerycznych. Jeżeli poniżej zaznaczono dwa alternatywne algorytmy, to wówczas w programie należy zrealizować oba, a uzyskane wyniki porównać.

Do zaliczenia projektu należy wykonać:

- (1) Wykresy zależności maksymalnej wartości bezwzględnej błędów obserwowanej dla t_{\max} , w funkcji kroku przestrzennego h (najlepiej w skali logarytmicznej, o ile to możliwe). Należy sprawdzić, czy zależność jest zgodna z teoretycznym rzędem dokładności i wyjaśnić ewentualne niezgodności. Do dalszych wykresów należy dobrać krok czasowy (i przestrzenny) tak, aby uzyskać możliwie jak najlepszą dokładność rozwiązania w czasie obliczeń nie przekraczającym około jednej minuty, dla najszybszego z rozważanych wariantów obliczeń. Wyniki numeryczne oraz rozwiązania analityczne i błędy odpowiadające tej sytuacji należy zapisać w zbiorze, w postaci sformatowanej umożliwiającej przeglądanie wyników.
- (2) Wykresy rozwiązań numerycznych i analitycznych dla kilku wybranych wartości czasu t z całego przedziału t (rozwiązania numeryczne punktami, rozwiązania analityczne linią ciągłą).
- (3) Wykresy zależności maksymalnej wartości bezwzględnej błędów w funkcji czasu t . Należy wyjaśnić ewentualnie obserwowane zmiany błędów w czasie.

Dyskretyzacja:

- Klasyczna metoda Bezpośrednia
- Metoda pośrednia Cranka-Nicolson

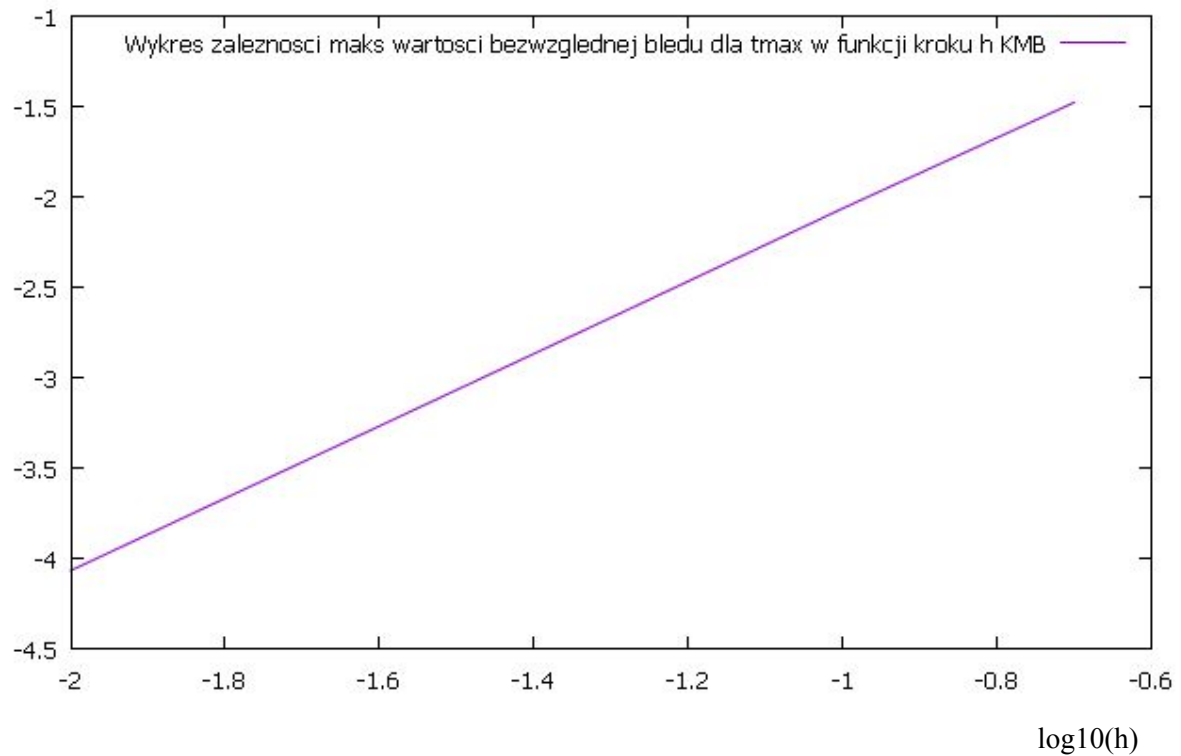
Parametry:

- $t_{\max} = 0.5$
- $D = 1$

2. Wykresy

a) Wykres zależności maksymalnej wartości bezwzględnej błędu obserwowanej dla t_{\max} w funkcji kroku przestrzennego h dla klasycznej metody bezpośredniej.

$\log_{10}(\text{bład})$



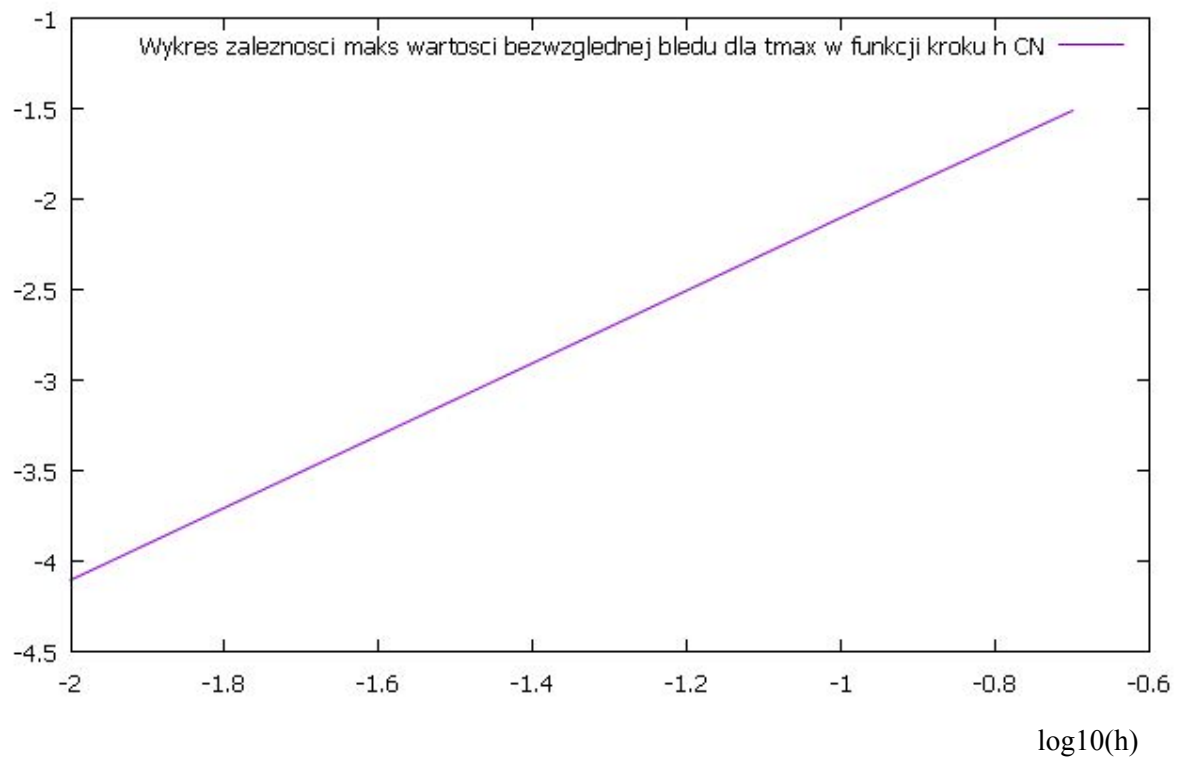
Obliczanie rzędu dla klasycznej metody bezpośredniej::

$$2,55/1,3 = \mathbf{1,96}$$

Rząd teoretyczny: **2**

a) Wykres zależności maksymalnej wartości bezwzględnej błędu obserwowanej dla t_{\max} w funkcji kroku przestrzennego h dla metody pośredniej Cranka-Nicolson.

$\log_{10}(\text{bład})$



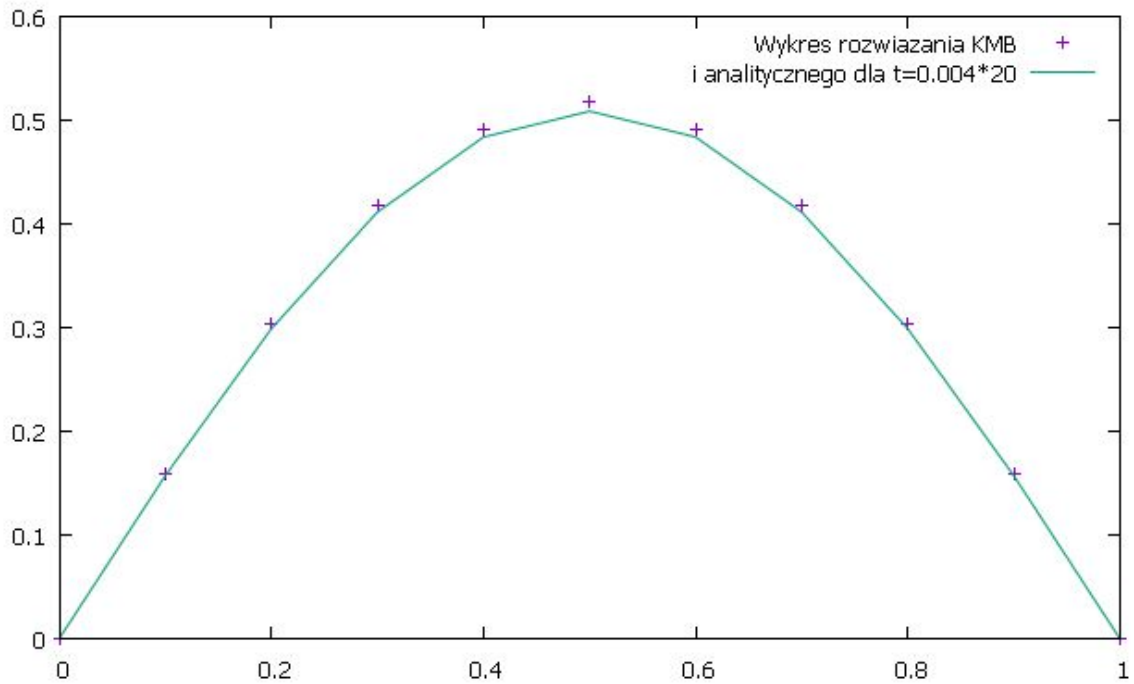
Obliczanie rzędu dla metody pośredniej Cranka-Nicolson:

$$2,6/1,3 = 2$$

Rząd teoretyczny: **2**

b) Wykresy rozwiązań numerycznych i analitycznych dla kilku wybranych wartości czasu t z całego przedziału t . Klasyczna metoda bezpośrednia.
dla $t = 0.08$

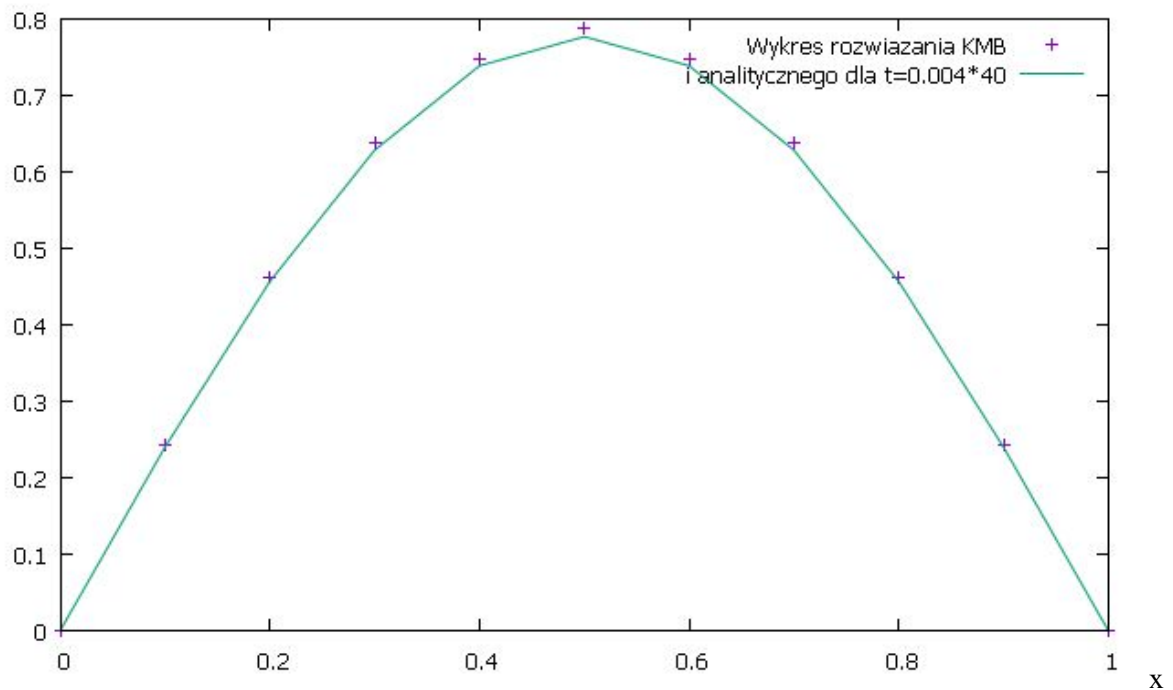
$U(x,t)$



x

dla $t = 0.16$

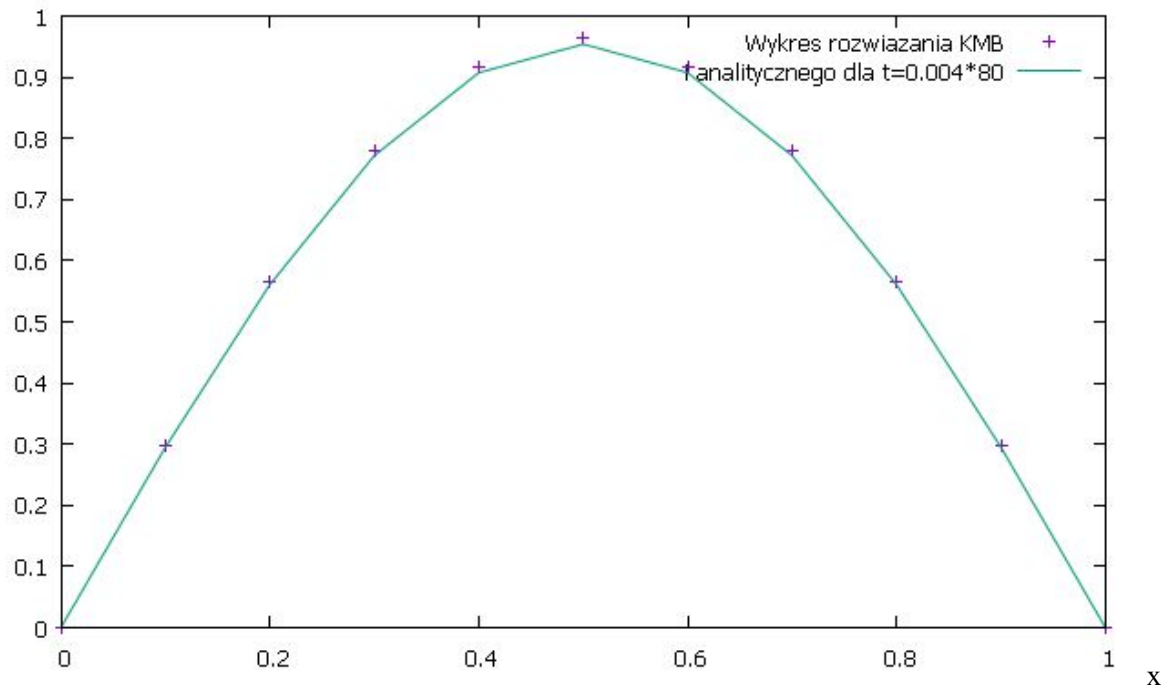
$U(x,t)$



x

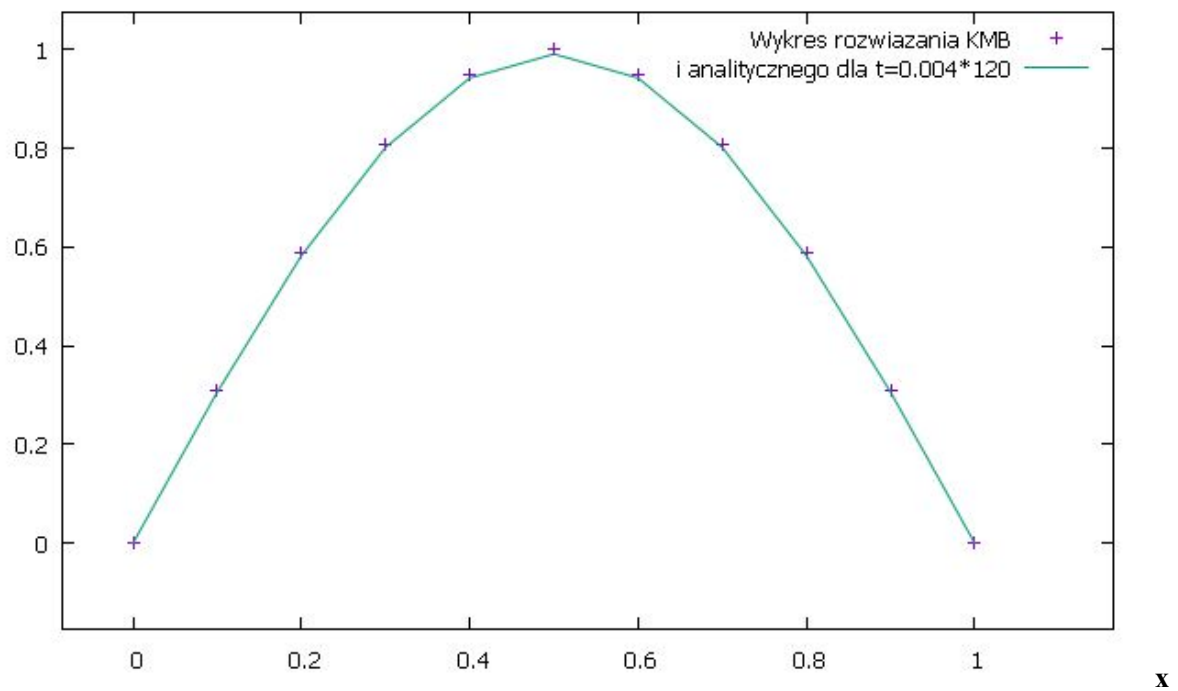
dla $t = 0.32$

$U(x, t)$



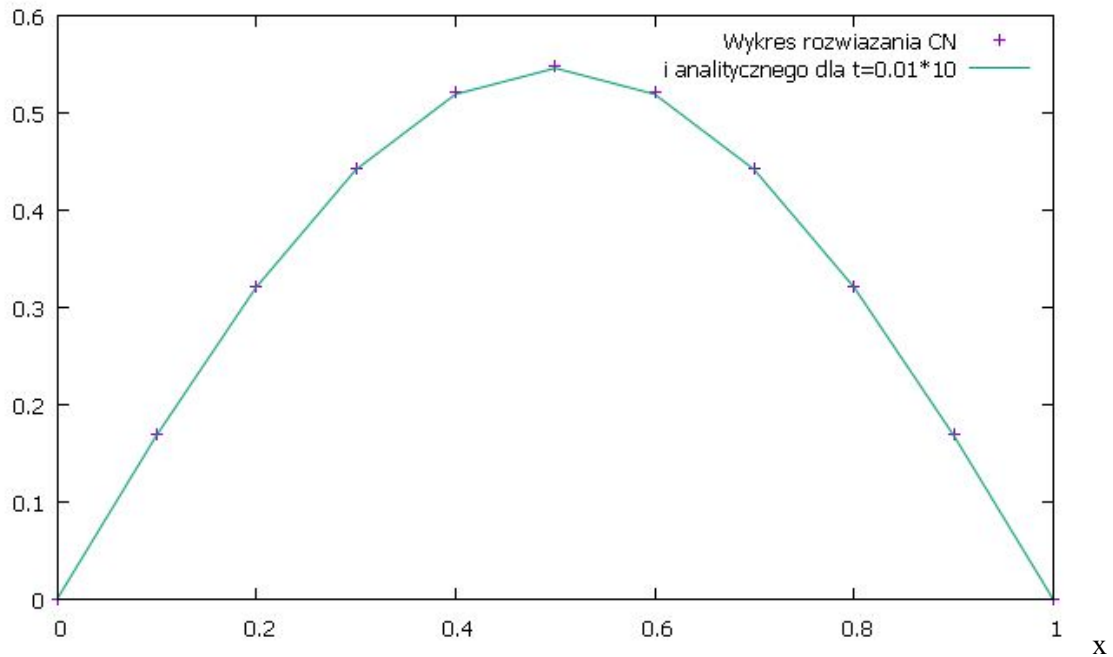
dla $t = 0.48$

$U(x, t)$



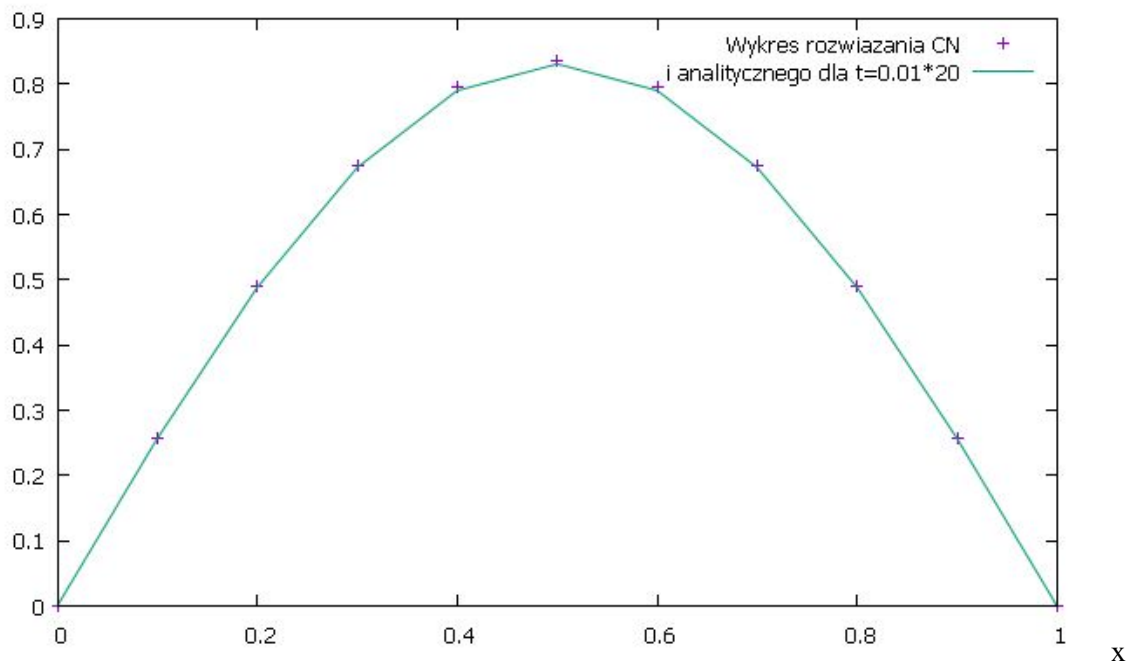
b) Wykresy rozwiązań numerycznych i analitycznych dla kilku wybranych wartości czasu t z całego przedziału t . Pośrednia metoda Cranka-Nicolson..
dla $t = 0.1$

$U(x,t)$



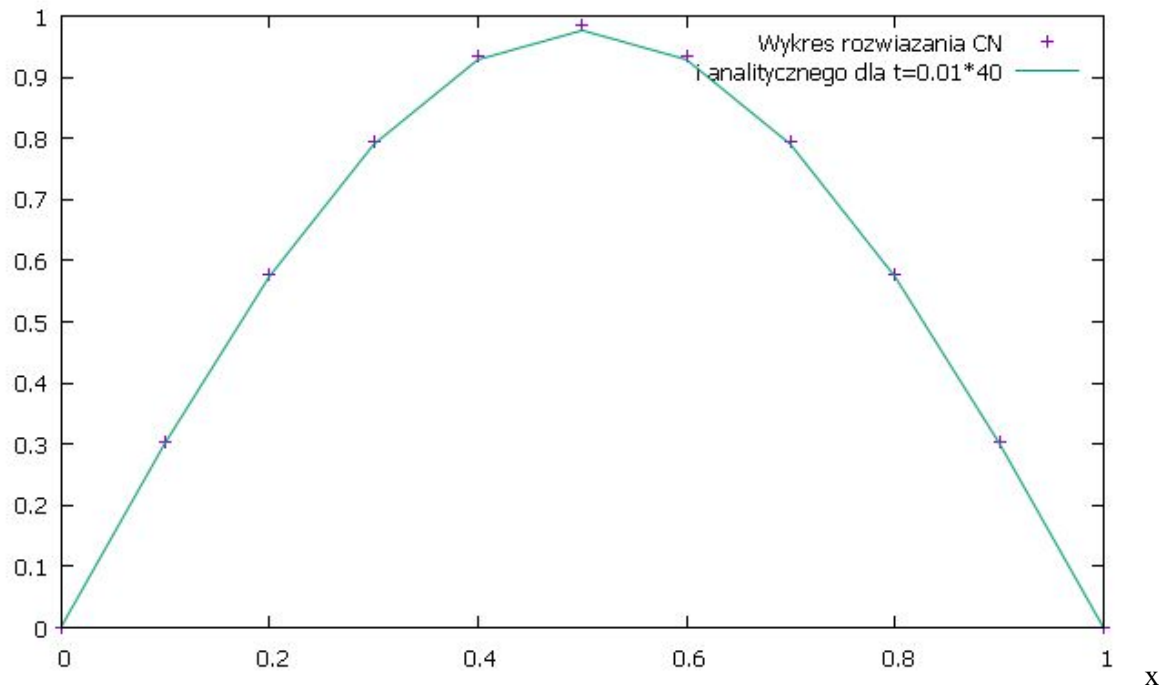
dla $t = 0.2$

$U(x,t)$



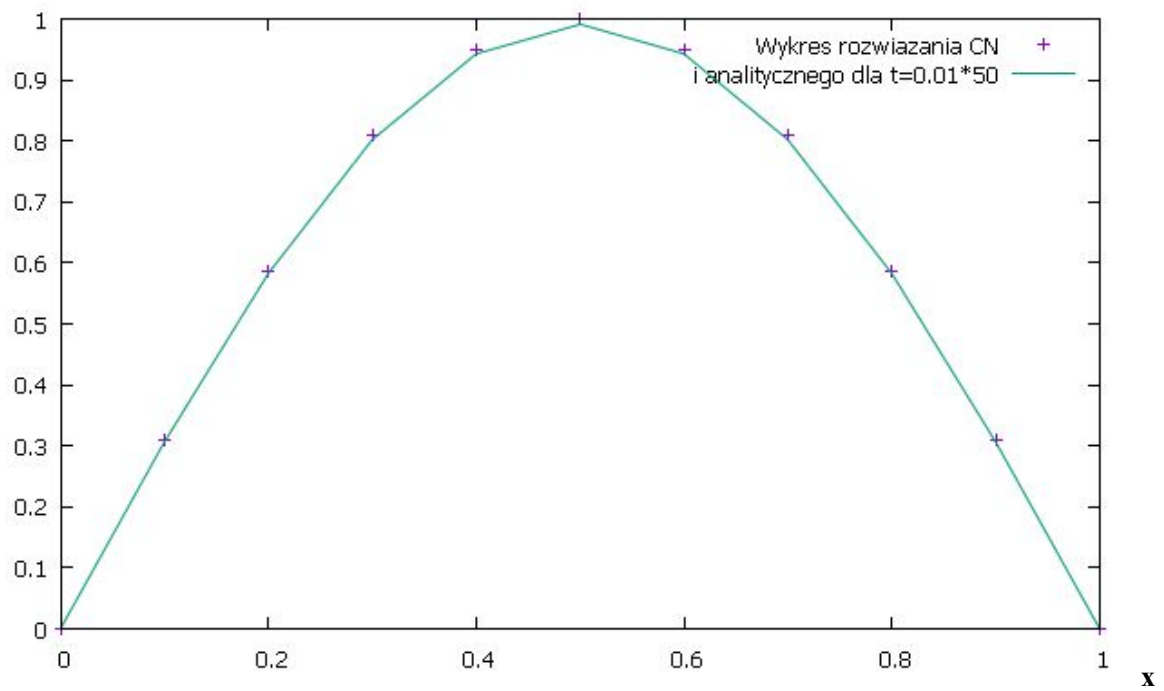
dla $t = 0.4$

$U(x, t)$



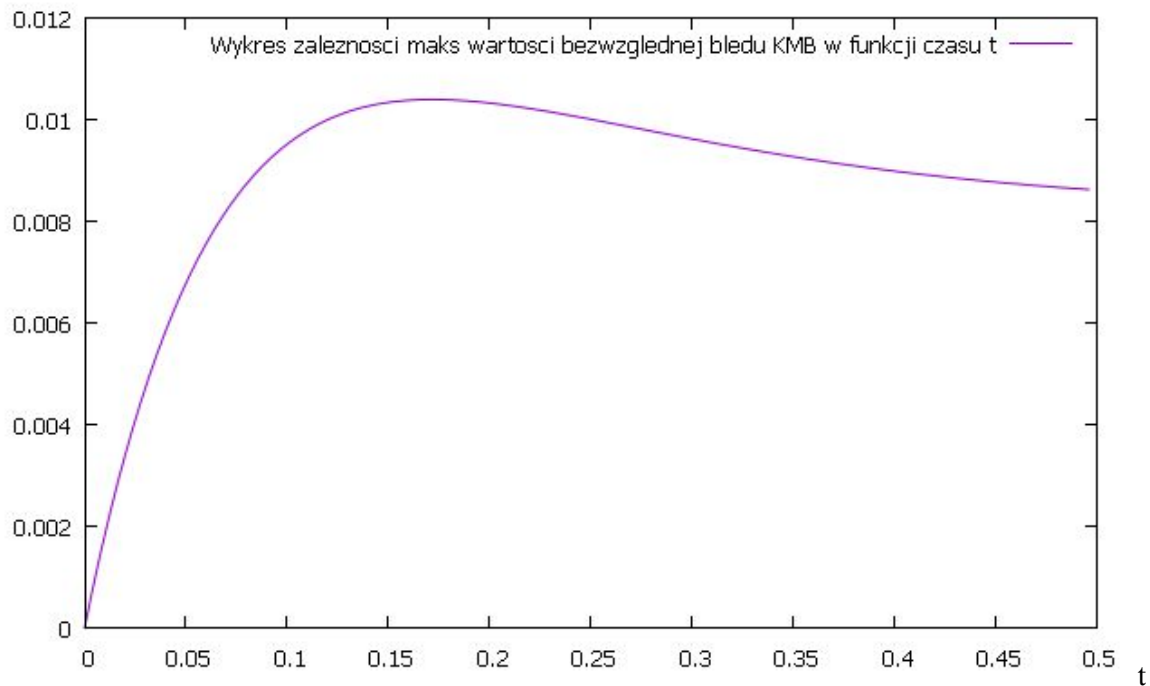
dla $t = 0.5$

$U(x, t)$



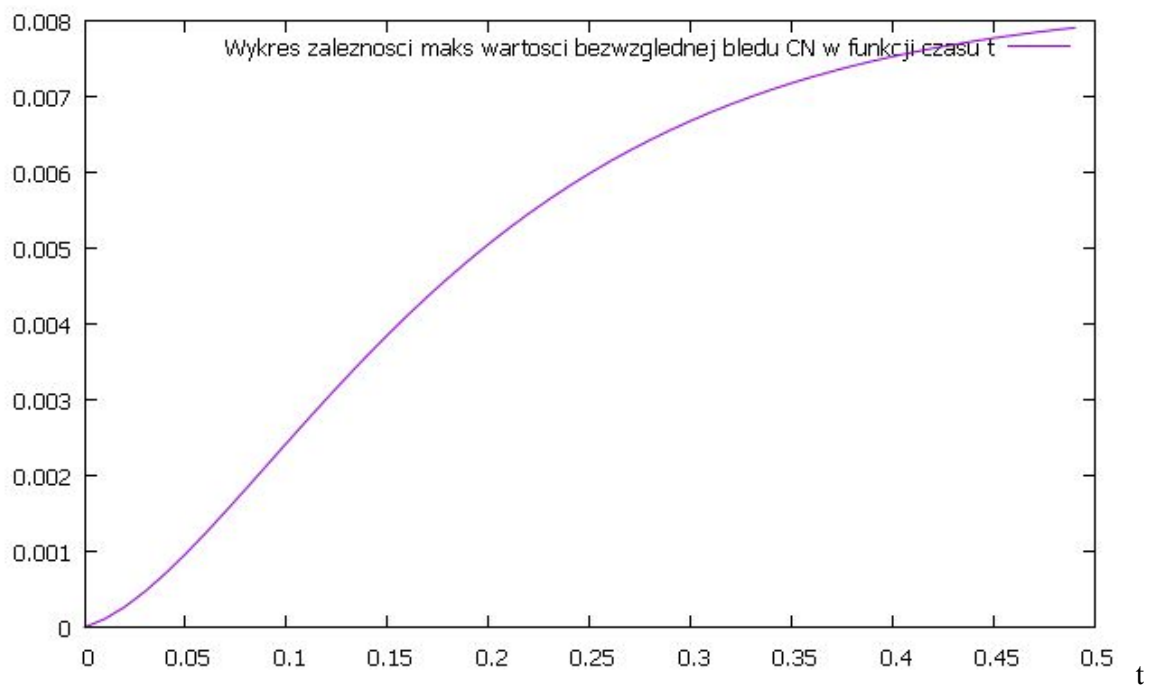
c) Wykres zależności maksymalnej wartości bezwzględnej błędu w funkcji czasu t dla klasycznej metody bezpośredniej.

y - maks wartość bezwzględna błędu



c) Wykres zależności maksymalnej wartości bezwzględnej błędu w funkcji czasu t dla metody pośredniej Cranka-Nicolson.

y - maks wartość bezwzględna błędu



3. Wnioski

Obliczenia numeryczne wartości równania różniczkowego wykorzystujące dyskretyzację klasyczną metodę bezpośrednią lub metodę pośrednią Cranka-Nicolson i dekompozycję LU do rozwiązywania układu równań są dokładne. Nie oznacza to jednak, że nie są obarczone błędem. Dla powyższych metod z krokiem $h = 0.1$ dla t w przedziale $[0, 0.5]$ błąd nie przekracza 0.008 dla metody CN oraz 0.11 dla metody KMB. Z uwagi na niewielki czas obliczeń jest to zadowalająca dokładność.

Niedokładności w obliczeniach pojawiają się ze względu na błędy maszynowe, błędy obcięcia oraz błędy dyskretyzacji.

Na podstawie wykresu zależności maksymalnej wartości bezwzględnej błędu obserwowanej dla t_{\max} w funkcji kroku przestrzennego h można zauważyć, że im mniejszy krok tym mniejsza wartość błędu maksymalnego a co za tym idzie większa dokładność wyniku.

Ponieważ do dyskretyzacji w zadaniu trzeba było użyć klasycznej metody bezpośredniej, nie potrzebne okazało się użycie algorytmu dekompozycji LU do rozwiązania układu równań. W wypadku użycia metody pośredniej użycie algorytmu LU było wymagane.

Obliczony rząd dokładności dla obu metod pokrywa się z rzędem dokładności teoretycznym.

Program:

```
#include <iostream>
#include <fstream>
#include <math.h>
#include <vector>

class DyskretyzacjaRozwiazanie
{
private:
    double xmin, xmax, tmin, tmax;
    double D, h, lambda, dt;
    int wiersz, kolumna;
    double PI = 3.14159265359;
public:
    DyskretyzacjaRozwiazanie(double lambda) :
        lambda(lambda), xmin(0), xmax(1.0),
        tmin(0), tmax(0.5), D(1.0), h(0.1)
    {
        dt = (lambda*h*h)/D;
        wiersz = static_cast<int>((tmax - tmin)/dt + 1);
        kolumna = static_cast<int>((xmax - xmin)/h + 1);
    }
}
```

```

std::vector<std::vector<double>>> Analityczna(std::vector<std::vector<double>>> U)
{
    for(int i = 1; i<U.size(); i++)
    {
        for(int j=1; j<U[0].size()-1; j++)
        {
            U[i][j] = (1 - exp(-(PI*PI)*this->D*dt*i))*sin(PI*j*h);
        }
    }
    return U;
}

std::vector<std::vector<double>>>
KlasycznaMetodaBezposrednia(std::vector<std::vector<double>>> U){
    U=wypelnijMacierzWarunkiemBrzegowym(U);
    U=wypelnijMacierzWarunkiemPoczkowym(U);

    for(int i = 1; i < U.size(); i++){
        for(int j = 1; j < U[0].size()-1; j++){

U[i][j]=lambda*U[i-1][j-1]+(1-2*lambda)*U[i-1][j]+lambda*U[i-1][j+1]+dt*(PI*PI)*sin(PI*j*h);
        }
    }
    return U;
}

int wyborCzesciowy(std::vector<std::vector<double>>>& macierz, int j, int *indeksy){
    int w;
    for(int i = j + 1; i < macierz.size(); i++) {
        if(fabs(macierz.at(indeksy[i]).at(j)) < fabs(macierz.at(indeksy[i + 1]).at(j))) {
            w = indeksy[i + 1];
        }
        else{
            w = indeksy[i];
        }
    }
    return w;
}

std::vector<std::vector<double>>> dekompozycjaLU(std::vector<std::vector<double>>> macierz){

    int rozmiar = macierz.size();
    int* indeksy = new int[rozmiar]; //wektor przechowywuj¹cy kolejnoœæ wierszy
    double element;

```

```

for(int i = 0; i < rozmiar; i++)
    indeksy[i] = i; //numeracja wierszy macierzy po kolei

//k oznacza k etap
for(int k = 1; k < rozmiar; k++) {
    element = macierz.at(indeksy[k - 1]).at(k - 1);

    if(element == 0.0) {
        //bierzemy biezacy (dla nas to bedzie 1 czyli kolejny) wiersz i iterujemy do max rozmiaru
        int w = wyborCzesciowy(macierz, indeksy[k], indeksy);
        indeksy[w] = indeksy[k];
        indeksy[k] = w;
        element = macierz[indeksy[k - 1]][k - 1];
    }
    //rozpoczecie iterowania dla tablicy zaczynajacej sie od przekatnej
    for(int i = k; i < rozmiar; i++) {
        //zaczynamy od 'wiersza nizej' bo i=k
        double mnoznik = macierz[indeksy[i]][k - 1] / element;
        macierz[indeksy[i]][k - 1] = mnoznik;
        for(int j = k; j < rozmiar; j++) {
            macierz[indeksy[i]][j] -= macierz[indeksy[k - 1]][j] * mnoznik;
        }
    }
}
return macierz;
}

```

```

std::vector<double> rozwarz(std::vector<std::vector<double>> macierz, std::vector<double>
wektor){
    int rozmiar = macierz.size();
    std::vector<double> x(rozmiar, 0);
    std::vector<double> y(rozmiar, 0);
    y[0] = wektor[0]; //dla 0 0 ze wzoru
    for(int i = 1; i < rozmiar; i++) {
        y[i] = wektor[i];
        for(int j = 0; j < i; j++) {
            y[i] = y[i] - macierz[i][j] * y[j];
        }
    }
    x[rozmiar - 1] = y[rozmiar - 1] / macierz[rozmiar - 1][rozmiar - 1];
    for(int i = rozmiar - 1; i >= 0; i--) {
        x[i] = y[i];
        for(int j = i + 1; j < rozmiar; j++) {
            //od przekatnej do konca
            x[i] = x[i] - macierz[i][j] * x[j];
        }
    }
}

```

```

    }
    //koncowe podzielenie przez wartosc na przekatnej
    x[i] = x[i] / macierz[i][i];

}
return x;
}

```

```

std::vector<std::vector<double>>> CrankNicolson(std::vector<std::vector<double>>> U){
    U=wypelnijMacierzWarunkiemBrzegowym(U);
    U=wypelnijMacierzWarunkiemPoczkowym(U);
    std::vector<std::vector<double>>> A(kolumna, std::vector<double>(kolumna, 0));
    std::vector<double> B;

    A.at(0).at(0) = 1;

    for(int i = 1; i<kolumna-1; i++){
        A.at(i).at(i-1) = lambda/2.0;
        A.at(i).at(i) = -(1+lambda);
        A.at(i).at(i+1) = lambda/2.0;
    }
    A.at(kolumna-1).at(kolumna-1) = 1;
    std::vector<std::vector<double>>> LU = dekompozycjaLU(A);
    for(int i = 1; i<wiersz; i++){
        B.clear();
        B.push_back(0);
        for(int j = 1; j<kolumna-1; j++){
            B.push_back(-((lambda/2.0)*U.at(i-1).at(j-1)+(1-lambda)*U.at(i-1).at(j)+(lambda/2.0)*U.at(i-1).at(j+
1))-dt*(PI*PI)*sin(PI*j*h));
        }
        B.push_back(0);
        U.at(i) = rozwiaz(LU, B);
    }
    return U;
}

```

```

std::vector<std::vector<double>>> liczMacierzBledu(std::vector<std::vector<double>>> U,
std::vector<std::vector<double>>> Uanali)
{
    std::vector<std::vector<double>>> blad(U.size(), std::vector<double>(U[0].size(), 0));
    for(int i = 0; i<U.size(); i++){

```

```

        for(int j = 0; j<U[0].size();j++){
            blad.at(i).at(j) = fabs(U[i][j] - Uanali[i][j]);
        }
    }
    return blad;
}

```

```

std::vector<double> liczWektorBledowMaksOdT(std::vector<std::vector<double>>
macierzBledow)
{
    std::vector<double> blad(macierzBledow.size(), 0);
    double max;
    for(int i = 0; i<macierzBledow.size(); i++){
        blad[i] = fabs(macierzBledow[i][0]);
        for(int j = 0; j<macierzBledow[0].size();j++){
            if(fabs(blad[i])<fabs(macierzBledow[i][j]))
                blad[i]=fabs(macierzBledow[i][j]);
        }
    }
    return blad;
}

```

```

std::vector<std::vector<double>>
wypelnijMacierzWarunkiemBrzegowym(std::vector<std::vector<double>> macierz){
    for(int i = 0; i<macierz.size();i++){
        macierz[i][0] = 0;
        macierz[i][macierz[0].size()-1] = 0;}
    return macierz;}

```

```

std::vector<std::vector<double>>
wypelnijMacierzWarunkiemPoczkowym(std::vector<std::vector<double>> macierz){
    for(int i = 0; i<macierz[0].size();i++){
        macierz[0][i] = 0;}
    return macierz;}

```

```

void zapiszRozwiazanieTransponowaneDoPliku(std::fstream& plik, std::vector<std::vector<double
>> U){
    std::vector<std::vector<double >> UT = transponujMacierz(U);
    for(int i=0;i<UT.size();i++){
        plik << this->h*i << " ";
        for(int j = 0;j<UT[0].size();j++){
            plik << UT[i][j] << " ";}
        plik << std::endl;}}

```

```

void zapiszRozwiazanieDoPliku(std::fstream& plik, std::vector<std::vector<double>> U){
    for(int i=0;i<U.size();i++){
        for(int j = 0;j<U[0].size();j++){
            plik << U[i][j] << " ";
        }
        plik << std::endl;
    }

    void zapiszMaxBladDoPliku(std::fstream& plik, std::vector<double> wektor){
        for(int i = 0; i<wektor.size();i++){
            plik << dt*i << " " << wektor.at(i) << " " << log10(dt*i) << " " << log10(wektor.at(i)) <<
std::endl;
        }

        void zapiszMaxBladTMaksDoPliku(std::fstream& plik, std::vector<double> wektor){
            double k = 0.01;
            for(int i = 0; i<wektor.size();i++){
                plik << k << " " << wektor.at(i) << " " << log10(k) << " " << log10(wektor.at(i)) << std::endl;
                k+=0.01;
            }

            std::vector<std::vector<double>> transponujMacierz(std::vector<std::vector<double>> U){
                std::vector<std::vector<double>> UT(U[0].size(), std::vector<double>(U.size(), 0));
                for(int i = 0; i < U.size(); i++)
                    for(int j = 0; j < U[0].size(); j++) UT[j][i] = U[i][j];
                return UT;
            }

            void rysujMacierz(std::vector<std::vector<double>> macierz){
                for(int i = 0; i<macierz.size();i++){
                    for(int j = 0; j<macierz[0].size();j++){
                        std::cout << macierz.at(i).at(j);
                    }
                    std::cout << std::endl;
                }

                void rysujWektor(std::vector<double> wektor){
                    for(int i = 0; i<wektor.size();i++){
                        std::cout << wektor.at(i);
                    }

                    std::vector<std::vector<double>> dajMacierz(){
                        std::vector<std::vector<double>> U(wiersz, std::vector<double>(kolumna, 0));
                        return U;
                    }

                };

```

```

int main()

```

```

{
    DyskretyzacjaRozwiazanie KMB(0.4);
    std::vector<std::vector<double>> U1 = KMB.dajMacierz();
    std::fstream fakmb("analityczneKMB.txt", std::ios::out);
    std::fstream fbkmb("KMB.txt", std::ios::out);
    std::fstream fbladkmb("macierzbleduKMB.txt", std::ios::out);
    std::fstream fmaxbladkmb("wektormaxbleduKMB.txt", std::ios::out);

    std::vector<std::vector<double>> AKMB;
    std::vector<std::vector<double>> BKMB;
    std::vector<std::vector<double>> bladKMB;
    std::vector<double> maksBladKMB;

    AKMB = KMB.Analityczna(U1);
    BKMB = KMB.KlasycznaMetodaBezposrednia(U1);
    bladKMB = KMB.liczMacierzBledu(BKMB,AKMB);
    maksBladKMB = KMB.liczWektorBledowMaksOdT(bladKMB);

    KMB.zapiszRozwiazanieTransponowaneDoPliku(fakmb,AKMB);
    KMB.zapiszRozwiazanieTransponowaneDoPliku(fbkmb,BKMB);
    KMB.zapiszRozwiazanieTransponowaneDoPliku(fbladkmb,bladKMB);
    KMB.zapiszMaxBladDoPliku(fmaxbladkmb, maksBladKMB);

    //

    DyskretyzacjaRozwiazanie CN(1.0);
    std::vector<std::vector<double>> U2 = CN.dajMacierz();

    std::fstream facn("analityczneCN.txt", std::ios::out);
    std::fstream fbcn("CN.txt", std::ios::out);
    std::fstream fbladcn("macierzbleduCN.txt", std::ios::out);
    std::fstream fmaxbladcn("wektormaxbleduCN.txt", std::ios::out);

    std::vector<std::vector<double>> ACN;
    std::vector<std::vector<double>> BCN;
    std::vector<std::vector<double>> bladCN;
    std::vector<double> maksBladCN;

    ACN = CN.Analityczna(U2);
    BCN = CN.CrankNicolson(U2);
    bladCN = CN.liczMacierzBledu(BCN,ACN);
    maksBladCN = CN.liczWektorBledowMaksOdT(bladCN);

    CN.zapiszRozwiazanieTransponowaneDoPliku(facn,ACN);
    CN.zapiszRozwiazanieTransponowaneDoPliku(fbcn,BCN);
    CN.zapiszRozwiazanieTransponowaneDoPliku(fbladcn,bladCN);

```

```
CN.zapiszMaxBladDoPliku(fmaxbladen, maksBladCN);
```

```
}
```