

Cor:Cor

GRUP C3

Isaac Baldi

Marcel López Freixes (1668323)

Eira Jacas García (1666616)

Núria Castillo Ariño (1669145)

data

1 Introducció

En aquesta pràctica hem solucionat numèricament l'equació de difusió de la calor amb una font d'energia externa. El problema es contextualitza en l'ablació cardíaca, que es una cirurgia simple que es basa en escalfar el teixit biològic entre els ventricles del cor amb dos elèctrodes de polaritats oposades. Les condicions perquè el mètode sigui efectiu són que cap regió pot sobrepassar els 80°C i que la regió de teixit sa no superi els 50°C, quan comença la mort cel·lular. Nosaltres ens proposem trobar el temps màxim que podem aplicar un potencial de 40V entre els elèctrodes sense trencar aquestes condicions. Per fer-ho provarem tres mètodes numèrics diferents: Euler explícit, Euler implícit i Crank-Nicolson i en compararem els errors per decidir quin es millor per solucionar el problema.

$$c_v \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + P_{\text{ext}} \quad (1)$$

Si simplifiquem el sistema un espai cilíndricament simètric, ens queda

$$c_v \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + P_{\text{ext}} \quad (2)$$

2 normalització

Dividint l'eq. (2) per $c_v \rho$ i definint $\lambda = \frac{P_{\text{ext}}}{c_v \rho}$, queda

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \lambda \implies \frac{1}{\lambda} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\alpha}{\lambda} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + 1 \quad (3)$$

on $\alpha = \frac{k}{\rho c_v}$ és la difusivitat tèrmica.

Si definim $\hat{x} = \frac{x}{L}$, $\hat{T} = T \frac{\alpha}{\lambda L^2}$ i $\hat{t} = t \frac{\alpha}{L^2}$, aleshores

$$\frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{t}} = \frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial \hat{x}^2} + 1 \quad (4)$$

3 Solució analítica

Seguint la solució de proposada a l'annex del guió amb $q(x, t) = 1$ i $\beta = \hat{T}(T_c)$, queda que

$$f(\hat{x}, \hat{t}) = \beta + \frac{4}{\pi^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1 - e^{-(2n-1)^2 \pi^2 \hat{t}}}{(2n-1)^3} \sin((2n-1)\pi \hat{x}) \quad (5)$$

4 Solució numèrica: Euler explícit

Per aplicar el mètode numèric d'euler explícit

$$\frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{t}} = \frac{\hat{T}_j^{n+1} - \hat{T}_j^n}{\Delta \hat{t}} \quad (6)$$

$$\frac{\delta^2 \hat{T}}{\delta \hat{z}^2} = \frac{\hat{T}_{j+1}^n - 2\hat{T}_j^n + \hat{T}_{j-1}^n}{\Delta \hat{z}^2} \quad (7)$$

5 Solució numèrica: mètode d'Euler implícit

En aquest mètode la derivada espacial de l'Eq. (??) es calcula de la mateixa manera que en l'explícit, és a dir, a partir de l'Eq. (??). La diferència recau en el càlcul de la derivada temporal: mentre que en el mètode explícit s'utilitza l'aproximació de la derivada per la dreta, en l'implícit s'aplica l'aproximació per l'esquerra, que ve donada per l'expressió següent:

$$\frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{t}} = \frac{\hat{T}_j^n - \hat{T}_j^{n-1}}{\Delta \hat{t}} \quad (8)$$

Substituint les aproximacions de les derivades corresponentment a l'equació diferencial i aïllant \hat{T}_j^n ,

$$\hat{T}_j^n = \frac{\gamma (\hat{T}_{j+1}^n + \hat{T}_{j-1}^n) + \hat{T}_j^{n-1} + \Delta \hat{t}}{1 + 2\gamma} \quad (9)$$

on $\gamma = \frac{\Delta \hat{t}}{\Delta \hat{z}^2}$.

A la part dreta de la igualtat apareixen temperatures corresponents al pas temporal n . Per tant, no és possible expressar \hat{T}_j^n en funció de temperatures únicament en temps anteriors. Aquest fet és el que confereix al mètode el seu caràcter implícit.

La resolució numèrica d'aquest problema es planteja com un sistema d'equacions algebraiques on les incògnites són les temperatures en cada posició per a un temps determinat. Aquest sistema es resol de manera iterativa a cada pas temporal n . Partint de les condicions inicials, es resol successivament cada sistema per obtenir les temperatures dels passos temporals següents de forma recursiva, aprofitant que els valors de \hat{T}_j^{n-1} són coneguts del pas anterior.

Remarquem que, per les condicions inicials i de contorn, les temperatures en $j = 1$, $j = N$ i $n = 1$ no són variables sinó valors ja coneguts. Concretament, $\hat{T}_j^1 = \hat{T}_1^n = \hat{T}_N^n = \beta$. Així doncs, per a $j = 2$ i $j = N - 1$ cal utilitzar expressions modificades.

La representació matricial del sistema es presenta a continuació, per a un n determinat. Els elements de cada element de la matriu s'obtenen dels coeficients que acompanyen a la corresponent variable en l'Eq. (??).

$$\begin{pmatrix} (2\gamma + 1) & -\gamma & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -\gamma & (2\gamma + 1) & -\gamma & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -\gamma & (2\gamma + 1) & -\gamma & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -\gamma & (2\gamma + 1) & -\gamma \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -\gamma & (2\gamma + 1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{T}_2^n \\ \hat{T}_3^n \\ \vdots \\ \hat{T}_{N-2}^n \\ \hat{T}_{N-1}^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta t + \beta\gamma + \hat{T}_2^{n-1} \\ \Delta t + \hat{T}_3^{n-1} \\ \vdots \\ \Delta t + \hat{T}_{N-2}^{n-1} \\ \Delta t + \beta\gamma + \hat{T}_{N-1}^{n-1} \end{pmatrix} \quad (10)$$

Per resoldre aquest sistema, utilitzem el mètode iteratiu de Gauss-Seidel. A continuació s'analitzen gràficament les solucions obtingudes numèricament, una utilitzant un pas de temps $\Delta t = \Delta x^2$; i una altra amb $\Delta t = 0.5\Delta x^2$.

A la Fig. ?? es presenta una gràfica que mostra el perfil espacial de temperatures en el temps t_a . S'hi representen les dues solucions numèriques obtingudes junt amb la solució analítica. L'espai delimitat per les rectes vermelles representa la regió malalta.

Adicionalment, a la Fig. ?? s'hi inclou una gràfica de l'error absolut associat a cadascuna de les solucions numèriques respecte la solució analítica, en funció de la posició.

En la Fig. ??, les tres corbes pràcticament es solapen, el qual indica que les solucions numèriques són gairebé idèntiques a l'analítica. Això posa de manifest l'alta precisió del mètode en ambdós casos.

Pel que fa la gràfica de l'error, es constata que aquest és molt petit (es manté inferior a 0.01°C) per a les dues solucions numèriques. No obstant això, permet identificar millor les diferències entre les solucions amb diferents maiats temporals. S'aprecia que, per un valor de $\gamma = 0.5$, l'error és lleugerament menor que per $\gamma = 1$. Això suggereix que l'ús d'un pas temporal més petit millora la precisió, tot i que la convergència del mètode es manté robusta per a ambdós valors de γ .

Aquestes observacions posen de manifest l'eficàcia del mètode i la consistència de les solucions numèriques, independentment del tamany del maiat temporal adoptat.

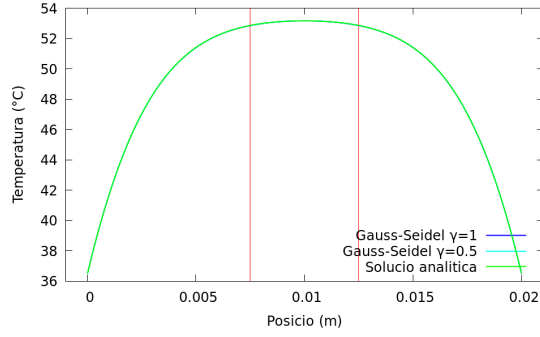


Figura 1: Representació gràfica de les dues solucions numèriques junt amb la solució analítica.

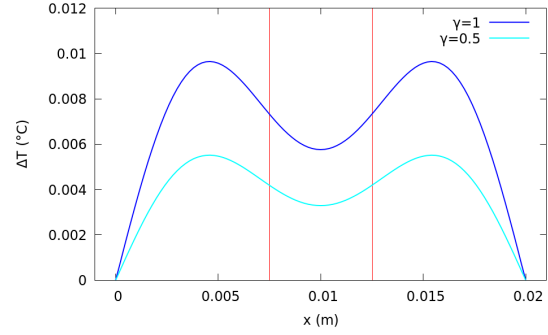


Figura 2: Representació de l'error associat a cada solució.

Figura 3: Comparació de dues solucions numèriques obtingudes pel mètode d'Euler implícit per a $t = t_a$.

6 Solució numèrica: mètode Crank-Nicolson

En aquest mètode numèric la discretització de la derivada temporal s'aproxima com en el mètode d'Euler explícit, l'Eq. (??). En canvi, la segona derivada espacial com la mitjana de les dues posicions considerades a la discretització de la derivada temporal:

$$\frac{\partial^2 \hat{T}}{\partial z^2} = \frac{1}{2} \frac{\hat{T}_{j+1}^n - 2\hat{T}_j^n + \hat{T}_{j-1}^n}{\delta z^2} \quad (11)$$

I ens acaba resultat l'expressió següent:

$$\frac{\hat{T}_j^{n+1} - \hat{T}_j^n}{\Delta \hat{t}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\hat{T}_{j+1}^{n+1} - 2\hat{T}_j^{n+1} + \hat{T}_{j-1}^{n+1}}{\Delta \hat{z}^2} + \frac{\hat{T}_{j+1}^n - 2\hat{T}_j^n + \hat{T}_{j-1}^n}{\Delta \hat{z}^2} \right) + 1 \quad (12)$$

La resolució d'aquest problema també es planteja com un sistema d'equacions algebraiques, una per cada pas espacial, que cal resoldre iterativament per cada pas temporal \hat{T}_j^n . Com en el mètode d'Euler implícit, es parteix de les condicions inicials i es resol successivament per obtenir les temperatures dels passos següents de forma recursiva, aprofitant que els valors de \hat{T}_j^{n-1} són coneguts del pas anterior.

El sistema es pot expressar en forma matricial per a cada pas \hat{T}_j^n , i per resoldre'l, utilitzem el mètode iteratiu de Jacobi.

$$\begin{pmatrix} (\gamma-1) & -\frac{\gamma}{2} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -\frac{\gamma}{2} & (\gamma-1) & -\frac{\gamma}{2} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -\frac{\gamma}{2} & (\gamma-1) & -\frac{\gamma}{2} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -\frac{\gamma}{2} & (\gamma-1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{T}_{j=1}^{n+1} \\ \hat{T}_{j=2}^{n+1} \\ \vdots \\ \hat{T}_{j=N-2}^{n+1} \\ \hat{T}_{j=N-1}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{j=1} + \frac{\gamma}{2}\hat{T}_c \\ f_{j=2} \\ \vdots \\ f_{j=N-2} \\ f_{j=N-1} + \frac{\gamma}{2}\hat{T}_c \end{pmatrix} \quad (13)$$

$$\text{on } f = \frac{\gamma}{2}\hat{T}_{j+1}^n + (\gamma-1)\hat{T}_j^n + \frac{\gamma}{2}\hat{T}_{j-1}^n + \Delta t$$

Per veure l'eficiència d'aquest mètode, compararem la solució analítica i la numèrica per a cada pas del mallat espacial per al temps $t_a = 0.025$ especificada en l'enunciat. Calculem l'error absolut entre les temperatures, que també ens servirà per comparar amb els altres dos mètodes numèrics que hem utilitzat.

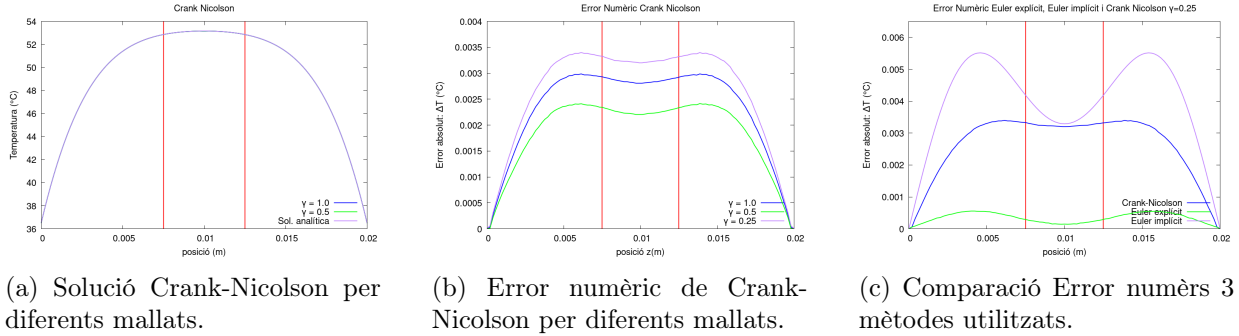


Figura 4: Gràfics corresponents al mètode Crank Nicolson.

Observant el gràfic de l'esquerra podem veure que l'error augmenta com més ens allunyem dels límits de l'interval espacial però que si ens aproximem al centre torna a disminuir. També podem observar que si reduim el tamany de l'interval del mallat, l'error es fa més petit. Això és perquè estem fent passos més petits en la discretització del temps. Al reduir el tamany dels passos ens apropem cada vegada més a la definició de diferencial i, per tant, l'equació discretitzada s'aproxima millor a l'equació diferencial que volem resoldre.

D'altra banda gràfics de la dreta, notem que la diferència de temperatura que presenta la solució numèrica de Crank és més gran que la que presenten els altres mètodes numèrics (Euler explícit i Euler implícit). La diferència entre els mètodes numèrics és el tipus de discretització que fem per a les derivades de l'equació diferencial. Així doncs, veiem que per aquest problema i per aquest interval d'espai i temps, aproximar la derivada segona com la mitjana de ens porta a una solució que s'allunya més de la solució analítica. Això podria ser perquè...SEGUIR

7 Comparació del mètode de Jacobi i el mètode de Gauss-Seidel

Els mètodes numèrics implícits són aquells en què no és possible aïllar una variable en funció d'altres variables únicament de passos anteriors. Entre els mètodes que hem utilitzat, l'Euler implícit i el Crank-Nicolson en són exemples.

La resolució numèrica d'aquests problemes es planteja com un sistema d'equacions algebraiques per a cada pas temporal. Utilitzar mètodes directes, com el de Gauss-Jordan, seria extremadament laboriós a causa de la dimensió del sistema. Per aquest motiu, es recorre a mètodes iteratius.

En aquesta assignatura se n'han presentat dos: el de Jacobi i el de Gauss-Seidel. El segon ofereix avantatges significatius, com un temps de càlcul més curt i menor requeriment d'emmagatzematge. No obstant, considerem que el criteri rellevant per a seleccionar un mètode és el seu error. Per justificar la nostra elecció del mètode de Gauss-Seidel, hem comparat els dos mètodes en un cas concret.

En la Fig. ??, es presenten, juntament amb la solució analítica, dues solucions numèriques del mètode d'Euler implícit amb $\gamma = 1$ i en $t = t_a$: una obtinguda mitjançant el mètode de Jacobi i l'altra pel mètode de Gauss-Seidel. A més, en la Fig. ?? es representa l'error absolut associat a cadascuna de les solucions numèriques respecte de l'analítica.

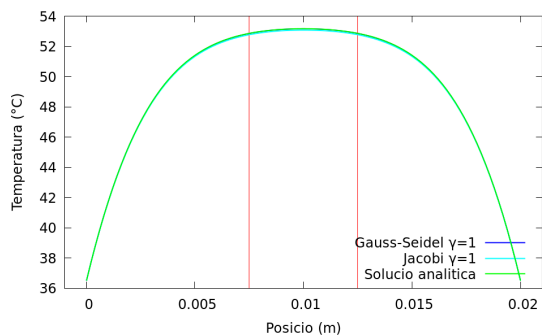


Figura 5: Representació gràfica de les dues solucions numèriques junt amb la solució analítica.

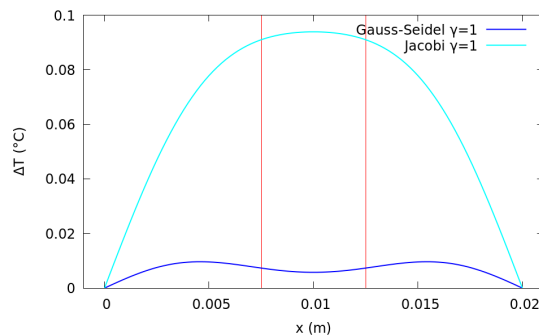


Figura 6: Representació de l'error associat a cada solució.

Figura 7: Comparació del mètode de Jacobi i el de Gauss-Seidel per al mètode d'Euler implícit amb $\gamma = 1$ i $t = t_a$.

En la Fig. ?? s'aprecia que, a prop dels extrems, les solucions que proporcionen ambdós mètodes són molt similars a la solució analítica. Tanmateix, en la zona central la solució obtinguda amb el mètode de Jacobi presenta una lleugera desviació.

Aquest fet es reflecteix en la gràfica de l'error absolut. Tot i que en tots dos casos l'error és petit (es manté inferior a 0.1 °C), l'error en el mètode de Gauss-Seidel és significativament inferior.

Així, hem optat pel mètode de Gauss-Seidel per resoldre el problema, ja que involucra menor error i millor eficiència computacional.

8 Comparació dels mètodes - ho fem???

9 Millora del model

10 Animació

Un cop teniem els mètodes implementats hem representat els resultats amb un gif on es pot veure l'evolució del camp de temperatura en dues dimensions al llarg del temps. El nostre problema només depèn d'una dimensió espacial però per fer el gif més representatiu del sistema d'electrodes que narra el problema, hem extès el camp de temperatures a una segona dimensió espacial. Per generara el gif primer hem calculat el camp de temperatures en 100 temps equiespaiats i hem convertit aquestes dades en 100 fitxers txt. En segon lloc, hem plotejat les dades d'aquests fitxers amb una rutina de gnuplot obtenint 100 fotogrames. Per últim amb el programa ImageMagick hem seqüenciat els fotogrames per generar el gif. En el gif veiem clarament com en els extrems dret i esquerra del camp, on hi hauria els electrodes, la temperatura es manté a la temperatura corporal i, en canvi, al mig, on hi hauria el teixit malalt, la temperatura va augmentant amb el temps.

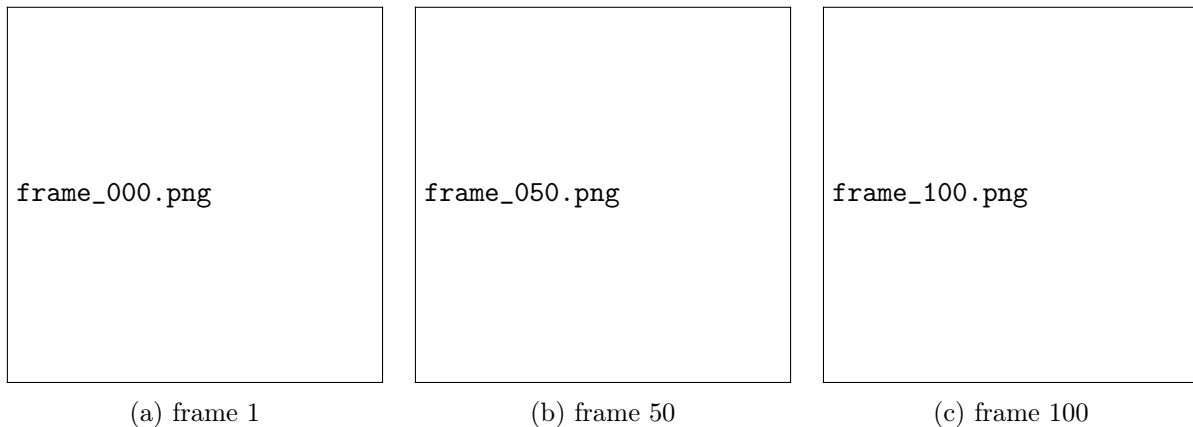


Figura 8: Tres frames representatius del gif.

Link per a accedir al gif penjat a youtube: <https://youtu.be/GGSp-ycK4H0>