**TRƯỜNG ĐẠI HỌC BÁCH KHOA HÀ NỘI**

**TRƯỜNG CÔNG NGHỆ THÔNG TIN VÀ TRUYỀN THÔNG**

**¯¯¯¯¯¯¯¯**  \* **¯¯¯¯¯¯¯¯**

**Ảnh có chứa văn bản, ký hiệu

Mô tả được tạo tự động**

**BÁO CÁO BÀI TẬP LỚN**

**MÔN HỌC: TÍNH TOÁN KHOA HỌC**

**CHỦ ĐỀ 2: PHƯƠNG PHÁP JACOBI**

**Giảng viên hướng dẫn: Vũ Văn Thiệu**

**Nhóm sinh viên thực hiện:**

**Phan Thế Anh 20204941**

**Lê Thế Anh 20200018**

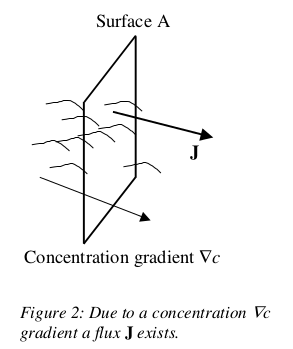
**Nguyễn Văn Chung 20204945**

**Nguyễn Duy Doanh 20204948**

**Đặng Quang Đạt 20205064**

# **Giới thiệu bài toán**

* Khảo sát quá trình khếch tán của một khối chất rắn hoặc chất tan trong một dung môi. Quá trình khuếch tán có thể được mô tả bởi một phương trình vi phân bậc 2, tuyến tính từng phần.
* Xét một hợp chất hóa học đặt rrong một dung môi. Hợp chất này có nồng độ c ( đơn vị là mol/m3). Chúng ta giả sử rằng hợp chất này chỉ chuyển động bởi sự khuếch tán tự do trong dung môi. Chúng ta sẽ lấy đạo hàm theo nồng độ c, bằng cách xem xét một khối cân bằng trong một thể tích nhỏ và áp dụng định luật Fick để liên hệ giữa dòng chảy khếch tán và độ biến thiên nồng độ.

****

Xem xét tình huống như trong hình bên, nơi mà độ biến thiên nồng độ ∇c tồn tại, và do đó tồn tại dòng chất tan. Một dòng là một lượng chất vượt qua một đơn vị diện tích trong đơn vị thời gian. Dòng chảy này, J được tính bằng (mol/m2s). Theo định luật Fick, ta có:

J = − D∇c trong đó D là hệ số khuếch tán (m2/s).

* Tiếp đến, chúng ta xem xét một khối đủ nhỏ dV = dxdydz và tính toán lượng chất tan khuếch tán vào và ra khỏi khối hộp đó. Chúng ta xem xét theo 3 hướng trục tọa độ đề các và tổng hợp chúng để thu được giá trị dòng tổng hợp. Ví dụ theo hướng x, chúng ta có thể viết (J x ( x) − J x ( x + dx))dydz. Từ đó, ta có:

Ảnh có chứa văn bản

Mô tả được tạo tự động

trong đó t biểu thị thời gian. Chia cả 2 vế biểu thức cho dV và tìm giới hạn khi dx, dy, dz → 0 chúng ta thu được:

Ảnh có chứa văn bản

Mô tả được tạo tự độngẢnh có chứa văn bản

Mô tả được tạo tự động

Cuối cùng kết hợp với kết quả định luật Fick ta được:

# **Mô hình bài toán**

* Trong báo cáo này, để đơn giản, chúng ta xét một trường hợp cụ thể của khuyếch tán. Đó là khuếch tán theo một phương.
* Xét một miền hình vuông, và không mất tính tổng quát, chúng ta giả sử 0 ≤ x ≤ 1 và 0 ≤ y ≤ 1. Thêm vào đó, chúng ta luôn giả sử điều kiện biên sau: c(x, = 1;t) = H(t) và c(x, y = 0; t) = 0.
* Vì vậy trên cùng của miền khảo sát, nồng độ luôn bằng 1 và ở dưới cùng của miền khảo sát, nồng độ chất tan luôn bằng 0.
* Thêm vào đó, theo phương x, chúng ta cũng sẽ luôn giả sử thoả mãn điều kiện biên tuần hoàn: c(x = 0, y; t) = c(x = 1, y; t) hoặc tổng quát hơn, c( x = ξ , y; t ) = c( x = ξ + 1, y; t ).
* Chú ý rằng bởi vì điều kiện biên tuần hoàn, quá trình khuếch tán trở thành khếch tán theo phương. Lời giải này rất hữu ích bởi nó cho chúng ta phương pháp đánh độ chính xác của phương pháp số của phương trình khuếch tán 2 chiều.
* Cuối cùng, để đưa ra một lý do tại sao chúng ta cần phương pháp số trong giải quyết bài toán khuếch tán, chúng ta xem qua hình 8, trong đó một đối tượng hình vuông được đặt trong vùng. Đối tượng giả sử là một vật hấp phụ, ví dụ điều kiện trạng thái đối tượng đơn giản là con-object = 0. Trong tình huống này, chúng ta không thể đưa ra được lời giải lý thuyết, tuy nhiên phương trình khuyếch tán có thể được giải bằng phương pháp số mà chúng ta sẽ trình bày trong mục tiếp theo.
* Trong nhiều trường hợp ta chỉ quan tâm tới trạng thái có nồng độ ổn định cuối cùng, mà không quan tâm tới quá trình để đạt được trạng thái đó. Điều này là có thể bởi vì khuếch tán là một quá trình rất nhanh khi so sánh với các quá trình khác trong hệ thống và có thể bỏ qua sự chuyển biến. Trong báo cáo này, chúng em chỉ xem xét dạng độc lập thời gian.

# **Thuật toán**

## **Phương trình khuếch tán độc lập thời gian**

* Đặt tất cả thời gian dẫn xuất trong phương trình khuếch tán về 0, ta thu được phương trình khuếch tán độc lập thời gian sau:

∇2c = 0

* Đây là phương trình Laplace nổi tiếng mà chúng ta bắt gặp rất nhiều trong các lĩnh vực khoa học, kỹ thuật. Vì vậy rất hữu ích để tìm hiểu chi tiết phương trình này.
* Chúng ta hãy xem xét lại trong một miền 2 chiều, nồng độ C không còn phụ thuộc vào biến thời gian, vì vậy chúng ta biểu diễn nồng độ C trên một điểm lưới Cl,m. Thay thế các công thức hữu hạn trong không gian dẫn xuất vào phương trình trên ta thu được:

Cl,m = [Cl+1,m + Cl-1,m + Cl,m+1 + Cl,m-1], với mọi (l,m)

* Phương trình [2] bao gồm (L+1) x (L+1) phương trình tuyến tính và (L+1) x (L+1) ẩn số. Các ẩn số là giá trị của nồng độ tại tất cả các điểm lưới. Công việc của chúng ta là giải hệ các phương trình này. Phương trình có thể được viết lại theo công thức sau:

Ax = b

trong đó, A là ma trận vuông NxN, X và b là Nx1 vector.

* Có thể giải hệ phương trình tuyến tính Ax = b theo phương pháp trực tiếp (direct) hoặc lặp (iterative). Phương pháp trực tiếp giải một phương trình trực tiếp trong một số số lỗi. Trong khi, Phương pháp lặp tìm kiếm một giải pháp gần đúng thông qua một số thủ tục lặp đi lặp lại.
* Với phương pháp lặp thì số bước lặp cần thiết để tìm ra lời giải với 1 độ chính xác nhất định thì nhỏ hơn N. Trong khi phương pháp trực tiếp cho phép tìm ra lời giải với độ chính xác là số nhưng với chi phí tính toán cao hơn. Đặc biệt là khi các ma trận có kích thước rất lớn, thường bắt gặp trong các bài toán mô phỏng ngày hôm nay, thì độ phức tạp tính toán trở thành 1 vấn đề cực kỳ lớn, ngay cả khi thực hiện trên các siêu máy tính có sự song song hóa cao. Đây là lý do quan trọng để chúng ta xem xét phương pháp lặp. Chúng có chi phí thấp hơn, dễ song song hóa nhưng chỉ tìm được lời giải gần đúng. Trong nhiều trường hợp, sự hội tụ rất chậm, vì vậy phương pháp lặp cần sử dụng những kỹ thuật chuyên biệt hóa (với các điều kiện ràng buộc trước) để phục hồi sự hội tụ.

## **Phương pháp đệ quy Jacobi**

* Bây giờ chúng ta quay trở lại sự chú ý của chúng tôi với các trường hợp cụ thể của chương trình khác biệt hữu hạn cho phương trình Laplace hai chiều. Phương trình này ngay lập tức cho thấy một chương trình đệ quy:

Ảnh có chứa văn bản

Mô tả được tạo tự động

* Như trước đây, n là chỉ số lần lặp. Chương trình đệ quy này được gọi là đệ quy Jacobi. Lưu ý các mối quan hệ của phương trình trên với các chương trình khác biệt hữu hạn cho thời gian phụ thuộc vào phương trình khuếch tán, phương trình. . Nếu chúng ta lấy bởi các điều kiện cho phép CFL bước thời gian tối đa, tức là *D**x*2/*t* = ¼ và sử dụng trong phương trình. chúng ta tái tạo lặp Jacobi của phương trình. Nói cách khác, chúng ta kỳ vọng lặp Jacobi cũng sẽ bị ảnh hưởng từ một số lượng lớn tương đối của lần lặp lại cần thiết trước khi hội tụ.
* Thuật toán 2 cung cấp code cho các vòng lặp bên trong của một đệ quy Jacobi. Chúng tôi một lần nữa đảm nhận miền vuông với ranh giới định kỳ trong x-hướng và ranh giới cố định trong y hướng. Hơn nữa, một tiêu chí cụ thể dừng được thực hiện. Chúng tôi yêu cầu

Ảnh có chứa văn bản, đồng hồ

Mô tả được tạo tự động

* Sự khác biệt về nồng độ giữa hai lần lặp lại trên tất cả các điểm lưới nên được nhỏ hơn một số lượng nhỏ e. Đây là một điều kiện dừng khá là nghiêm trọng. Những người khác cũng có thể được sử dụng, ví dụ tính toán sự khác biệt có ý nghĩa và đòi hỏi điều này cần được nhỏ hơn một số lượng nhỏ. Ở đây chúng ta sẽ không phải trả bất kỳ sự chú ý hơn nữa các tiêu chí dừng lại, nhưng bạn nên nhận ra đây là một vấn đề quan trọng cần được xem xét trong bất kỳ ứng dụng mới của một phương pháp đệ quy.

# **Cài đặt**

* Các tham số đầu vào

#define l 20

#define m 20

#define epsilon 0.001

#define tolerance 0.001

* Khởi tạo giá trị ban đầu

void KhoiTao(float \*C)

{

int i,j;

for ( i = 0 ; i < l ; i++ )

for ( j = 0 ; j < m ; j++ ){

if (i>=(l/2-5)&&i<(l/2+5)&&j>=(m/2-5)&&j<(m/2+5))

\*(C+i\*m+j) = 80.0;

else

\*(C+i\*m+j) = 25.0;

}

}

* Điều kiện biên**:** Khi tính tại các điểm lưới i=0, i=l-1, j=0, j=m-1 thì cần giá trị của C tại các điểm nằm ngoài miền dữ liệu sẵn có. Để có đủ thông tin, chúng ta sử dụng điều kiện biên. Giá trị của điều kiện biên phụ thuộc vào từng bài toán. Ví dụ bạn có thể chọn điều kiện biên cố định. Cố định giá trị của C tại vùng biên bằng 25.
* Phương pháp đệ quy Jacobi:

/\* Jacobi update, square domain, periodic in x, fixed \*/

/\* upper and lower boundaries \*/

**do** {

= 0

**for** i=2 to max {

**for** j=2 to max

C(i,j) = (1/k)\*((C\_old(i-1 , j )

+ C\_old (i+1,j))

+(C\_old(i,j-1)+C\_old(i,j+1));

= max(max(abs(C - C\_old)));

C\_old = C;

}

while (> tolerance)

# Kết quả

Ảnh có chứa văn bản, thiết bị điện tử, ảnh chụp màn hình

Mô tả được tạo tự động

