



ANALIZA DOKŁADNOŚCI PRZYBLIŻENIA POCHODNEJ PRZESTRZENNEJ W RÓWNANIU FOURIERA- KIRCHHOFFA UZYSKANEGO METODAMI RÓŻNIC SKOŃCZONYCH ORAZ KWADRATUR RÓŻNICZKOWYCH

Streszczenie

Na podstawie prac związanych z metodą kwadratur różniczkowych (KR) można zaobserwować często pojawiające się problemy z utrzymaniem dokładności i stabilności schematów numerycznych opartych na tej metodzie. Celem przedstawionej pracy jest analiza dokładności metody kwadratur różniczkowych (KR) wykorzystywanej do przybliżania drugiej pochodnej funkcji występującej w równaniu Fouriera – Kirchhoffa. Analiza ta umożliwi wyznaczenie obszarów zastosowań metody KR w odlewnictwie. Wyniki tej pracy mogą być przydatne także dla osób zajmujących się numerycznym rozwiązywaniem zagadnień inżynierskich z innych dziedzin.

W ramach pracy została przeprowadzona analiza dokładności przybliżenia drugiej pochodnej wybranych funkcji metodą KR. Wyniki zostały porównane z analogicznymi wyliczeniami dla metody różnic skończonych (RS) oraz rozwiązaniami analitycznymi. Dla obu rozpatrywanych metod został przebadany rozkład błędu w przedziale różniczkowania. Wyniki pozwoliły sformułować wnioski, na podstawie których można z powodzeniem zdecydować, dla których problemów należy stosować metodę KR, a w przypadku jakich zagadnień rezultaty obliczeń będą gorsze niż te uzyskane metodą RS. Dzięki obserwacji ewolucji rozkładu błędu wewnątrz dziedziny, został zidentyfikowany mechanizm powstawania i kumulowania się błędów. Przeprowadzona przez autorów analiza dokładności dla różnych siatek oraz dokładności przybliżenia dla serii wielomianów pozwoliła na zestawienie zwiększania niedokładności związanego z rozkładem węzłów oraz liczbą węzłów siatki. Analiza wpływu tych czynników na dokładność pozwoli uzyskać wyższą dokładność rozwiązań numerycznych, dzięki wyborowi odpowiedniej metody dyskretyzacji oraz optymalizacji rozkładu i liczby węzłów siatki.

Słowa kluczowe: *metoda kwadratur różniczkowych, metoda różnic skończonych, metody numeryczne, modelowanie matematyczne, równanie Fouriera-Kirchhoffa*

¹ mgr Paweł ŻAK (pawelzak@agh.edu.pl),
dr inż. Janusz LELITO (lelito@agh.edu.pl),
mgr inż. Michał SZUCKI (mszucki@agh.edu.pl),
prof. dr hab. inż. Józef S. SUCHY (jsuchy@agh.edu.pl)
- Katedra Inżynierii Procesów Odlewniczych, Wydział Odlewnictwa AGH

1. WSTĘP

Zrozumienie praw rządzących procesami fizycznymi jest coraz większe. Dziś prawie dla wszystkich problemów inżynierskich możliwe jest stworzenie modeli matematycznych, które bazując na prawach fizycznych opisują zmianę istotnych parametrów procesu. Model taki, to nic innego jak układ równań różniczkowych cząstkowych (RRCz) wraz z warunkami jednoznaczności (warunki geometryczne, fizyczne, brzegowe dla problemów ewolucyjnych: początkowe). Przykładem takiego modelu może być równanie różniczkowe Fouriera-Kirchhoffa, które wzbogacone o równania ciągłości masy, bilansu ciśnienia oraz stężeń z bardzo dobrym przybliżeniem opisują przepływ metalu we wnęce formy oraz zmianę jego temperatury. Ponadto jeżeli nieliniowy człon opisujący wewnętrzne źródło ciepła, zostanie wyrażony przez odpowiednio dobraną funkcję, opisującą kinetykę uwalniania energii przemiany otrzymamy model, który pozwoli przewidywać mikrostrukturę wykonanego detalu. Niestety, znalezienie analitycznego rozwiązania tych równań jest procesem bardzo skomplikowanym. Zwykle metody znajdowania dokładnego rozwiązania można zastosować tylko dla kilku szczególnych przypadków, jednak procesy praktyczne są dużo bardziej skomplikowane. Ze względów praktycznych znalezienie rozwiązań problemów, z którymi borykają się inżynierowie jest bardzo istotne. Przewidywanie błędów technologii pozwala zakładom produkcyjnym zaoszczędzić znaczne kwoty na etapie planowania produkcji nowych elementów. Ze zmniejszeniem ilości braków oraz oszczędnością materiałów zużytych do produkcji idzie zmniejszenie negatywnego wpływu zakładu na środowisko naturalne. Przewidywanie parametrów użytkowych na etapie symulacji przebiegu procesu pozwala określić czas bezpiecznego użytkowania detalu. Jediną drogą pozostaje zatem poszukiwanie aproksymacji rozwiązania badanego modelu. Dlatego tak ważnym jest ciągle rozwijanie metod przybliżonego rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych.

Zwykle przybliżone rozwiązanie problemu, to zbiór ciągów złożonych z wartości poszukiwanej funkcji, współrzędnych punktów, w których funkcja te wartości przyjmuje oraz określonej wartości na osi czasu (dla problemów dynamicznych). Punkty, w których znajdujemy przybliżone rozwiązanie nazywamy węzłami siatki. Na tym etapie osoba, która ma znaleźć rozwiązanie modelu zapisanego przy pomocy układu równań różniczkowych cząstkowych zadaje sobie pytanie, jaki związek występuje pomiędzy pochodną cząstkową, a poszukiwaną wartością funkcji. Okazuje się, że istnieje takie powiązanie. Jest to numeryczna dyskretyzacja zagadnienia, pozwala ona na wykorzystanie informacji zawartych w pochodnych funkcji do znalezienia rozwiązania numerycznego[1].

Rozwój technologii informacyjnej pozwala na wykonanie symulacji wielu procesów zachodzących podczas zalewania oraz krzepnięcia odlewów. Rozważanie kilku procesów, które trwają równolegle i wpływają na siebie, stawia jednak wyższe niż dotychczas wymagania dotyczące dokładności prowadzonych obliczeń. Nawet niewielkie błędy pojawiające się w poszczególnych schematach kumulują się i zwielokrotniają w trakcie analizy procesów równoległych. Dlatego tak ważne jest rozwijanie nowych metod numerycznych oraz analiza ich własności i poszukiwanie obszarów zastosowań. Prezentowana tutaj metoda KR ze względu na swoje właściwości może stać się odpowiednią metodą do zastosowania w takich przypadkach. Duże znaczenie ma określenie parametrów, przy których zastosowanie metody KR da w efekcie poprawę dokładności wyniku obliczeń numerycznych. Pozwala ono indywidualnie potraktować każdy problem i wybrać dla niego odpowiedni schemat numeryczny. Dzięki temu uzyskane przybliżenie będzie najlepsze oraz zostanie uzyskane po dopuszczalnie długo trwających obliczeniach.

1.1. Metoda kwadratur różniczkowych

Metoda kwadratur różniczkowych (KR), jest metodą numeryczną, w której pochodną funkcji zastępuje się kombinacją liniową wartości poszukiwanej funkcji w węzłach siatki oraz współczynników wagowych metody[1]:

$$\frac{\partial^n f}{\partial x^n}(x_i) = \sum_{j=1}^N c_{i,j}^{(n)} f(x_j), \quad i=1,2,\dots,N, \quad (1)$$

gdzie: $\frac{\partial^n f}{\partial x^n}(x_i)$ - oznacza pochodną cząstkową rzędu n , funkcji f w kierunku zmiennej x ; $c_{i,j}^{(n)}$ - są współczynnikami wagowymi metody; $f(x_j)$ - wartość funkcji f w węźle o współrzędnej x_j .

Metoda kwadratur różniczkowych została zapoczątkowana przez prof. Richarda Bellmana [2, 3]. Niestety wyznaczenie współczynników kwadratury, w sposób przez niego zaproponowany wiązało się z rozwiązaniem silnie niestabilnego układu równań. Ze względu na problemy z wyznaczeniem współczynników dla dowolnych siatek, prace nad rozwojem tej metody zostały zarzucone. Dopiero od 1989 roku zaczęły pojawiać się publikacje rzucające nowe światło na metodę wyznaczania współczynników wagowych metody KR [4, 5]. Analiza wzorów kwadraturowych oparta na własnościach przestrzeni wektorowych różnych funkcji, pozwoliła na znalezienie efektywnej metody wyznaczania współczynników wagowych, których wartości zależą tylko od współrzędnych punktów siatki. Kolejne prace nad teoretycznymi podstawami tej metody pozwoliły opracować wzory rekurencyjne, które pozwalają wyznaczyć współczynniki wagowe dla pochodnych dowolnych rzędów [4, 5]. Poniżej prezentowane są wzory na współczynniki wagowe dla pierwszej pochodnej[1]:

$$c_{i,j}^{(1)} = \frac{1}{x_j - x_i} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i,j}}^N \frac{x_i - x_k}{x_j - x_k}, \quad \text{gdzie } i \neq j \text{ oraz } c_{i,i}^{(1)} = -\sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N c_{i,j}^{(1)}, \quad (2)$$

oraz dla pochodnych dowolnego rzędu (n):

$$c_{i,j}^{(n)} = n \left(c_{i,j}^{(1)} c_{i,j}^{(n-1)} - \frac{c_{i,j}^{(n-1)}}{x_i - x_j} \right), \quad \text{gdzie } i \neq j \text{ oraz } c_{i,i}^{(n)} = -\sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N c_{i,j}^{(n)}. \quad (3)$$

Zastosowanie wzoru (1), w którym współczynniki zostaną wyznaczone przy pomocy wyrażeń (2, 3) pozwala wyznaczyć przybliżenie odpowiednich pochodnych badanych funkcji. Dlatego wzory kwadraturowe mogą być pomocne przy budowaniu schematów różnicowych, ale również przy wyznaczaniu pochodnych funkcji w wybranych punktach dziedziny.

1.2. Modelowanie matematyczne w odlewnictwie

Odlewnictwo jest nauką, która łączy w sobie zagadnienia z wielu dziedzin wiedzy. Podczas analizy procesów odlewniczych pojawiają się problemy związane z mechaniką płynów, procesami dyfuzyjnymi, chemią nieorganiczną oraz termodynamiką. Każdy z tych procesów może zostać opisany przez jedno lub wiele RRCz. Ogólnie równania te, wiążą szybkość zmiany analizowanej wartości w czasie z szybkością zmiany w przestrzeni oraz zmiany wynikającej z przemian trwających w medium. Występująca w tych równaniach pochodna względem czasu przybliżana jest przy pomocy schematów różnicowych, natomiast pochodne przestrzenne poddawane są dyskretyzacji numerycznej. Jako, że w każdym kroku czasowym błędy popełnione na etapie dyskretyzacji sumują się, wybór metody numerycznej

dyskretyzacji pochodnej przestrzennej wpływa znacząco na dokładność uzyskanego przybliżenia.

Przykładem RRCz, w którym występują wszystkie człony (pochodna czasowa, przestrzenna, wewnętrzne źródło ciepła) opisane powyżej jest równanie Fouriera – Kirchhoffa (FK)[6].

$$c_p \rho \frac{dT}{d\tau} = \text{div}(-\lambda \cdot \text{grad}T) + q_v \quad (4)$$

Pochodna przestrzenna występująca w tym równaniu może zostać zdyskretyzowana przy pomocy metody różnic skończonych jak również KR. W dalszej części pracy zostanie przeanalizowana dokładność takiego przybliżenia. Porównanie dokładności przybliżenia pochodnej przestrzennej z wartością dokładną, może stanowić pomoc podczas numerycznego rozwiązywania równań różniczkowych.

Efektywny algorytm rozwiązywania równania FK połączonego z modelowaniem zarodkowania[7] może być wykorzystany do symulacji przebiegu zarodkowania i krystalizacji nowoczesnych materiałów, w tym kompozytów na bazie AZ91 zbrojonych cząstkami węgla krzemu.

2. EKSPERYMENT NUMERYCZNY

Wprowadzenie modelu matematycznego w celu opisu rzeczywistego procesu definiuje pewną funkcję, określoną w dowolnym punkcie badanego obszaru oraz w dowolnej chwili, τ , procesu. Dyskretyzacja numeryczna pozwala na znalezienie przybliżonych wartości funkcji, która spełnia wszystkie założenia modelu matematycznego. Walidacja doświadczalna wyniku symulacji jest zatem mechanizmem kontroli dokładności przybliżonego rozwiązania RRCz jak również poprawności założeń przyjętych podczas budowania modelu matematycznego. Porównanie wyników symulacji z wynikami doświadczenia jest zawsze weryfikacją uproszczeń przyjętych podczas matematycznego opisu badanego procesu oraz poprawności doboru metody numerycznej oraz jej parametrów, w świetle równań budujących model matematyczny procesu. Celem oddzielenia kwestii poprawności modelu od dokładności metody należy analizować zachowanie wybranej metody numerycznej dla problemów, których rozwiązanie dokładne jest znane. Wybór schematu różnicowego oraz kroku aproksymacji czasowej może również wpływać na dokładność otrzymanych wyników. Aby uniknąć wpływu tego parametru na obserwowaną dokładność w tej pracy brana pod uwagę jest tylko pochodna przestrzenna.

Funkcje opisujące pole temperatury w badanej dziedzinie mogą być bardzo skomplikowane ze względu na znaczący wpływ funkcji źródła oraz dobór warunków jednoznaczności. W celu przeprowadzenia analizy zostały wytypowane pewne klasy funkcji i funkcje reprezentujące, dla poszczególnych klas. Te klasy, to funkcje eksponentialne ($f_1(x) = \exp(-x)$), logarytmiczne ($f_2(x) = \ln(x+1)$), wielomianowe (*kilka wielomianów różnych stopni*), trygonometryczne ($f_3(x) = \sin(x)$) oraz funkcja Cauchy'ego-Lorenza ($f_4(x) = 1/(1+25x^2)$), charakterystyczna ze względu na trudności uzyskania poprawnego przybliżenia tej funkcji za pomocą krzywych interpolacyjnych. Wzory opisujące współczynniki KR (2, 3) zostały oprogramowane. Powstał również program pozwalający wyznaczyć przybliżenie pochodnej przestrzennej metodą RS. Dla funkcji reprezentujących wybrane klasy została znaleziona pochodna przy użyciu macierzy współczynników kwadratury różniczkowej oraz macierzy współczynników metody różnic skończonych. Znajomość dokładnych wartości pochodnej przestrzennej w węzłach siatki pozwala na wyznaczenie błędu popełnianego podczas przybliżania pochodnych metodami KR i RS. Analiza wartości błędu dla różnych siatek pozwala ocenić opłacalność stosowania

odpowiednich metod dyskretyzacji w zaprezentowanych warunkach. Na potrzeby tej pracy zdefiniowano następujące parametry, których wartości były porównywane:

- *długość wektora błędu*; pierwiastek z sumy kwadratów różnic między wartością dokładną, a wartością przybliżoną, w każdym węźle siatki,
- *średnia wartość błędu metody*; długość wektora błędu podzielona przez liczbę węzłów siatki,
- *uśredniona wartość błędu*; średnia ze średnich wartości błędów metody dla funkcji: f_1, f_2, f_3 .

Dokładność wybranych metod numerycznych była analizowana dla funkcji jednej zmiennej w przedziale $[0, 1]$. Analiza obejmowała zmiany ilości węzłów dyskretyzacji, N , (długość kroku przestrzennego) w przedziale oraz typ zastosowanej siatki różnicowej. Do analizy wytypowano trzy rodzaje siatek różnicowych:

- S1: siatka o węzłach równoodległych:

$$x_i = \frac{i-1}{N-1}, \quad i = 1, 2, \dots, N; \quad (5)$$

- S2: siatka o węzłach będących punktami w których N -ty wielomian Czebyszewa przyjmuje wartość -1 lub 1 :

$$x_i = \frac{1}{2} \left(1 - \cos \left(\frac{i-1}{N-1} \pi \right) \right), \quad i = 1, 2, \dots, N; \quad (6)$$

- S3: siatka o węzłach losowo wybranych z przedziału $[0, 1]$.

Wraz ze wzrostem liczby rozpatrywanych węzłów zmniejsza się stabilność metody KR. Ze względu na znaczący wpływ na stabilność metody została również przeprowadzona analiza rozkładu błędu na węzłach rozpatrywanego obszaru.

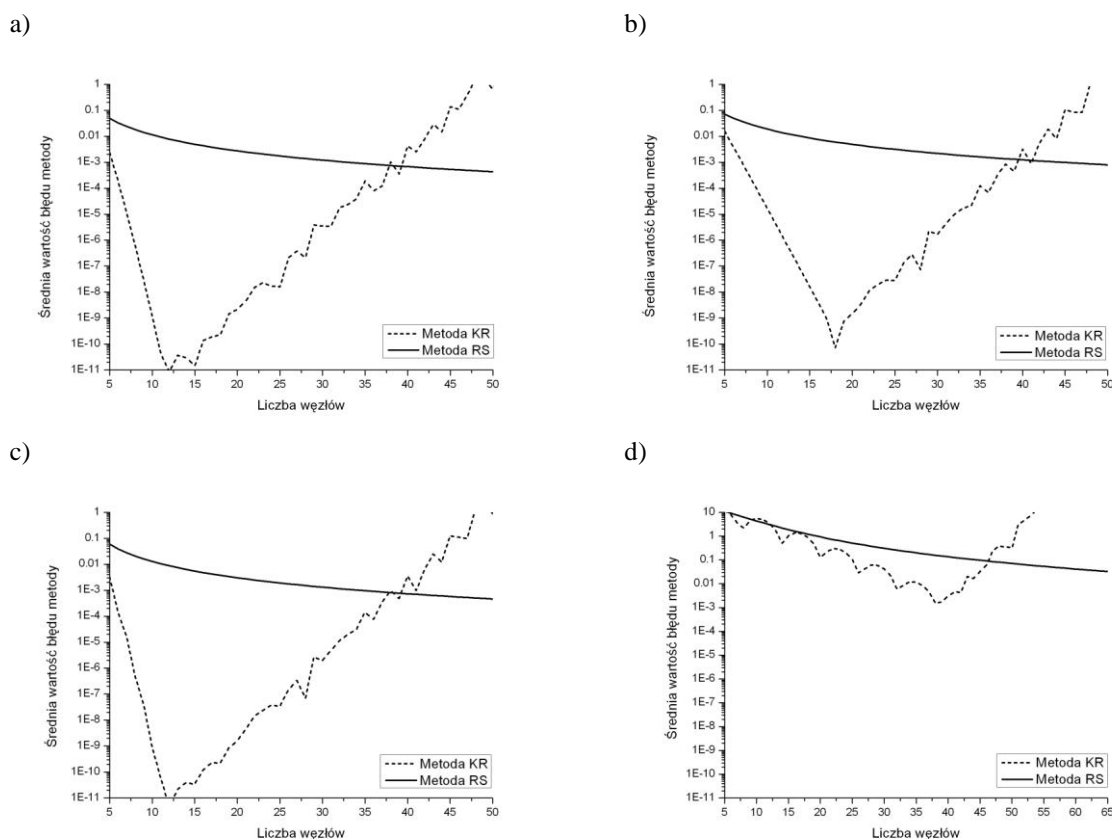
3. WYNIKI OBLICZEŃ NUMERYCZNYCH

Metody RS oraz KR pozwoliły z powodzeniem wyznaczyć przybliżenia pochodnych badanych funkcji. Duży wpływ na dokładność otrzymanych wyników miały przede wszystkim: rozkład węzłów siatki i ich liczba.

Na Rysunku 1 przedstawiono zależność średniej wartości błędu metod KR i RS przybliżenia pochodnej drugiego rzędu od liczby punktów dyskretyzacji przestrzeni dla siatki o węzłach równoodległych. Na rysunkach 1a, b, c widać zachowanie badanych metod dla siatek o liczbie węzłów z przedziału $N = 5 \div 50$, dla rysunku 1d ten przedział to $N = 5 \div 65$. Wykresy przedstawiają wyniki obliczeń dla przykładowych czterech funkcji, reprezentantów następujących klas odwzorowań: eksponentialne (Rys. 1a), logarytmiczne (Rys. 1b), trygonometryczne (Rys. 1c) oraz dla funkcji Cauchy'ego-Lorenza (Rys. 1d). Dla wybranych klas funkcji można zaobserwować podobne tendencje w zmianie średnich wartości błędu dla metod RS oraz KR. Dokładność metody RS stopniowo poprawia się wraz ze wzrostem liczby węzłów siatki. Dokładność tej metody dla trzech pierwszych funkcji (Rys. 1a, b, c) jest jednak na poziomie $10^{-3} \div 10^{-1}$, a poprawa dokładności jest powolna. Wartość średniego błędu metody KR jest znacząco mniejsza od błędu metody RS już dla siatki o $N=5$ węzłach. Dla tych samych funkcji, dla których dokładność metody RS zmieniała się bardzo wolno, widać znaczącą poprawę dokładności wraz ze wzrostem gęstości punktów dyskretyzacji, gdy $N < 13 \div 17$. Wówczas metoda osiąga maksymalną dokładność, która jest na poziomie $10^{-11} \div 10^{-10}$. Następnie dokładność przybliżenia pogarsza się. Pogorszenie, podobnie jak uprzednia poprawa dokładności, następuje stosunkowo szybko ze wzrostem liczby węzłów siatki. Dla siatek o $N > 37 \div 40$ średnia wartość błędu przybliżenia drugiej pochodnej funkcji

metodą KR staje się większa niż dla metody RS i wciąż szybko rośnie wraz ze wzrostem liczby węzłów siatki.

Rysunek 1d przedstawia zachowanie obu metod dla funkcji Cuchy’ego-Lorenza. Dokładność obu metod dla funkcji Cauchy’ego-Lorenza jest znacznie mniejsza niż dla poprzednio badanych funkcji. Jednak, dla siatek o liczbie węzłów, N , z przedziału $9 \div 42$ średnia wartość błędów metody KR jest mniejsza niż dla metody RS. W przedstawionym tu przedziale $N \in [5, 65]$ maksymalna dokładność metody KR wynosi 0.0015 dla $N=35$, podczas gdy maksymalna dokładność metody RS wynosi 0.0275 dla $N=65$. Dla siatek o liczbie węzłów większej niż 42 wraz ze wzrostem liczby węzłów siatki metoda KR bardzo szybko traci dokładność i wyniki przez nią zwracane stają się niewiarygodne. Dokładność rozwiązania metodą RS wciąż poprawia się, choć nieznacznie, dla coraz gęstszych siatek.



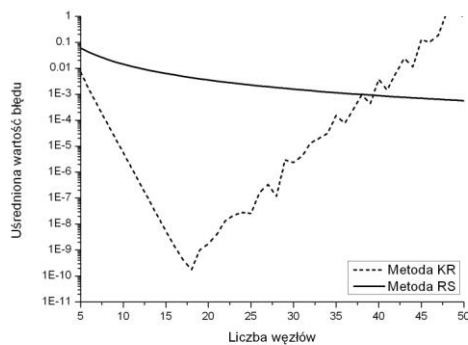
Rysunek 1. Porównanie wpływu liczby węzłów siatki (węzły równoodległe) na dokładność przybliżenia pochodnej przestrzennej metodami KR i RS: a) funkcja eksponentialna f_1 ; b) funkcja logarytmiczna f_2 ; c) funkcja trygonometryczna f_3 ; d) funkcja Cauchy’ego-Lorenza f_4 .

Rysunek 2 przedstawia wyniki analizy wpływu rozmieszczenia węzłów siatki na dokładność przybliżenia metodami KR i RS. W celu przeprowadzenia porównania na wykresach została przedstawiona uśredniona wartość błędów dla funkcji f_1, f_2, f_3 . Na wykresie 2a przedstawiony jest wynik obliczeń dla siatki równoodległej. Wyniki te pokrywają się z tym co zostało już powiedziane podczas analizy wykresów 1a, b, c. Dokładność metody KR dla siatek o liczbie węzłów N mniejszych niż 40 jest wyższa niż metody RS. W przedziale $N \in [5, 18]$ dokładność przybliżenia metodą KR poprawia się znacząco, aż do poziomu 1.8×10^{-10} . Następnie dokładność przybliżenia szybko maleje, dla siatek o $N > 40$ metoda RS daje już lepsze wyniki niż metoda KR. Na kolejnym wykresie (Rys. 2b) widać zachowanie metod KR i RS dla siatki Czebyszewa-Gaussa-Lobatto, dalej nazywanej siatką Lobatto. W tym przypadku również możemy zaobserwować bardzo szybki spadek uśrednionej wartości

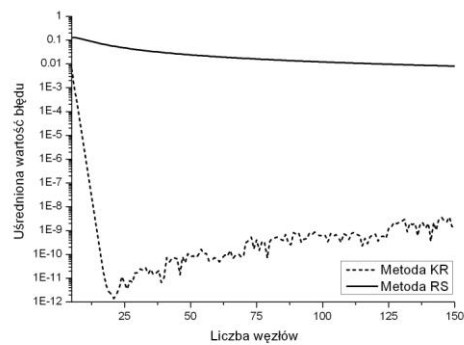
błędu dla metody KR dla siatek $N \in [5, 21]$ oraz powolny spadek wartości tego parametru dla metody RS. Poprawa dokładności metody RS dla tej siatki jest wolniejsza niż w przypadku siatki o węzłach równoodległych. Po osiągnięciu maksymalnej dokładności, na poziomie 1.4×10^{-12} , przez metodę KR dokładność przybliżenia maleje jednak dużo wolniej niż w przypadku siatki o równomiernie rozmieszczonych węzłach. Dla siatki o liczbie węzłów równej 150 uśredniona wartość błędu dla metody KR wynosi 1.8×10^{-9} natomiast dla metody RS 0.008. W przypadku tej siatki metoda KR daje dużo lepsze przybliżenie nawet dla bardzo gęstej siatki.

Na rysunkach 2c i 2d przedstawione są wykresy uśrednionych wartości błędu dla dwóch grup losowo wybieranych węzłów siatki. Pomimo wzrostu liczby węzłów siatki można zaobserwować pogorszenie dokładności przybliżenia metodą RS wraz ze wzrostem liczby węzłów siatki. Nadal widoczna jest tendencja do znacznej poprawy jakości rozwiązania uzyskanego metodą KR dla siatek o liczbie węzłów $5 \div 16$. W przypadku siatki o liczbie węzłów $N=16$ (Rys. 2c) oraz $N=18$ (Rys. 2d) metoda osiąga maksymalną dokładność, wynosi ona 2.3×10^{-7} dla przypadku przedstawionego na Rys. 2c oraz 1.1×10^{-10} . Następnie uśredniona wartość błędu bardzo szybko rośnie. W obu przypadkach możemy zaobserwować siatki o liczbie węzłów większej niż 20 dla których poprawia się dokładność rozwiązania.

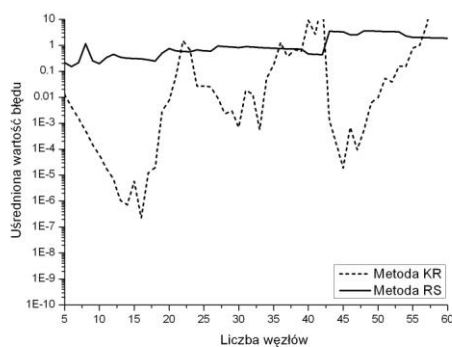
a)



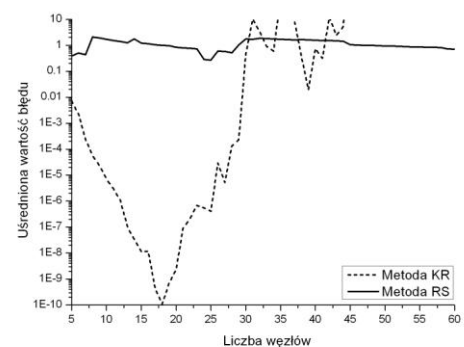
b)



c)



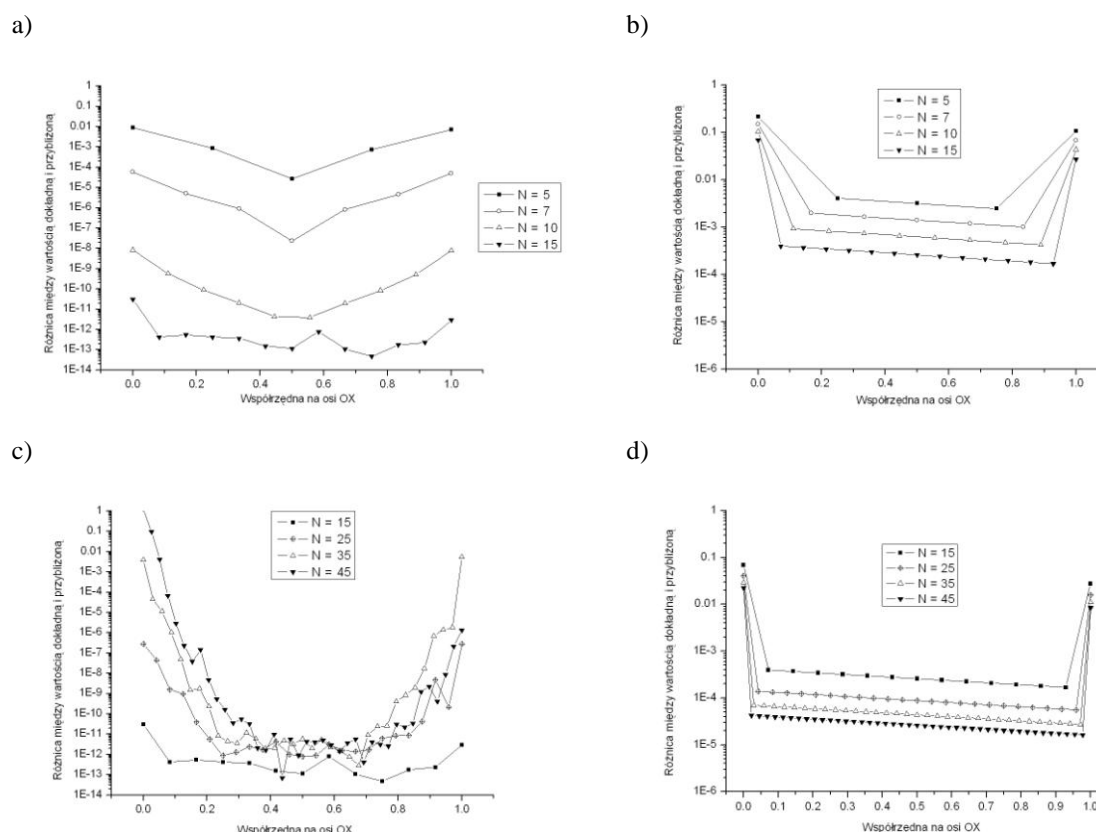
d)



Rysunek 2. Wpływ rozkładu węzłów siatki na dokładność przybliżenia pochodnej uzyskanego metodami KR oraz RS: a) węzły równoodległe; b) zera wielomianu Czebyszewa II (siatka Czebyszewa-Gaussa-Lobatto); c) przypadkowo rozmieszczone węzły (losowanie 1); d) przypadkowo rozmieszczone węzły (losowanie 2)

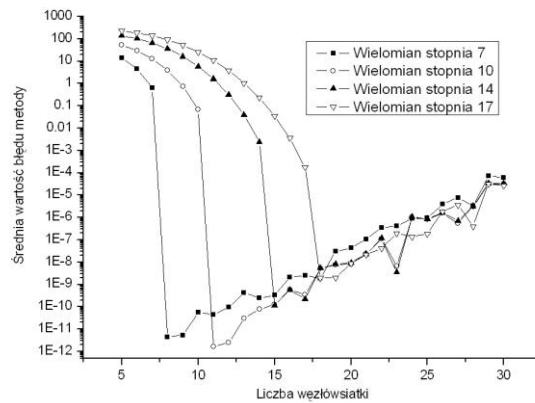
Na rysunkach oznaczonych Rys. 3a, b, c, d zestawione zostały rozkłady błędów przybliżenia pochodnej przestrzennej metodami KR i RS w badanej dziedzinie, $x \in [0,1]$, dla funkcji eksponentialnej f_1 . Na rysunku 3a są przedstawione wyniki dla metody KR dla przypadku siatek o niewielkiej liczbie węzłów $N=5, 7, 10, 15$, na rysunku 3b wyniki dla tych samych siatek ale dla metody RS. Łatwo dostrzec tendencję, do poprawiania się jakości

rozwiązania dla wszystkich węzłów z badanej dziedziny w przypadku metody KR. Dostrzegalne są także różnice w wartościach błędów w centrum przedziału oraz na jego brzegach. Rozwiązanie jest dokładniejsze w centrum niż na brzegach, jednak różnice nie są znaczące. Jakość rozwiązania poprawia się również w przypadku metody RS (Rys. 3b), jednak szybkość zmian dokładności dla coraz gęstszych siatek nie jest tak duża jak dla metody KR. Dokładność metody RS, dla wszystkich badanych siatek, w całym przedziale pozostaje na bardzo podobnym poziomie, jedynie wartości w węzłach brzegowych obciążone są większym błędem. Różnice między błędem popełnionym w punkcie brzegowym, a błędami popełnionymi dla wartości w centrum przedziału dla metody RS są znaczące. Błąd pojawiający się na brzegu maleje dla tej metody wraz ze wzrostem liczby węzłów siatki (Rys. 3b). Dla siatki o $N=15$ węzłów dokładność metody KR w badanym przedziale jest na poziomie 10^{-13} - 10^{-10} , dla metody RS 10^{-5} - 10^{-2} .



Rysunek 3. Rozmieszczenie błędów przybliżenia drugiej pochodnej w rozpatrywanej dziedzinie: a) metoda KR dla siatek $N=5 \div 15$, b) metoda RS dla siatek $N=5 \div 15$, c) metoda KR dla siatek $N=15 \div 45$, d) metoda RS dla siatek $N=15 \div 45$

Na rysunkach 3c, d przedstawione są wyniki dla metody KR i RS dla siatek o liczbie węzłów $N=15, 25, 35, 45$. Zachowanie metody RS (Rys. 3d) dla tych siatek jest bardzo podobne do obserwowanego dla siatek o mniejszej liczbie węzłów (Rys. 3b). W miarę zwiększania liczby punktów dyskretyzacji maleje błąd metody we wszystkich węzłach. Wartość błędów dla węzłów centralnych jest na podobnym poziomie, natomiast błąd, jaki popełniamy w węzłach brzegowych jest znacznie większy. W przypadku metody KR można zaobserwować (Rys. 3c) odmienne zachowanie. Wraz ze wzrostem liczby węzłów wartość błędów popełnianego podczas przybliżania pochodnych w punktach znajdujących się w pobliżu brzegów obszaru rośnie, podczas gdy wartości błędów w centrum pozostają na podobnym poziomie: 10^{-13} - 10^{-10} . Dla siatek o $N=35, 45$ maksymalne błędy są już na poziomie 10^{-1} , a nawet osiąga wartości większe niż 1.



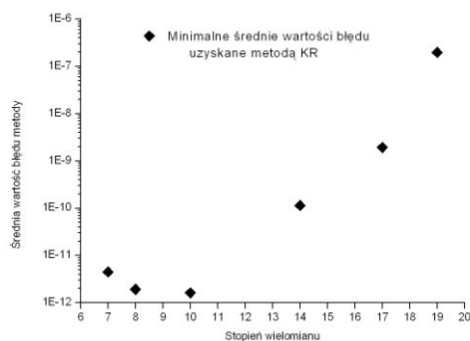
Rysunek 4. Zamiana dokładności metody KR wraz ze wzrostem liczby węzłów siatki dla wielomianów różnych stopni

Rysunek 4 przedstawia, jak zmienia się dokładność przybliżenia drugiej pochodnej różnych wielomianów, metodą kwadratur różniczkowych, wraz ze wzrostem liczby węzłów równoodległej siatki różnicowej. Przedstawione na tym wykresie wartości zostały wyznaczone dla następujących funkcji:

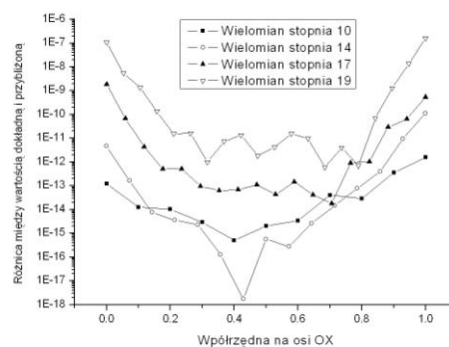
$$w_1(x)=x^7-x+1; w_2(x)=x^{10}; w_3(x)=x^{14}; w_4(x)=x^{17}-x^3. \quad (7)$$

Wyniki dla metody różnic skończonych nie odbiegały zasadniczo od dotychczas prezentowanych (Rys 1, 2), dlatego aby nie utrudniać analizy zostały one w tym przypadku pominięte. Wykresy dla każdej z rozpatrywanych siatek posiadają podobny charakter. Wraz ze wzrostem liczby węzłów siatki dokładność metody poprawia się. Dla siatki o liczbie węzłów o jeden większej niż stopień analizowanego wielomianu dostrzegalna jest skokowa poprawa dokładności – metoda osiąga swoją maksymalną dokładność. Następnie, wartość popełnianego błędów w miarę wzrostu liczby węzłów siatki rośnie. Szybkość z jaką pogarszają się wyniki dla wszystkich wielomianów jest podobna.

a)



b)



Rysunek 5. a) Minimalne średnie wartości błędów metody i ich zmiana dla wielomianów różnych stopni
b) Rozkład błędów przybliżenia drugiej pochodnej metodą KR w przedziale [0, 1] dla równoodległych siatek o liczbie węzłów o jeden większej od stopnia wielomianu dla wielomianów różnych stopni

Na rysunku 5a przedstawione zostały wartości minimalnej średniej wartości błędów metody KR popełnionych podczas wyznaczania drugiej pochodnej wielomianów różnych

stopni, w przypadku siatki o równooddalonych węzłach. Oprócz wielomianów (7) zostały wyznaczone przybliżenia dla następujących funkcji:

$$w_5(x) = x^8; w_6(x) = x^{19} - x^{18} + x^3 - x^5 - 3. \quad (8)$$

Na wykresie tym widać, że dla wielomianów o stopniach z przedziału $7 \div 10$ minimalna wartość błędu jest na podobnym poziomie, natomiast dla wielomianów o wyższych rzędach wartość ta rośnie. Widzimy, że dla siatek o większej liczbie węzłów szybko tracimy dokładność metody. Rysunek 5b przedstawia jak rozkłada się różnica między wartością dokładną, a wartością przybliżoną w przedziale, w którym prowadzone są obliczenia, dla siatki równoodległej o liczbie węzłów o jeden większej niż stopień wielomianu. Znow można zaobserwować, że wraz ze wzrostem stopnia wielomianu (liczby punktów dyskretyzacji) rośnie błąd przy brzegu przedziału.

4. Dyskusja Wyników

Krzywe przedstawione na Rys. 1a, b, c sugerują, że dokładność metody KR zwiększa się dla siatek o niewielkiej liczbie węzłów. Już w przypadku siatki o liczbie węzłów równej $N=5$ dokładność tej metody jest znacząco wyższa niż w przypadku metody RS. Następnie wraz ze wzrostem liczby węzłów siatki rośnie dokładność przybliżenia. Dla siatek o liczbie węzłów zawartej w przedziale $N=13 \div 16$ metoda KR osiąga maksymalną dokładność. Dalsze zagęszczanie siatki pogarsza dokładność przybliżenia. Od pewnego momentu dokładność przybliżenia uzyskana tą metodą jest gorsza niż dokładność uzyskana metodą RS. Taki efekt zwiększania liczby węzłów siatki może być zaobserwowana we wszystkich badanych przypadkach. Poprawianie się dokładności wyliczeń przeprowadzonych metodą KR wraz ze wzrostem liczby węzłów w przedziale $N=5 \div 15$, może być obserwowane niezależnie od wybranej siatki (Rys. 2). Wybór siatki może wpływać na szybkość z jaką pogarsza się dokładność przybliżenia. Po osiągnięciu maksimum dokładności, jakość przybliżenia uzyskanego metodą KR pogarsza się w każdym z rozpatrywanych przypadków, jednak z różnymi szybkościami. Utrata dokładności obserwowana dla siatki Lobatto (6) zachodzi zdecydowanie najwolniej (Rys. 2b). Siatka ta charakteryzuje się tym, że jej punkty znacznie zagęszczone są w pobliżu brzegów dziedziny. Jak można zaobserwować na wykresie 3c błąd metody KR kumuluje się przede wszystkim w pobliżu węzłów znajdujących się w bezpośrednim sąsiedztwie punktów brzegowych. Jak pokazano już w kilku pracach [8,9] zagęszczanie siatki przy brzegach znacznie poprawia jakość przybliżenia uzyskanego metodą KR. Taka własność tego rozkładu węzłów ogranicza jej stosowanie tylko do zagadnień, w których nie analizujemy żadnych dodatkowych procesów zachodzących wewnątrz dziedziny. W odlewnictwie jednak, często rozpatrywane są zagadnienia, w których bardzo ważna jest znajomość wartości analizowanego parametru (temperatury, stężenia pierwiastka, składowych wektora prędkości, ciśnienia, itd.) w możliwie podobnej liczbie punktów w każdym podobszarze dziedziny. Na podstawie prezentowanych tu wyników można zauważyć, że metoda RS również jest wrażliwa na charakter rozkładu węzłów siatki (Rys. 2b – 2d).

Wyniki analizy rozkładu błędu wewnątrz dziedziny prowadzą do bardzo ciekawych spostrzeżeń. Obserwowane nagłe pogorszenie dokładności (Rys1, 2) dla siatek o liczbie węzłów $N=20$ i więcej podczas dyskretyzacji KR, jest spowodowana pojawieniem się błędów na brzegu dziedziny i ich szybkim wzrostem. Stopniowe obniżanie się krzywej rozkładu błędu (Rys 3b, d) o bardzo zbliżonym kształcie dla metody RS może tłumaczyć stopniową lecz bardzo powolną poprawę dokładności rozwiązań (Rys 1, 2) wraz ze wzrostem liczby węzłów siatki N .

W przypadku funkcji Cauchy-Lorenza można stwierdzić podobne zachowanie jak dla pozostałych funkcji. Skala zmian, o których pisano wcześniej jest jednak inna, a maksymalna

dokładność metody KR jest osiągnięta dla siatki o $N=35$. Wybrana tu funkcja jest bardzo charakterystyczna ze względu na to, że podczas jej interpolacji na siatce o węzłach równoodległych otrzymuje się charakterystyczne oscylacje w pobliżu brzegów dziedziny (efekt Rungego). Metoda KR jest oparta na bazie wielomianów interpolacyjnych Lagrange'a. Wyznaczanie pochodnej wybranej funkcji metodą KR jest równoważne, z wyznaczeniem pochodnej wielomianu interpolującego tę funkcję. Skoro zatem aproksymacja w bazie wielomianów Lagrange'a ma problemy z przybliżaniem tej funkcji, możemy się spodziewać, podobnych problemów w przypadku metody KR. Jednak dla siatek $N=9 \div 42$ dokładność metody KR jest wyższa niż w przypadku metody RS.

Jeżeli rozwiązaniem dokładnym zadania interpolacyjnego jest wielomian, którego stopień wynosi m , to rozwiązanie uzyskane na $m+1$ węzłowej siatce powinno być rozwiązaniem dokładnym. Rzeczywiście dla takich siatek dokładność przybliżenia jest największa, a dokładność uzyskana dla siatek o $N < m+1$ bardzo szybko rośnie. Można jednak zauważyć, że w przypadku siatek o $N > m+1$, dla prezentowanych tu (Rys. 4) wielomianów wraz ze wzrostem ich stopnia (równocześnie rośnie liczba węzłów siatki na której można otrzymać wartość obarczoną minimalnym błędem) rośnie również średni błąd. Istotne jest również to, że minimum średnich błędów dla wszystkich wielomianów oraz średnie błędy dla gęstszych siatek mają bardzo zbliżone wartości. Analiza rozkładu błędu w przedziale (Rys. 5b) pozwala zaobserwować podobne zachowanie jak w przypadku pozostałych funkcji. Ze względu na własności wielomianów interpolacyjnych można się spodziewać, że maksima dokładności będą na tym samym poziomie. Prawdopodobnie pogarszanie się dokładności, które możemy zaobserwować na wykresie (Rys 5a), jest spowodowane pojawianiem się błędu przy brzegu przedziału oraz jego wzrostem i zaburzeniem dokładności w sąsiednich węzłach.

Metoda KR pozwala poprawić dokładność przybliżenia drugiej pochodnej dla siatek o liczbie węzłów z przedziału $N=5 \div 20$ dla dowolnych siatek w stosunku do wartości wyznaczonych metodą różnic skończonych. Dobór odpowiedniej siatki pozwala na zwiększenie wartości N , dla której dokładność wciąż jest wyższa niż metody RS. W przypadku siatki o węzłach równoodległych wartość ta zmienia się do $N=5 \div 40$. Takie zachowanie metody KR pozwala na stosowanie dużo siatek o dużo mniejszej liczbie węzłów w badanym obszarze niż dla metody RS. Świadomość takiego zachowania metody KR pozwala przygotować symulacje procesów odlewniczych w taki sposób, by wykorzystać własność wysokiej dokładności tej metody. Jeżeli to możliwe do dyskretyzacji powinny być wybierane siatki bardziej zagęszczone w kierunku brzegów. Dobór niewielkiej liczby węzłów w obszarach, gdzie to możliwe, pozwala również na oszczędność czasu przeznaczanego na obliczenia. W trakcie rozwiązywania praktycznych problemów zwykle nie mamy możliwości znacznego wpływu na rozkład węzłów (musimy dogęszczać najistotniejsze ze względu na zachodzące tam procesy obszary) ani na ich liczbę. Przedstawione tutaj analizy pozwalają wyciągnąć wniosek, że jeżeli problem jest rozwiązywany na siatce o znacznej liczbie punktów węzłowych zastosowanie metody KR da wyniki, które będą obarczone znacznym błędem. W takim przypadku lepiej jest stosować metodę różnic skończonych.

Liczba węzłów siatki znacząco wpływa na dokładność metody KR. Zaburzenie rozmieszczenia węzłów (Rys. 2) ma wpływ przede wszystkim na szybkość pogarszania się jakości rozwiązania wraz ze wzrostem liczby węzłów siatki. Dla siatek o liczbie węzłów $N=5 \div 13$, dokładność metody KR wzrasta bardzo szybko niezależnie od wybranej siatki. W przypadku wielomianów różnych stopni maksymalna dokładność osiągnięta jest dla siatek, dla których zadanie interpolacyjne ma jednoznaczne rozwiązanie. Jednak od pewnego momentu ta, maksymalna dokładność zaczyna maleć, mimo iż pracujemy na dokładnym wielomianie – rozwiązaniu zadania interpolacyjnego[4]. Świadczy to o tym, że błąd pojawia się podczas wyznaczania przybliżenia rozwiązania przy pomocy współczynników wagowych

metody KR. Analiza przyczyn powstawania tego błędu pozostaje tematem licznych analiz [10] oraz będzie kontynuowana przez autorów tej pracy.

Wnioski:

Możliwe jest zastosowanie metody kwadratur różniczkowych do numerycznej dyskretyzacji pochodnej przestrzennej w równaniu Fouriera-Kirchhoffa.

Stosowanie metody KR dla siatek o niewielkiej liczbie węzłów pozwala znacznie zredukować błąd pojawiający się podczas przybliżania pochodnej przestrzennej oraz skrócić czas obliczeń.

Dokładność metody KR zależy przede wszystkim od liczby węzłów siatki.

Wysoka niedokładność metody KR dla gęstych siatek jest spowodowana rozprzestrzenianiem się błędu dyskretyzacji węzłów w pobliżu brzegu rozważanej dziedziny. Rozważanie nad sposobem uniknięcia tych problemów staną się tematem dalszej pracy.

Opracowano w ramach pracy własnej AGH nr 10.10.170.363.

Literatura

- [1] – **Shu, Chang**: *Differential Quadrature and Its Application In Engineering*, London, Springer, 2000
- [2] – **Bellman RE, Casti J**: *Differential quadrature and long term integration*, J Math Anal Appl. 1971; **34**, pp. 235-238
- [3] – **Bellman RE, Kashef BG, Casti J**: *Differential quadrature: a new technique for rapid solution of nonlinear partial differential equations*, J Comput Phys, 1984; **10**, pp 40-52
- [4] – **Quan JR, Chang CT**: *New insights in solving distributed system equations by the quadrature methods – I*, Comput Chem Engrg. 1989; **13**, pp. 779-788
- [5] – **Quan JR, Chang CT**: *New insights in solving distributed system equations by the quadrature methods – II*, Comput Chem Engrg. 1989; **13**, pp. 1017-1024
- [6] – **Mochnacki B, Suchy JS**: *Modelowanie i symulacja krzepnięcia odlewów*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 1993
- [7] – **Lelito J, Żak P, Suchy JS**: *The grain nucleation rate of the AZ91/SiC composite based on Maxwell-Hellawell model*, Archives of Metallurgy and Materials, 2009; **54**(2), pp.347-350
- [8] – **Shu C, Chen W, Xue H, Du H**: *Numerical study of grid distribution effect on accuracy of DQ analysis of beams and plates by error estimation of derivative approximation*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2001; **51**, pp 159-179
- [9] – **Ng CHW, Zhao YB, Xiang Y, Wei GW**: *On The Accuracy And Stability Of A Variety Of Differential Quadrature Formulations For The Vibration Analysis Of Beams*, International Journal of Engineering and Applied Sciences, 2009; **1**, pp 1-25
- [10] – **Fung TC**: *Stability and accuracy of differential quadrature method in solving dynamic problems*, Computer methods in applied mechanics and engineering, 2002; **191**, pp. 1311-1331