

EGY ÚJ STABIL, EXPLICIT, MÁSODRENDŰ MÓDSZER NEM STACIONÁRIUS HŐVEZETÉSI PROBLÉMÁK MEGOLDÁSÁRA

Kovács Endre

egyetemi docens, Miskolci Egyetem, Fizikai és Elektrotechnikai Intézet, Fizikai Tanszék
3515 Miskolc, Miskolc-Egyetemváros, e-mail: kendre01@gmail.com

Pszota Gábor

egyetemi docens, Miskolci Egyetem, Fizikai és Elektrotechnikai Intézet, Fizikai Tanszék
3515 Miskolc, Miskolc-Egyetemváros, e-mail: pszotag@gmail.com

Absztrakt

Ebben a rövid cikkben egy alapvetően új explicit és stabil numerikus algoritmust mutatunk be a térben diszkretizált lineáris hővezetési vagy diffúziós egyenlet megoldására. A hagyományos explicit módszerektől (mint pl. a Runge-Kutta) eltérően az új módszer az időlépés nem polinomiális kifejezését használja a változó új értékeinek kiszámításához. Az új módszer teljesítményét numerikus megoldásokkal hasonlítjuk össze. Vizsgálataink szerint a módszer időben másodrendű, és gyorsabb, mint az általában használt explicit vagy implicit módszerek, különösen a rendkívül nagy merev rendszerek esetében.

Kulcsszavak: hővezetési egyenlet, diffúziós egyenlet, explicit módszerek, merev egyenletek, feltétel nélküli stabilitás

Abstract

In this short note, we present a fundamentally new explicit and stable numerical algorithm to solve the spatially discretized linear heat or diffusion equation. Unlike conventional explicit methods (like Runge-Kutta) it uses a non-polynomial expression of the timestep-size to calculate the new values of the variable. We compare the performance of the new method with numerical solutions. According to our investigations, the method is second order in time and it is faster than the commonly used explicit or implicit methods, especially in the case of extremely large stiff systems.

Keywords: heat equation, diffusion equation, explicit methods, stiff equations, unconditional stability

1. Bevezetés és a vizsgált probléma bemutatása

Közismert, hogy a legegyszerűbb diffúziós és Fourier-típusú hővezetési jelenségeket másodrendű lineáris parabolikus parciális differenciálegyenlet (PDE), az úgynevezett hővezetési egyenlet írja le:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T ,$$

ahol T a hőmérséklet, $\alpha = k / (c\rho)$ a termikus diffuzivitás, k , c és ρ pedig rendre a hővezetési tényező, a fajhő és a (tömeg)sűrűség. Köztudott, hogy ez az egyenlet (és általánosításai, mint például az advekció-diffúzió egyenlet) számtalan különböző rendszerben képes leírni a hővezetést, az erőművektől kezdve az épületek falain át az elektronikus eszközökig [1]. Továbbá, ezzel analóg egyenleteket

széles körben használják a diffúz tömegtranszfer és folyadékáramlás modellezésére porózus közegben [2], mint a talajvíz vagy a rezervoárokban lévő nyersolaj.

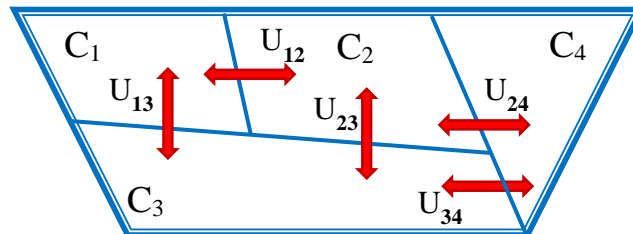
Ennek az egyenletnek a megoldásához a kiindulási lépésünk ugyanaz, mint a standard *vonalak módszere* esetében. A második hely szerinti deriváltak diszkretizálásához a leggyakoribb véges differencia sémát, a másodrendű centrális differencia-sémát alkalmaztuk. Ezután kapunk egy ODE (közön-séges differenciálegyenlet) rendszert, amely megadja az egyes hőmérsékletek időderiváltjait:

$$\frac{dT_i}{dt} = \sum_{j \neq i} \frac{U_{ij}}{C_i} (T_j - T_i),$$

ahol $C = c \cdot m = c\rho V$ [J/K] a cella hőkapacitása (m a tömeg, V a cella térfogata), és $U_{ij} \approx kA_{ij} / d_{ij}$ [W/K] a hővezető képesség (A_{ij} az i és j cellák közötti felület nagysága, d_{ij} pedig a cellák középpontjai közötti távolság). Mátrixos alakban ez a következőképpen írható fel:

$$\frac{d\vec{T}}{dt} = M\vec{T}, \quad (1)$$

ahol az M mátrix főátlón kívüli elemeit a $m_{ij} = U_{ij} / C_i \geq 0$ képlet adja meg, ahol egyenlőség csak akkor állhat fent, ha az i és j cellák nem szomszédosak. Az M mátrix m_{ii} elemei a főátlón kívüli m_{ij} , $j \neq i$ elemek összege negatív előjellel. Ettől a ponttól kezdve minden összegzés az aktuális cella szomszédjait érinti, és ezt a $j \in n(i)$ fogja jelölni. Zárt peremfeltételeket veszünk figyelembe, azaz a vizsgált tartomány széle hőszigetelt. Az 1. ábrán bemutatjuk a változók elrendezését egy 4 cellából álló kétdimenziós rendszer esetében. Hangsúlyozzuk, hogy a cellák alakjának és elrendezésének nem kell feltétlenül szabályosnak lenniük.



1. ábra. Jelölések 4 cella esetén. A külső kettős vonal hőszigetelést jelent.

Valódi rendszerekben a fizikai tulajdonságok, mint a fajhő és a termikus diffúzió, pontról pont-ra nagymértékben változhatnak. Ezért a mátrix elemeinek és így sajátértékeinek abszolút értéke több nagyságrenden keresztül változhat, ami azt jelenti, hogy a probléma erősen merev („stiff”) is lehet. Az ilyen jellegű problémák megoldására a hagyományos explicit módszerek nem megfelelőek, mivel túl lassan futnak le a programok a túl kicsi időlépések miatt. Ezért szinte kizárólag implicit módszereket alkalmaznak, mivel ezek jó stabilitási tulajdonságokkal rendelkeznek. Csakhogy ezek egy algebrai egyenletrendszer megoldását igénylik minden időlépés során, amely rendszerint iteratív módszerekkel történik. Sajnos ez gyakran időigényes, különösen akkor, ha a mátrix nagy méretű, és egynél több térdimenzió van, amikor is a mátrix nem tridiagonális. Ezen kívül az implicit módszerek párhuzamosítása nem triviális.

Nem teljesen közismert, hogy vannak jobb stabilitási tulajdonságokkal rendelkező explicit módszerek, például a Dufort-Frankel módszer, a group-explicit, az odd-even hopscotch („páratlan páros ugróiskola”) és a Runge-Kutta-Chebyshev módszerek. Ezeket a módszereket csak viszonylag kevés kutatócsoport próbálja vizsgálni és alkalmazni (lásd például [3]–[5]), aminek valószínűleg az az egyik fő oka, hogy más hátrányokkal rendelkeznek. Egy részük például csak feltételesen konvergens vagy konzisztens, mások alig alkalmazhatók szabálytalan rácsokra, vagy bonyolult implementálni őket [6]–[10]. Úgy tűnik, hogy egyetlen közismert módszer sem jelent igazán jó megoldást. Ennek a hiányságnak a pótlására teljesen új explicit módszerek egy családjának kidolgozását kezdtük el. Ennek a családnak a legegyszerűbb, első rendű tagja már publikálásra került [11].

2. A javasolt módszerek

Most bemutatjuk az új módszereket az (1) ODE rendszer megoldására az alábbi lépéseken keresztül:

1a) A prediktor lépéshez egy közelítést alkalmazunk: amikor egy T_i változó új értékét kiszámítjuk, akkor elhanyagoljuk, hogy a $h = \Delta t$ időlépés közben más változók is változnak. Ez azt jelenti, hogy T_j állandónak tekintendő ha $j \neq i$, tehát *szétválasztott*, lineáris közönséges differenciálegyenleteket (ODE) kell megoldanunk:

$$\frac{dT_i}{dt} = a_i - \frac{T_i}{\tau_i} \quad (2)$$

ahol $a_i = \sum_{j \in n(i)} m_{ij} T_j^n$, T_j^n a hőmérséklet az n -edik időlépés elején, és bevezettük a cella karakterisztikus idejét vagy sajátidejét, ami minden esetben pozitív mennyiség:

$$\tau_i = -\frac{1}{m_{ii}} = \frac{C_i}{\sum_{j \in n(i)} U_{ij}}$$

Megjegyezzük, hogy ez a közelítés hasonlít az explicit Euler-módszerhez, de a döntő különbség az, hogy az aktuális T_i változót nem rögzítjük az időlépés elején felvett értékéhez (csak a szomszédokat rögzítjük), hanem megtartjuk változóként. Ez azt jelenti, hogy továbbra is *differenciálegyenleteink* vannak, és nem *differencia* egyenleteink.

1b) A (2) egyenlet könnyen megoldható **analitikusan**:

$$T_i(t) = T_i^n \cdot e^{-\frac{t}{\tau_i}} + a_i \tau_i \cdot \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_i}} \right)$$

Ezt a megoldást az időlépés végén prediktor értékeként használjuk:

$$T_i^{n+1, \text{pred}} = T_i^n \cdot e^{-\frac{h}{\tau_i}} + a_i \tau_i \cdot \left(1 - e^{-\frac{h}{\tau_i}} \right) \quad (3)$$

Ha ezeket a prediktor értékeket elfogadnánk végeredményként az időlépés végén, akkor egy első rendű módszert kapnánk, amelyet a „**konstans szomszéd** módszernek” neveztünk el a korábbi cikkünkben [11]. A következő lépésben ezen elsőrendű módszer által kapott értékeket felhasználva teljesen újszerű módszert kapunk.

2a) A korrekciós lépés során azzal a realiztikusabb és általában pontosabb feltételezéssel élünk, hogy az aktuális T_i cella szomszédos T_j változói **lineárisan** változnak a következő meredekséggel:

$$s_j = \frac{a_j^{\text{pred}} - a_j}{h},$$

ahol $a_j^{\text{pred}} = \sum_{i \in n(j)} m_{ji} T_i^{n+1, \text{pred}}$ az összes szomszéd prediktor értékét tartalmazza, amelyeket a fenti 1. lépésben számoltunk ki. Ennek a közelítésnek az alkalmazásával kapunk egy új, szétcsatolt ODE rendszert:

$$\frac{dT_i}{dt} = s_i t + a_i - \frac{T_i}{\tau_i} \quad (4)$$

2b) A (4) egyenlet a (2)-hez hasonlóan szintén megoldható analitikusan. Az időlépés végén ennek a megoldását használjuk, hogy megadja számunkra a korrigált értékeket:

$$T_i^{n+1} = T_i^n e^{-\frac{h}{\tau_i}} + \left(a_i \tau_i - s_i \tau_i^2 \right) \left(1 - e^{-\frac{h}{\tau_i}} \right) + s_i \tau_i h \quad (5)$$

Ezekkel a 2a-b lépésekkel egy másodrendű módszert kapunk, amelyet a „**lineáris szomszéd** módszernek” nevezhetünk. A hagyományos explicit módszerekkel (például Runge-Kutta) ellentétben a (3) és (5) képlet a h időlépcső nem polinomiális kifejezést használja a T változó új értékeinek kiszámításához, ami biztosítja, hogy az egyes cellák hőmérséklete a szomszédok hőmérsékletéhez tartson. Ezért az eredményt a kezdeti legkisebb és legnagyobb hőmérsékletek mindig behatárolják, ami azt jelenti, hogy a módszerek nem lehetnek instabilak a hővezetési egyenletre nézve, a lépésméret tetszőlegesen nagy lehet. A stabilitás és a másodrendű konvergencia hosszadalmas, analitikus bizonyítása máshol kerül majd publikálásra. Az is könnyen belátható, hogy mindkét séma explicit, az új értékek kiszámíthatók egy egyenletrendszer megoldása nélkül. A bemutatott sémák egylépéses módszerek abban az értelemben, hogy az új értékek kiszámítása után nem használjuk és így nem is szükséges tárolni a változók korábbi értékeit. További előnyük, hogy könnyen implementálhatók, akárhány dimenziós fizikai térre, bármilyen irreguláris rácsra, ill. tetszőlegesen inhomogén hővezető közegre, feltéve, ha ki tudjuk számítani a cellák hőkapacitását és a cellák közötti hővezető képességeket.

Az exponenciális tagok miatt első ránézésre a módszereink hasonlóknak tűnnek az úgynevezett exponenciális integrátorokhoz. Ezek a módszerek azonban mátrixok exponenciális függvényeit [11] használják fel, miközben nekünk a számítás során nem is feltétlenül kell mátrixokat használnunk, így a módszereink alapvetően különböznek tőlük.

3. Összehasonlítás numerikus eredményekkel

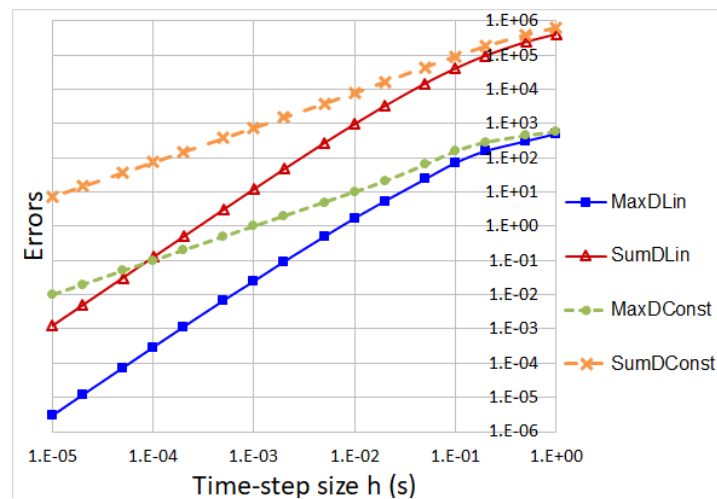
A verifikáció érdekében a módszereink által kapott eredményeket összehasonlítottuk pontos eredményekkel és több numerikus módszer eredményeivel is. Itt csak egy összehasonlítást mutatunk be, egy $100 \times 50 = 5000$ cellából álló téglalap alakú rács esetében. A hőkapacitásoknak és vezetőképességeknek különböző $10^{(1-2 \cdot \text{rand})}$ értékeket adtunk, ahol rand egy véletlen szám, amelyet minden egyes mennyiség esetében a MATLAB generált egyenletes eloszlással a (0,1) intervallumban. Ez azt jelenti, hogy ezek a mennyiségek log-egyenletes eloszlást követnek 0,1 és 10 között. A kezdeti hőmérsékle-

teknek egyenletes eloszlása volt 0 és 1000 között, $T_i = 1000 \cdot (1 - rand)$. A feladat az volt, hogy megoldjuk ezt a rendszert az ismeretlen hőmérsékletekre $t_0=0$ s és $t_{FIN}=1$ s között.

Bár ez a probléma nem volt rendkívül merev (a merevségi arány $6.8 \cdot 10^5$), a referencia megoldás meghatározásához a MATLAB implicit ode15s rutinját használtuk szigorú hibatűréssel ('RelTol' és 'Abstol' 10^{-14} voltak). Itt az s betű azt jelzi, hogy ezt a rutint kifejezetten merev rendszerek számára tervezték. Az 1. táblázatban összefoglaljuk az ode15s, ode23s, ode23, ode23t (laza hibatűréssel) MATLAB rutinok és a módszereink által nyújtott eredményeket. Az első hibafajta, MaxD, a maximális eltérés (a különbség abszolút értéke) a referencia megoldástól. A második, SumD, az eltérések összege az összes cellára nézve. Az eredményekből látható, hogy a módszereink sokkal gyorsabbak, mint a hagyományos explicit vagy implicit módszerek, bármiféle komolyabb optimalizálás, adaptív lépésméret vezérlés vagy párhuzamosítás nélkül is.

1. táblázat. Különböző programok teljesítménye és hibái, CN a „konstans-szomszéd”, LN a „lineáris-szomszéd” módszer

módszer	Futásidő (s)	MaxD	SumD
ode15s	141	10,8	9436
ode23s	1467	0,34	269,7
ode23	9,2	14,5	18,1
ode23t	208	0,55	430
CN, $h=0,01$ s	0,11	10,14	7893
LN, $h=0,001$ s	0,85	0,025	12,17
LN, $h=0,01$ s	0,29	1,72	967,5



2. ábra. Különböző típusú hibák az időlépés-méret függvényében a konstans- és lineáris-szomszéd módszereink esetében. A hibamennyiségek definíciójához lásd az 1. táblázat feliratát.

A 2. ábrán bemutatjuk a konstans-szomszéd és a lineáris-szomszéd módszerek két különböző típusú hibáját a h lépésméret függvényében. Az ábrából látható, hogy a globális hiba a konstans-szomszéd módszer esetében a lépésméret első hatványa szerint, a lineáris-szomszéd módszer esetében pedig a

lépésméret második hatványa szerint csökken, így arra következtethetünk, hogy a módszerek értelem-szerűen első, illetve másodrendűek. Megjegyezzük, hogy a konstans-szomszéd módszert egy korábbi cikkünkben [11] jóval merevebb rendszer esetén is teszteltük, és a stabilitási és konvergencia tulajdon-ságok hasonlóak voltak, mint ahogyan a számos nem publikált numerikus kísérletünk mindegyikében.

4. Következtetések és további tervek

Két új explicit numerikus algoritmust mutattunk be a nem stacionárius hővezetési vagy diffúziós egyenlet külső hőforrások nélküli megoldására. Szemléltettük a módszerek teljesítményét egy 2D rendszer esetében, inhomogén véletlenszerű paraméterekkel és kezdeti feltételekkel. A kapott adatok azt sugallják, hogy ha nagyszámú cella esetében gyors eredményekre van szükség, akkor módszerünk-nek párhuzamosítás nélkül is figyelemre méltó előnye van. A numerikus kísérlet eredményei azt mu-tatják, hogy a prediktor „konstans-szomszéd” módszer önmagában időben első rendű, míg a „lineáris-szomszéd” korrektor lépés ezt másodrendűvé teszi. Terveink szerint ezen állítások (és a feltétel nélküli stabilitás tulajdonságának) pontos analitikus bizonyítását a közeljövőben másutt fogjuk közzétenni. Emellett elkezdtünk dolgozni a módszerek párhuzamosításán és adaptív lépésméretű változatán is. Ezen lépések után hasznos lehet a módszerek kiterjesztése bonyolultabb (pl. nem lineáris) egyenletek-re és valós műszaki problémákon is tesztelni őket.

Irodalom

- [1] Lienhard IV, J. H., Lienhard V, J. H.: *A heat transfer textbook*, fourth edition, 2017.
- [2] Kovács, E., Majár, J.: *On some analogous transient phenomena*, in MultiScience - XXXII. microCAD International Multidisciplinary Scientific Conference, 2018, p. C1/1.
- [3] Gasparin, S., Berger, J., Dutykh, D., Mendes, N.: *Stable explicit schemes for simulation of nonlinear moisture transfer in porous materials*. J. Build. Perform. Simul. 2018, 11(2): 129–144. <https://doi.org/10.1080/19401493.2017.1298669>
- [4] Xue, G., Feng, H.: *A new parallel algorithm for solving parabolic equations*. Adv. Differ. Equations 2018, 1:174. <https://doi.org/10.1186/s13662-018-1617-8>
- [5] Tavakoli, R., Davami, P.: *New stable group explicit finite difference method for solution of diffusion equation*, Appl. Math. Comput. 2006, 181(2):1379–1386. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2006.03.005>
- [6] Özişik, M. N.: *Finite difference methods in heat transfer*. CRC Press, 2017. <https://doi.org/10.1201/9781315168784>
- [7] Gordon, P.: *Nonsymmetric difference equations*. J. Soc. Ind. Appl. Math. 1965, 13(3):667–673. <https://doi.org/10.1137/0113044>
- [8] Gourlay, A. R.: *Hopscotch: a fast second-order partial differential equation solver*, IMA J. Appl. Math. 1970, 6(4):375–390. <https://doi.org/10.1093/imamat/6.4.375>
- [9] Skvortsov, L. M.: *Explicit stabilized Runge-Kutta methods*, Comput. Math. Math. Phys. 2011, 51(7):1153–1166. <https://doi.org/10.1134/S0965542511070165>
- [10] Verwer, J. G., Hundsdorfer, W. H., Sommeijer, B. P.: *Convergence properties of the Runge-Kutta-Chebyshev method*, Numer. Math. 1990, 57(1):157–178. <https://doi.org/10.1007/BF01386405>
- [11] Kovács, E.: *New stable, explicit, first order method to solve the heat conduction equation*, J. Comput. Appl. Mech. 2020, 15(1):3–13. <https://doi.org/10.32973/jcam.2020.001>