



Μάθημα: «Επιστημονικοί Υπολογισμοί»

Διδάσκων: Φίλιππος Τζαφέρης

Χειμερινό Εξάμηνο 2006-2007

Άγγελος Μαντζαφλάρης, amantzaf@math.uoa.gr

Τρίτη 5 Δεκεμβρίου, 2006

Επίλυση της Self-adjoint μορφής

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial x} \left(a(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right)$$

Σε αυτήν την εργασία παρουσιάζεται κώδικας σε γλώσσα C για την αριθμητική λύση της παραπάνω Self-adjoint διαφορικής εξίσωσης, λαμβάνοντας

$$a(x) = 1 \quad , \quad \frac{1}{1+x^{10}} \quad , \quad \frac{1}{1+x^{20}} \quad , \quad \frac{1}{1+x^{30}}$$

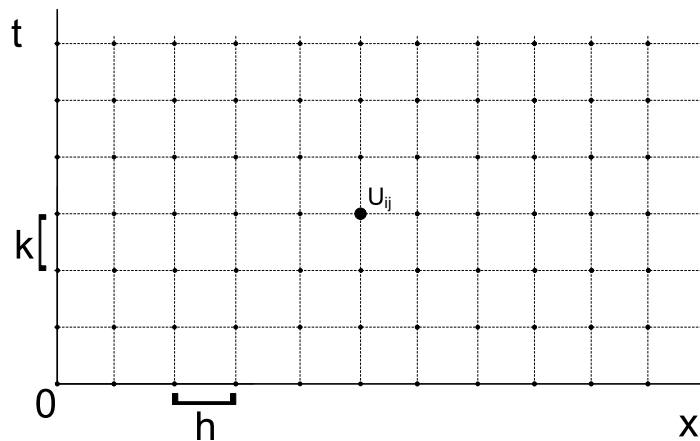
και αρχικές, συνοριακές συνθήκες

- Σταθερές:

$$u(x, 0) = \frac{1}{2} \quad , \quad u(0, t) = u(1, t) = 0$$

- Με μερικές παραγώγους:

$$u(x, 0) = 1 \quad , \quad \frac{\partial u}{\partial x} = u \quad \text{για } x = 0, t > 0 \quad , \quad \frac{\partial u}{\partial x} = -u \quad \text{για } x = 1, t > 0$$



Η συνάρτηση $a(x)$ δίνεται από τη ρουτίνα `fun_a.c` (για την ύψωση σε δύναμη χρησιμοποιείται η βοηθητική `power.c`). Όλες οι παρακάτω μέθοδοι μπορούν να τρέξουν με χρήση της `main.c`. Σε αυτήν χρησιμοποιούνται και οι `input.c` (για είσοδο παραμέτρων) και `printdata.c` (για εκτύπωση δειγματοληπτικών δεδομένων). Η δειγματοληψία γίνεται σε έναν 6×6 πίνακα με τη συνάρτηση `sample.c`.

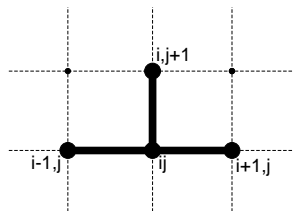
Τα εκτελέσιμα αρχεία της εργασίας είναι τρία:

1. `main.exe` Δίνει στο χρήστη τη δυνατότητα να εισάγει παραμέτρους και να τρέξει τις μεθόδους.
2. `test.exe` Εξάγει αρχείο με δειγματοληπτικά δεδομένα εκτελέσεων για διάφορες παραμέτρους.
3. `cn_conv.exe` Δίνει τις τιμές του r για τις οποίες η μέθοδος Crank-Nicolson είναι αρκετά ευσταθής.

1 Άμεση μέθοδος

Η άμεση μέθοδος δίνεται από το σχήμα

$$U_{i,j+1} = ra_{i-\frac{1}{2}}U_{i-1,j} + [1 - r(a_{i-\frac{1}{2}} + a_{i+\frac{1}{2}})]U_{ij} + ra_{i+\frac{1}{2}}U_{i+1,j}$$



1.1 Σταθερές συνοριακές συνθήκες

```
void explct(int n, int m, double r, double k, double h, double **U,int fa)
//Epilish me thn Amesh me8odo
{
  int i,j,j0=(int)(STEP/k), j1=6*j0+1;
  double v1,v2;

  //Arxikes sin8ikes
  for (i=0;i<=n;i++) U[i][0]=0.5;
  //Sinoriakes Sin8ikes
  U[0][1]=0; U[n][1]=0;

  for (j=1;j<=m;j++)
  {
    printf("[%d]\r",j);
    for (i=1;i<n;i++)
    {
      v1=fun_a(i+0.5,h,fa); v2=fun_a(i-0.5,h,fa);
      U[i][1] = r*v2*U[i-1][0] + (1-r*(v1+v2))*U[i][0] + r*v1*U[i+1][0];
    }
    for (i=0;i<=n;i++) U[i][0]=U[i][1];
  }

  if ( (j%j0==0) && (j<j1) ) sample(U,n,j,j0);
}
}
```

1.2 Συνοριακές συνθήκες με μερικές παραγώγους

Οι συνοριακές συνθήκες δίνονται από τις εξισώσεις

$$U_{0,j+1} = [1 - 2r(1+h)]U_{0,j} + 2rU_{1,j}$$

$$U_{N,j+1} = [1 - 2r(1+h)]U_{N,j} + 2rU_{N-1,j}$$

```
void explct_ic(int n, int m, double r, double k, double h, double **U,int fa)
//Epilish me thn Amesh me8odo
{
  int i,j,j0=(int)(STEP/k), j1=6*j0+1;
  double v1,v2,v=1-2*r*(1+h);

  //Arxikes sin8ikes
  for (i=0;i<=n;i++) U[i][0]=1;

  for (j=1;j<=m;j++)
  {
    printf("[%d]\r",j);
    //Sinoriakes Sin8ikes
    U[0][1]= v*U[0][0]+2*r*U[1][0];
    U[n][1]= v*U[n][0]+2*r*U[n-1][0];
    for (i=1;i<n;i++)

```

```

{
  v1=fun_a(i+0.5,h,fa); v2=fun_a(i-0.5,h,fa);
  U[i][1] = r*v2*U[i-1][0] + (1-r*(v1+v2))*U[i][0] + r*v1*U[i+1][0];
}
for (i=0;i<=n;i++) U[i][0]=U[i][1];

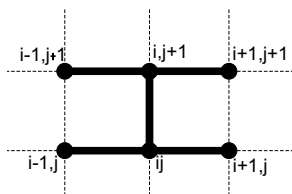
if ( (j%j0==0) && (j<j1) ) sample(U,n,j,j0);
}
}

```

2 Έμμεσες μέθοδοι

Το γενικό σχήμα

$$\begin{aligned}
& -\lambda r a_{i-\frac{1}{2}} U_{i-1,j+1} + [1 + \lambda r (a_{i-\frac{1}{2}} + a_{i+\frac{1}{2}})] U_{i,j+1} - \lambda r a_{i+\frac{1}{2}} U_{i+1,j+1} = \\
& = (1-\lambda) r a_{i-\frac{1}{2}} U_{i-1,j} + [1 - (1-\lambda) r (a_{i-\frac{1}{2}} + a_{i+\frac{1}{2}})] U_{i,j} + (1-\lambda) r a_{i+\frac{1}{2}} U_{i+1,j}
\end{aligned}$$



μας δίνει τη μέθοδο Crank-Nicolson για $\lambda = \frac{1}{2}$ και τη μέθοδο Douglas για $\lambda = \frac{1}{2} - \frac{1}{12r}$.

Η επίλυση τριδιαγώνιου συστήματος γίνεται με τη ρουτίνα `thomas.c`.

2.1 Σταθερές συνοριακές συνθήκες

```

void implicit(int n, int m, double r, double k, double h, double **U, int fa, double l)
//Emmeses meθodoi me staθeres arxikes sin8ikes
// Gia l=0.5 einai h Crank Nicolson
// Gia l=1/2-1/(12r) einai h Crank Nicolson
{
  int i,j,t=0, j0=(int)(STEP/k) , j1=6*j0+1;
  double a[n],b[n],c[n],d[n], v1,v2;

  //Arxikes sin8ikes
  for (i=0;i<=n;i++) U[i][0]=0.5;
  //Sinoriakes Sin8ikes
  U[0][1]=0; U[n][1]=0;

  for (j=1;j<=m;j++)
  { printf("[%d]\r",j);
    for (i=1;i<n;i++)
    {
      v1=fun_a(i+0.5,h,fa); v2=fun_a(i-0.5,h,fa);
      a[i]=-l*r*v2;
      b[i]=1+l*r*(v1+v2);
      c[i]=-l*r*v1;
      d[i]=(1-l)*r*v2*U[i-1][0] + (1-(1-l)*r*(v1+v2))*U[i][0]
      + (1-l)*r*v1*U[i+1][0];
    }
    d[1] -=a[1]*U[0][1];
    d[n-1]-=c[n-1]*U[n][1];

    thomas(n,U,a,b,c,d);
    for (i=0;i<=n;i++) U[i][0]=U[i][1];
    if ( (j%j0==0) && (j<j1) ) sample(U,n,j,j0);
  }
}

```

2.2 Συνοριακές συνθήκες με μερικές παραγώγους

Οι συνοριακές συνθήκες δίνονται όμοια με πριν:

$$U_{0,j+1} = [1 - 2r(1+h)]U_{0,j} + 2rU_{1,j}$$

$$U_{N,j+1} = [1 - 2r(1+h)]U_{N,j} + 2rU_{N-1,j}$$

```
void implicit_ic(int n, int m, double r, double k, double h, double **U, int fa, double l)
//Emmeses me8odoi me arxikes sin8ikes me merikes paragougous
// Gia l=0.5 einai h Crank Nicolson
// Gia l=1/2-1/(12r) einai h Crank Nicolson
{
    int i, j, t=0, j0=(int) (STEP/k) , j1=6*j0+1;
    double a[n], b[n], c[n], d[n], v1, v2, v=1-2*r*(1+h);

    //Arxikes sin8ikes
    for (i=0; i<=n; i++) U[i][0]=1;

    for (j=1; j<=m; j++)
    { printf("[%d]\r", j);
      //Sinoriakes Sin8ikes
      U[0][1]= v*U[0][0]+2*r*U[1][0];
      U[n][1]= v*U[n][0]+2*r*U[n-1][0];
      for (i=1; i<n; i++)
      {
          v1=fun_a(i+0.5, h, fa); v2=fun_a(i-0.5, h, fa);
          a[i]=-l*r*v2;
          b[i]=1+l*r*(v1+v2);
          c[i]=-l*r*v1;
          d[i]=(1-l)*r*v2*U[i-1][0] + (1-(1-l)*r*(v1+v2))*U[i][0]
          + (1-l)*r*v1*U[i+1][0];
      }
      d[1] -=a[1]*U[0][1];
      d[n-1]-=c[n-1]*U[n][1];

      thomas(n, U, a, b, c, d);
      for (i=0; i<=n; i++) U[i][0]=U[i][1];
      if ( (j%j0==0) && (j<j1) ) sample(U, n, j, j0);
    }
}
```

3 Πειραματικά αποτελέσματα

Με τη ρουτίνα `test.c` (η οποία έχει ως είσοδο το h) λαμβάνονται δειγματοληπτικά αποτελέσματα από τις παραπάνω μεθόδους για για $r = 0.1, 0.25, 0.48, 0.5, 0.52, 0.8, 1.0, 2.0$. Η δειγματοληψία γίνεται με τη συνάρτηση `sample.c` στους χρόνους $t = STEP, 2*STEP, \dots, 6*STEP$ (όπου η σταθερά $STEP$ καθορίζεται στο πρόγραμμα) και σε έξι ισοπέχοντα σημεία πάνω στον x -άξονα. Γίνονται όλοι οι συνδυασμοί για τις διαφορετικές $a(x)$ και για τις δυο διαφορετικές αρχικές συνθήκες. Τα πειραματικά αποτελέσματα αποθηκεύονται στο αρχείο `test.txt`.

Έγιναν οι εξής εκτελέσεις:

- `test10.txt` Για $h = \frac{1}{10}$, δειγματοληπτικά $t = 0.05, 0.10, \dots, 0.30$.
- `test100.txt` Για $h = \frac{1}{100}$, δειγματοληπτικά $t = 0.05, 0.10, \dots, 0.30$.
- `test1000.txt` Για $h = \frac{1}{1000}$, δειγματοληπτικά $t = 0.025, 0.05, \dots, 0.15$.

Ενδεικτικά παραθέτουμε μερικούς δειγματοληπτικούς πίνακες που πήραμε για $a(x) = 1$, $h = \frac{1}{1000}$ και $r = 0.5, 0.52$. Στην πρώτη γραμμή φαίνεται το χωρικό βήμα i από το οποίο προέρχεται η τιμή και στην πρώτη στήλη ο χρόνος t και το χρονοβήμα j .

t	j	$i = 166$	$i = 332$	$i = 498$	$i = 664$	$i = 830$	$i = 996$
-----	-----	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------	-----------

Άμεση μέθοδος($r = 0.5$)

0.05	50000	0.26943958	0.43240632	0.48691997	0.47606084	0.35509429	0.01059302
0.10	100000	0.19606208	0.34771839	0.42525066	0.40989105	0.27485671	0.00762846
0.15	150000	0.15693328	0.28536919	0.35694321	0.34430053	0.22601585	0.00617814
0.20	200000	0.12883139	0.23590204	0.29712751	0.28729073	0.18805447	0.00512685
0.25	250000	0.10654760	0.19554342	0.24694690	0.23920164	0.15664816	0.00427013
0.30	300000	0.08834717	0.16228976	0.20520077	0.19898834	0.13040795	0.00355571

Crank-Nicolson($r = 0.5$)

0.05	50000	0.26943982	0.43240562	0.48691890	0.47605989	0.35509424	0.01059305
0.10	100000	0.19606216	0.34771811	0.42524991	0.40989042	0.27485665	0.00762846
0.15	150000	0.15693326	0.28536901	0.35694284	0.34430018	0.22601573	0.00617814
0.20	200000	0.12883137	0.23590195	0.29712735	0.28729057	0.18805438	0.00512685
0.25	250000	0.10654760	0.19554341	0.24694686	0.23920160	0.15664813	0.00427013
0.30	300000	0.08834719	0.16228980	0.20520082	0.19898837	0.13040797	0.00355571

Douglas($r = 0.5$)

0.05	50000	0.26943974	0.43240585	0.48691926	0.47606021	0.35509426	0.01059304
0.10	100000	0.19606213	0.34771820	0.42525016	0.40989063	0.27485667	0.00762846
0.15	150000	0.15693327	0.28536907	0.35694296	0.34430030	0.22601577	0.00617814
0.20	200000	0.12883138	0.23590198	0.29712741	0.28729062	0.18805441	0.00512685
0.25	250000	0.10654760	0.19554341	0.24694687	0.23920161	0.15664814	0.00427013
0.30	300000	0.08834718	0.16228978	0.20520080	0.19898836	0.13040796	0.00355571

Άμεση μέθοδος(συνθήκες με παραγώγους)($r = 0.5$)

0.05	50000	0.94608867	0.98785552	0.99825480	0.99730748	0.97810294	0.89133040
0.10	100000	0.89554001	0.95740703	0.98400743	0.98323071	0.94848856	0.85204070
0.15	150000	0.85576899	0.92515742	0.96043550	0.96178386	0.92201671	0.82374761
0.20	200000	0.82187738	0.89373650	0.93326239	0.93697990	0.89691115	0.79981634
0.25	250000	0.79153561	0.86362075	0.90513414	0.91090142	0.87232043	0.77762586
0.30	300000	0.76359422	0.83485896	0.87716374	0.88454924	0.84798653	0.75613155

Crank-Nicolson(συνθήκες με παραγώγους)($r = 0.5$)

0.05	50000	0.94608827	0.98785510	0.99825457	0.99730727	0.97810265	0.89133021
0.10	100000	0.89553977	0.95740669	0.98400704	0.98323038	0.94848835	0.85204058
0.15	150000	0.85576880	0.92515713	0.96043514	0.96178353	0.92201650	0.82374748
0.20	200000	0.82187720	0.89373624	0.93326208	0.93697959	0.89691093	0.79981618
0.25	250000	0.79153544	0.86362052	0.90513386	0.91090114	0.87232020	0.77762568
0.30	300000	0.76359406	0.83485876	0.87716350	0.88454899	0.84798630	0.75613136

Douglas(συνθήκες με παραγώγους)($r = 0.5$)

0.05	50000	0.94608840	0.98785524	0.99825464	0.99730734	0.97810275	0.89133027
0.10	100000	0.89553985	0.95740680	0.98400717	0.98323049	0.94848842	0.85204062
0.15	150000	0.85576886	0.92515723	0.96043526	0.96178364	0.92201657	0.82374752
0.20	200000	0.82187726	0.89373633	0.93326218	0.93697970	0.89691100	0.79981623
0.25	250000	0.79153550	0.86362060	0.90513395	0.91090123	0.87232028	0.77762574
0.30	300000	0.76359412	0.83485883	0.87716358	0.88454907	0.84798638	0.75613142

t	j	$i = 166$	$i = 332$	$i = 498$	$i = 664$	$i = 830$	$i = 996$
Crank-Nicolson ($r = 0.52$)							
0.05	48076	0.26944207	0.43240759	0.48691975	0.47606101	0.35509651	0.01059314
0.10	96152	0.19606406	0.34772087	0.42525263	0.40989309	0.27485891	0.00762853
0.15	144228	0.15693512	0.28537220	0.35694659	0.34430376	0.22601817	0.00617821
0.20	192304	0.12883328	0.23590539	0.29713159	0.28729461	0.18805703	0.00512692
0.25	240380	0.10654954	0.19554693	0.24695127	0.23920583	0.15665090	0.00427020
0.30	288456	0.08834910	0.16229329	0.20520521	0.19899261	0.13041074	0.00355579
Douglas ($r = 0.52$)							
0.05	48076	0.26944199	0.43240782	0.48692010	0.47606133	0.35509653	0.01059314
0.10	96152	0.19606404	0.34772096	0.42525288	0.40989329	0.27485893	0.00762853
0.15	144228	0.15693513	0.28537226	0.35694671	0.34430387	0.22601821	0.00617821
0.20	192304	0.12883329	0.23590541	0.29713164	0.28729467	0.18805706	0.00512692
0.25	240380	0.10654954	0.19554693	0.24695128	0.23920585	0.15665091	0.00427020
0.30	288456	0.08834909	0.16229327	0.20520520	0.19899260	0.13041073	0.00355579
Crank-Nicolson(συνθήκες με παραγώγους) ($r = 0.52$)							
0.05	48076	0.94608937	0.98785560	0.99825470	0.99730743	0.97810324	0.89133114
0.10	96152	0.89554145	0.95740791	0.98400781	0.98323109	0.94848940	0.85204180
0.15	144228	0.85577087	0.92515896	0.96043663	0.96178488	0.92201796	0.82374893
0.20	192304	0.82187963	0.89373859	0.93326421	0.93698156	0.89691282	0.79981792
0.25	240380	0.79153821	0.86362334	0.90513656	0.91090366	0.87232254	0.77762775
0.30	288456	0.76359716	0.83486198	0.87716668	0.88455201	0.84798908	0.75613380
Douglas(συνθήκες με παραγώγους) ($r = 0.52$)							
0.05	48076	0.94608950	0.98785574	0.99825477	0.99730750	0.97810334	0.89133121
0.10	96152	0.89554152	0.95740802	0.98400794	0.98323120	0.94848948	0.85204184
0.15	144228	0.85577094	0.92515906	0.96043675	0.96178499	0.92201803	0.82374898
0.20	192304	0.82187969	0.89373868	0.93326432	0.93698166	0.89691289	0.79981797
0.25	240380	0.79153827	0.86362341	0.90513665	0.91090375	0.87232262	0.77762782
0.30	288456	0.76359721	0.83486205	0.87716676	0.88455209	0.84798916	0.75613387

Άμεση μέθοδος($r = 0.52$): ο πίνακας είναι γεμάτος -1 .#IND000.

Άμεση μέθοδος(συνθήκες με παραγώγους)($r = 0.52$): ο πίνακας είναι γεμάτος -1 .#IND000.

Τα αποτελέσματα αναδεικνύουν ότι η άμεση μέθοδος δίνει σωστά αποτελέσματα μόνο για $r \leq \frac{1}{2}$. Στην δεύτερη εκτέλεση όπου δεν ικανοποιείται αυτή η απαίτηση παίρνουμε τεράστιες τιμές, υπερχειλίση ή υπερχείλιση υπολογισμών.

Οι μέθοδοι Crank-Nicolson και Douglas δίνουν εφάμιλλα αποτελέσματα τις περισσότερες φορές. Παρατηρείται οι τιμές της μεθόδου Douglas να βρίσκονται συνήθως ενδιάμεσα σε αυτές της άμεσης μεθόδου και της μεθόδου Crank-Nicolson.

Οι μέθοδοι έχουν καλύτερα αποτελέσματα για σταθερές συνοριακές συνθήκες. Για συνθήκες με παραγώγους, προβλήματα ευστάθειας παρουσιάζονται ακόμη και στις έμμεσες μεθόδους, για $r \geq 1$ (βλέπε και ενότητα 4).

Αν μικρύνουμε αρκετά το βήμα h , πχ $h = \frac{1}{10000}$, βλέπουμε ότι για να διατηρήσουμε το r σε μικρές τιμές πρέπει να λάβουμε πολύ μικρό χρονικό βήμα k . Για παράδειγμα:

Douglas($r = \frac{1}{2}, h = \frac{1}{10000}$)

t	$j \setminus i$	1666	3332	4998	6664	8330	9996
0.0002	40000	0.50000000	0.50000000	0.50000000	0.50000000	0.50000000	0.00797836
0.0004	80000	0.50000000	0.50000000	0.50000000	0.50000000	0.50000000	0.00564173
0.0006	120000	0.49999924	0.50000000	0.50000000	0.50000000	0.49999929	0.00460650
0.0008	160000	0.49998443	0.50000000	0.50000000	0.50000000	0.49998510	0.00398936
0.0010	200000	0.49990246	0.50000000	0.50000000	0.50000000	0.49990586	0.00356821
0.0012	240000	0.49966395	0.50000000	0.50000000	0.50000000	0.49967385	0.00325732

χρειάστηκαν 240000 επαναλήψεις για να υπολογίσουμε τις τιμές σε χρόνο μόλις $t=0.0012$. Προφανώς τόσο μικρό χρονικό βήμα δεν έχει νόημα στις εφαρμογές, και πράγματι βλέπουμε πως ο παραπάνω πίνακας δεν έχει αξιόλογες πληροφορίες.

4 Πειραματική εύρεση πεδίου σύγκλισης της Crank-Nicolson

Η συνάρτηση `cn_conv.c` έχει είσοδο μια ακρίβεια tol . Αρχικά υπολογίζει έναν «ακριβή» πίνακα (δειγματοληπτικών) τιμών D με τη μέθοδο Douglas. Κατόπιν τρέχει τη μέθοδο CN για διάφορες τιμές του r (και για $h = 0.01$), ώστε να λάβουμε έναν αντίστοιχο πίνακα C . Η διαδικασία επαναλαμβάνεται για αυξανόμενα r έως ότου συμβεί πέντε φορές να είναι

$$\|D - C\|_{\infty} > tol$$

Στην οθόνη τυπώνονται τα r και το αντίστοιχο σφάλμα $\|D - C\|_{\infty}$. Για σταθερές συνοριακές συνθήκες και $a(x) = 1$ πήραμε:

$tol = 10^{-3}$		$tol = 10^{-2}$		$tol = 10^{-1}$	
r	$\ D - C\ _{\infty}$	r	$\ D - C\ _{\infty}$	r	$\ D - C\ _{\infty}$
0.30	0.00029786	5.10	0.00400564	45.20	0.03871160
0.60	0.00052758	5.20	0.00500946	45.30	0.03705417
1.00	0.00052762	5.40	0.00887706	45.40	0.03539877
1.10	0.00152344	5.50	0.01174610	45.50	0.11060484
1.20	0.00190665	5.70	0.01050488	45.70	0.10658718
1.30	0.00198331	5.90	0.01112557	45.90	0.10266769

Παρατηρώντας τα αποτελέσματα βλέπουμε ότι:

- Για $tol = 10^{-3}$ παίρνουμε ικανοποιητικές τιμές περίπου για $r \leq 1$.
- Για $tol = 10^{-2}$ παίρνουμε ικανοποιητικές τιμές περίπου για $r \leq 5$.
- Για $tol = 10^{-1}$ παίρνουμε ικανοποιητικές τιμές περίπου για $r \leq 50$.

Συμπερασματικά η Crank-Nicolson μπορεί να θεωρηθεί αρκετά ακριβής για $r \leq 5$.

Τα πράγματα αλλάζουν όταν έχουμε συνοριακές συνθήκες με παραγώγους ($a(x) = 1$):

$tol = 10^{-1}$	
r	$\ D - C\ _{\infty}$
0.50	0.00049244
0.70	0.00019094
0.80	0.00058430
0.90	0.00122685
1.00	171271.1129
1.10	5587420. ...

Εδώ η μέθοδος είναι ακριβής μόνο για $r < 1$.