

Implementace řešení soustav obyčejných diferenciálních a algebraických rovnic

Bc. David Salač, Ing. Lukáš Zedek, Ph.D.

Abstrakt

Magisterský projekt se týká zmapování postupů řešení soustav algebraických diferenciálních rovnic. Soustavy tohoto druhu lze řešit například prostřednictvím decouplingu (tedy převodu na soustavu ODR) nebo přímou aplikací vybraných numerických metod. V projektu byla pro řešení zadaného problému rozpouštění kalcitu podzemní vodou využita metoda BDF (Backward Differentiation Formula), která je dostupná v GNU Octave prostřednictvím open-source knihovny DASPK, využívá ji knihovna IDA z balíku SUNDIALS a stejnou metodu lze nalézt i v komerčním produktu MATLAB. Praktická část je zaměřena na implementaci modelového problému rozpouštění kalcitu podzemní vodou s využitím DASPK, SUNDIALS IDA a MATLAB. Výstupy jsou porovnávány s referenčními daty a vzájemně mezi sebou.

Úvod

Práce vznikla za účelem zkoumání matematického modelu rozpouštění kalcitu podzemní vodou. Problém lze (mimo jiné) popsat soustavou algebraicko-diferenciálních rovnic popisujících probíhající děje. Matematicky lze problém po náhradě chemického značení písmeny $A-F$ vyjádřit následující soustavou (dle [1], upraveno):

$$K = B(t)E(t) \quad (1)$$

$$L = \frac{B(t)C(t)}{A(t)} \quad (2)$$

$$M = \frac{B(t)F(t)}{C(t)} \quad (3)$$

$$\frac{\partial D}{\partial t} = n \cdot \left(1 - \frac{D(t)F(t)}{N}\right) \quad (4)$$

využívané parametry (tedy K, L, M, N a n) lze získat experimentálně nebo s využitím termodynamických databází.

Analýza modelového problému

Při formulaci problému v rovnicích (1)–(4) jsou první tři rovnice algebraické a poslední je obyčejná diferenciální. Soustava má v tomto tvaru čtyři rovnice pro šest neznámých. Počet neznámých je nutné redukovat k čemuž se využívají rozsahy reakcí níže označené x_1, \dots, x_4 . S jejich využitím lze získat novou soustavu čtyř rovnic pro čtyři neznámé ve tvaru:

$$K = BE = (B_0 + x_1 + x_2 + x_3)(E_0 + x_1) \quad (5)$$

$$L = \frac{BC}{A} = \frac{(B_0 + x_1 + x_2 + x_3)(C_0 + x_2 - x_3)}{A_0 - x_2} \quad (6)$$

$$M = \frac{BF}{C} = \frac{(B_0 + x_1 + x_2 + x_3)(F_0 + x_3 + x_4)}{C_0 + x_2 - x_3} \quad (7)$$

$$\frac{\partial D}{\partial t} = g(D, F) = n \cdot \left(1 - \frac{DF}{N}\right) = n \left(1 - \frac{(D_0 + x_4)(F_0 + x_3 + x_4)}{N}\right) \quad (8)$$

kde A_0, B_0, C_0, D_0, E_0 a F_0 v rovnicích (1)–(4) jsou počáteční podmínky známé při výpočtu.

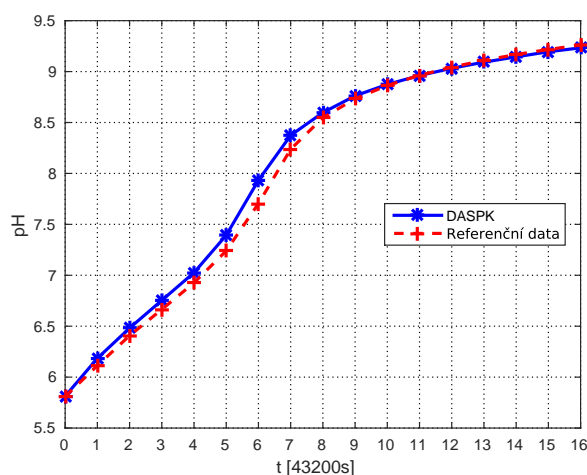
Pro uvedenou soustavu byl vypočten differentiation index jako 1, bylo by možné numericky provést decoupling soustavy (tedy převod na soustavu obyčejných diferenciálních rovnic s omezujícími podmínkami, jak je uvedeno v [2]).

Jako použitelná numerická metoda k řešení problému byla zvolena BDF (Backward Differentiation Formula), jedná se o víceřadovou metodu (jak je uvedeno v [3]). Ta je implementována v dostupných open-source knihovnách, především v DASPK a SUNDIALS IDA, a dále i v komerčních řešeních jako je MATLAB.

Řešení modelového problému

Modelový problém byl numericky vyřešen pomocí open-source knihoven DASPK, SUNDIALS IDA a pomocí komerčního produktu MATLAB R2015a. Jako výstup se sleduje vývoj pH v čase a to především proto, že ostatní neznámé se dají ze znalosti pH určit.

Ukázkový výstup programu představuje Graf 1. Referenční data jsou získána z jiného numerického modelu pomocí programu The Geochemist's Workbench.



Graf 1: Vývoj pH v čase získaný pomocí knihovny DASPK

Závěr

Výsledky získané při řešení problému rozpouštění kalcitu podzemní vodou pomocí open-source knihoven SUNDIALS IDA a DASPK i pomocí komerčního produktu MATLAB jsou srovnatelné jak vzájemně mezi sebou, tak při porovnání s referenčními daty – všechny využití prostředky jsou tedy pro daný případ použitelné. V budoucnu by bylo přínosné prozkoumat konkrétní implementace BDF metody v open-source knihovnách a navrhnout případné vylepšení například s využitím metody MEBDF (Modified Extended BDF). Případně by bylo vhodné porovnat řešení získané s využitím decouplingu se stávajícími výstupy.

Reference

- [1] ZEDEK, Lukáš. *Modelování transportně-chemických procesů*. Liberec, 2014. Dizertační práce. Technická univerzita v Liberci. Vedoucí práce Jan Šembera.
- [2] SCHULZ, Steffen. Four Lectures on Differential-Algebraic Equations [online]. Humboldt Universität zu Berlin, 2003, [cit. 2016-03-25]. Dostupné z: http://www.mathematik.hu-berlin.de/~steffen/pub/introduction_to_daes_497.pdf
- [3] FARAGÓ, István. *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations* [online]. Budapest, 2013 [cit. 2016-02-27]. Dostupné z: http://www.cs.elte.hu/~faragois/ODE_angol.pdf