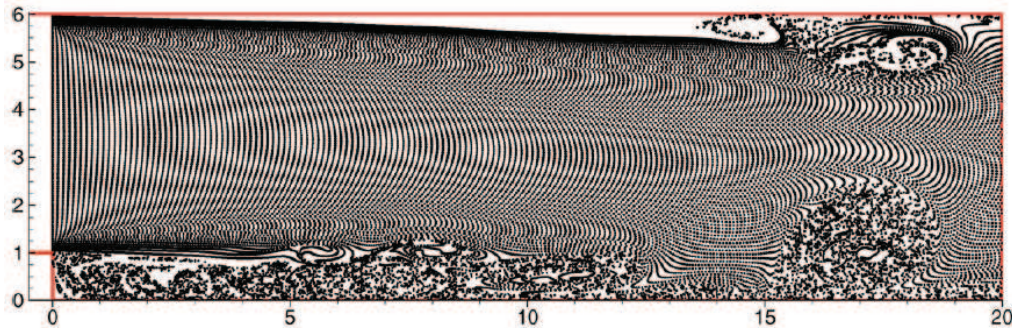


Matjaž Hriberšek, Jure Ravnik

Numerično modeliranje in računalniške simulacije

1.del: Gradniki numeričnega računanja



FAKULTETA ZA STROJNIŠTVO

MARIBOR, 2012

Matjaž Hriberšek, Jure Ravnik: Numerično modeliranje in računalniške simulacije 1.del: Gradniki numeričnega računanja

©2012 Fakulteta za strojništvo, Univerza v Mariboru

Naslov publikacije: Numerično modeliranje in računalniške simulacije,
1.del: Gradniki numeričnega računanja
Vrsta publikacije: učbenik
Avtorja: red. prof. dr. Matjaž Hriberšek
doc. dr. Jure Ravnik
Recenzenta: prof. dr. Leopold Škerget
prof. dr. Boris Štok
Stavila: avtorja z L^AT_EXom
Založba: založništvo Fakultete za strojništvo, Maribor
Naslovnica: delci v toku tekočine v kanalu z razširitvijo, [13]
Naklada: tisk po naročilu
Cena: 12,00€
Leto izdaje: 2012

Brez pisnega dovoljenja avtorja in založnika reproduciranje, distribuiranje, javna priobčitev, prevajanje v druge jezike ali predelava tega avtorskega dela in njegovih delov v kakršnem koli obsegu ali postopku, vključno s fotokopiranjem, tiskanjem ali shranjevanjem v elektronski obliki ni dovoljeno!

CIP - Kataložni zapis o publikaciji
Univerzitetna knjižnica Maribor

519.61/.64:004.42(075.8)

HRIBERŠEK Matjaž
Numerično modeliranje in računalniške simulacije
1.del: Gradniki numeričnega računanja
Matjaž Hriberšek, Jure Ravnik. - Maribor :
Fakulteta za strojništvo, 2012

ISBN 978-961-248-346-3

1. Ravnik, Jure

COBISS.SI-ID 70327041

Kazalo

1	Numerične metode in računalniške simulacije v inženirstvu	3
1.1	Uvod	3
1.2	Metode reševanja inženirskih modelov	4
1.3	Numerično reševanje – numerika	5
1.4	Napake pri numeričnem računanju	7
1.4.1	Predstavitev števil v računalniku	7
1.4.2	Zaokrožanje števil	9
1.5	Uporabljena programska oprema	9
2	Reševanje sistemov linearnih enačb	11
2.1	Direktne metode	12
2.2	Gaussova eliminacijska metoda	13
2.3	Gaussova eliminacijska metoda z LU-razcepom	15
2.3.1	Povečanje natančnosti rešitve sistema enačb	16
2.4	Zmanjšanje porabe računalniškega spomina za shranjevanje matrik	17
2.4.1	Indirektno naslavljanje (adresiranje) sistemskih matrik	17
2.4.2	Uporaba posrednega naslavljanja pri zapisu sistemskih matrik	18
2.5	Iterativne metode reševanja sistemov linearnih enačb	19
2.5.1	Klasične iterativne metode	20
2.5.1.1	Jacobijeva iteracija	20
2.5.1.2	Gauss-Seidlova iteracija	21

2.5.1.3	SOR-iteracija	22
2.5.2	Zaustavitveni kriterij	22
2.5.3	Iterativne metode Krylovega podprostora	24
2.5.4	Osnove metode konjugiranih gradientov	25
2.5.5	Metoda generaliziranega minimalnega residuuma – GMRES	26
2.5.6	Pospešitev konvergence iterativnih metod	30
2.5.7	Nepopolna trikotizacija matrik (ILU)	31
2.5.7.1	Nepopolna trikotizacija sistemske matrike s pomočjo posrednega naslavljanja	33
2.6	Večmrežna (Multigrid) metoda	35
2.6.1	Osnove dvomrežne metode	36
2.6.2	Večmrežna metoda	39
2.6.3	Glajenje napak	40
2.6.3.1	Jacobijeva iteracija	41
2.6.3.2	Gauss-Seidlova iteracija	42
2.6.3.3	Metode Krylovega podprostora	42
2.6.3.4	Nepopolna dekompozicija – ILU	42
2.6.4	Prolongacija: preslikava vrednosti iz redke v gosto ra- čunsko mrežo	43
2.6.5	Restrikcija: preslikava vrednosti iz goste v redko ra- čunsko mrežo	44
2.6.6	Konstrukcija sistemske matrike redke mreže	45
2.6.7	Polna večmrežna metoda	46
2.7	Scilab – iterativni izračun rešitve sistema linearnih enačb . .	47
2.7.1	Uvod	47
2.7.2	Naloga	47
2.7.3	Rešitev	47
3	Reševanje nelinearnih enačb	53
3.1	Metode iskanja rešitev nelinearne enačbe	53
3.1.1	Navadna iteracijska metoda	53
3.1.2	Newtonova metoda (Newton-Raphsen)	55
3.1.3	Sekantna metoda	57
3.2	Reševanje sistemov nelinearnih enačb	57
3.2.1	Predstavitev problema	58
3.2.2	Natančna in aproksimativna Newtonova iteracijska me- toda	60

3.2.3	Zagotovitev globalne konvergence aproksimativne Newtonove metode	61
3.2.3.1	Linijska zasledovalna tehnika	61
3.2.4	Metode Krylovega podprostora in Newtonova iteracija	62
3.2.4.1	Primer: prisilna konvekcija toplote v kanalu .	64
3.3	Scilab – iterativni izračun rešitve nelinearne enačbe	65
3.3.1	Uvod	65
3.3.2	Naloga	65
3.3.3	Rešitev	65
4	Lastne vrednosti	69
4.1	Uvod	69
4.2	Polinomska metoda	70
4.3	Potenčna metoda	70
4.4	Scilab – algoritem za iterativni izračun lastnih vrednosti . . .	71
4.4.1	Uvod	71
4.4.2	Naloga	71
4.4.3	Rešitev	72
5	Interpolacija funkcij	75
5.1	Uvod	75
5.2	Direktna polinomska interpolacija	77
5.3	Lagrangeeva interpolacija	77
5.4	Newtonova interpolacija	80
5.5	Interpolacija funkcij več spremenljivk	82
5.5.1	Direktna polinomska interpolacija funkcij več spremen- ljivk	83
5.5.2	Zaporedna interpolacija po posameznih spremenljivkah	83
5.6	Scilab – algoritem za interpolacijo funkcij	84
5.6.1	Uvod	84
5.6.2	Naloga	84
5.6.3	Rešitev	85
6	Numerično odvajanje	87
6.1	Uvod	87
6.2	Odvajanje Newtonovih formul	87
6.3	Enostavne diferenčne formule	88
6.4	Odvajanje funkcij v metodi končnih volumnov in končnih ele- mentov	89
6.5	Scilab – algoritem za izračun odvoda funkcije	89

6.5.1	Naloga	89
6.5.2	Rešitev	90
7	Aproksimacija niza podatkov	93
7.1	Uvod	93
7.2	Metoda najmanjših kvadratov	94
7.3	Scilab – aproksimacija funkcije z metodo najmanjših kvadratov	96
7.3.1	Naloga	96
7.3.2	Rešitev	96
8	Numerična integracija	101
8.1	Uvod	101
8.2	Pravokotna formula	102
8.3	Newton-Cotesova integracija	103
8.3.1	Trapezna formula ($m = 1$)	105
8.3.2	Simpsonovo pravilo ($m = 2$)	106
8.4	Gaussova integracija	107
8.5	Scilab – algoritem za izračun določenega integrala	108
8.5.1	Uvod	108
8.5.1.1	Trapezna shema	108
8.5.1.2	Simpsonova shema	108
8.5.1.3	Gaussov algoritem	109
8.5.2	Naloga	109
8.5.3	Rešitev	111
9	Numerično reševanje navadnih diferencialnih enačb – začetni problemi	115
9.1	Uvod	115
9.2	Začetni problemi	115
9.2.1	Enokoračne metode	116
9.2.2	Večkoračne metode	118
9.3	Scilab – začetni problem pri navadni diferencialni enačbi . . .	119
9.3.1	Uvod	119
9.3.2	Naloga	119
9.3.3	Rešitev	120
10	Numerično reševanje navadnih diferencialnih enačb – robni problemi	123
10.1	Uvod	123
10.2	Robni problemi 2. reda	124

10.3	Metoda utežnih ostankov	124
10.3.1	Kolokacijska metoda	127
10.3.2	Galerkinova metoda	128
10.3.3	Podobmočna metoda	129
10.4	Linearna diferencialna enačba 2. reda	129
10.5	Diferenčna metoda – metoda končnih razlik	135
10.5.1	Izpeljava metode končnih razlik	136
10.5.2	Prvi odvodi	137
10.5.3	Drugi odvodi in mešani odvodi	139
10.5.4	Višjeredne aproksimacije	140
10.5.5	Zapis prenosnih enačb z aproksimacijami končnih razlik	142
10.5.5.1	Enodimenzionalni problemi	142
10.5.6	Oblike končnih razlik za rob računskega območja . . .	144
10.5.7	Robni pogoji	146
10.5.8	Stabilnost metode končnih razlik – sovetrne aproksi- macije	149
10.6	Scilab – robni problem pri navadni diferencialni enačbi	152
10.6.1	Difuzijsko-konvektivna enačba	152
10.6.2	Rešitev	152
10.6.3	Enačba nihanja	157
10.6.4	Rešitev	157
11	Numerično reševanje parcialnih diferencialnih enačb	161
11.1	Uvod	161
11.2	Aproksimacija krajevnih odvodov z metodo končnih razlik . .	161
11.2.1	Aproksimacija Laplaceovega operatorja s končnimi raz- likami	162
11.2.2	Zapis prenosnih enačb z aproksimacijami končnih raz- lik – dvodimenzionalni problem	163
11.3	Diskretizacija časovnih odvodov	168
11.3.1	Eksplicitna shema	169
11.3.2	Implicitna shema	172
11.3.3	Prednosti in slabosti časovnih shem	175
11.4	Scilab – prenos toplote z metodo končnih razlik	176
11.4.1	Prevod toplote v homogeni steni	176
11.4.2	Naloga	176
11.4.3	Rešitev	177
11.4.4	Prevod toplote v nehomogeni steni	179
11.4.5	Naloga	180
11.4.6	Rešitev	180

12 Priloga: Scilab – orodje za numerično računanje	185
12.1 Uvod	185
12.2 Osnove Scilaba	185
Stvarno kazalo	191
Literatura	195

Predgovor

Sodobna družba postavlja modernega inženirja pred vse zahtevnejšo nalogo vse hitrejšega razvoja novih ali izboljšav obstoječih izdelkov in procesov. Tradicionalne metode razvoja, ki temeljijo predvsem na tehniki preizkušanja in analitično-empiričnih računskih metodah, vse bolj nadomešča uporaba računalniških simulacijskih orodij. Slednja omogočajo časovno simulacijo obnašanja izbranega sistema v prostorski geometriji. Računalniška simulacijska orodja v strojništvu temeljijo na znanju mehanike trdnin in tekočin ter termodinamike. Da bi sodobni inženir lahko izkoristil potencial modernih simulacijskih orodij, mora najprej dobro razumeti fizikalno dogajanje, ki določa obravnavani problem. To je nujno, saj računalniška simulacijska orodja vsebujejo vse številnejše zapletene fizikalne modele. Prav tako postajajo na osnovi različnih računskih postopkov vedno zmogljivejša. Sodobni inženir mora tako imeti tudi dobro osnovno znanje iz numeričnih metod, ki so osnova računalniških simulacijskih orodij, da bi jih lahko učinkovito uporabil.

S tem učbenikom sva želela študentkam in študentom podati osnovna znanja iz numeričnih metod, ki so temelj računalniške implementacije fizikalnih modelov. Prvi del učbenika je namenjen razlagi osnovnih gradnikov numeričnega računanja, drugi del pa njihovi uporabi pri numeričnem reševanju diferencialnih enačb, s katerimi opišemo večino fizikalnih dogajanj v tehniških sistemih. Učbenik vsebuje razlago že uveljavljenih numeričnih postopkov, na določenih mestih pa je dopolnjen z nekaterimi novejšimi numeričnimi postopki, ki so v zadnjih letih postali uveljavljen del najzmogljivejših računalniških simulacijskih orodij. Da bi premostila vrzel v razumevanju

prehoda iz preprostega računanja z uporabo računal do računske izvedbe postopkov v kompleksnih računalniških simulacijskih orodjih, sva v učbenik vključila tudi primere preprostih računalniških algoritmov za računsko izvedbo numeričnih postopkov. Za programsko osnovo sva izbrala odprtodni programski paket Scilab, ki ga poleg odprtosti odlikuje tudi preprostost uporabe. Študentke in študenti imajo tako možnost, da na osnovi neposredne izkušnje s takšnim orodjem izboljšajo razumevanje delovanja numeričnih postopkov in da to znanje nadgradijo z uporabo ter kombinacijo postopkov pri reševanju zahtevnejših problemov na vseh področjih strojništva.

Učbenik je prvenstveno namenjen študiju v okviru predmeta *numerično modeliranje in računalniške simulacije* na magistrskem študijskem programu (2. stopnja) Strojništvo, seveda pa ga priporoča tudi študentom drugih tehniških študijskih programov.

Morebitne napake in predloge izboljšav podanega gradiva bova z veseljem odpravila in sprejela ter jih po svojih močeh skušala upoštevati.

Maribor, september 2012

Avtorja

Numerične metode in računalniške simulacije v inženirstvu

1.1 Uvod

Računalniško modeliranje v uporabnih znanostih je danes osnova, na kateri je grajenih večina dosežkov modernega inženirstva. Pri tem je pomembno opozoriti na bistveno razliko med pojmom znanost in inženirstvo oziroma tehniške znanosti, ki jo je podal Von Karman in se glasi:

Znanost proučuje, kar je, inženirstvo ustvarja, česar še ni!

Da bi bil inženir pri svojih stvaritvah uspešen, je moral najprej obvladati kvalitativen pristop k problemu, torej izdelavo zamisli, nato pa je sledil še drugi del procesa ustvarjanja, in sicer uporaba računskih metod, ki so mu dajale kvantitativne odgovore na njegova vprašanja. Šele uspešna povezava obeh pristopov je lahko in še vedno lahko vodi k uspešni novi stvaritvi. Da bi inženir lahko dobil kvantitativne odgovore, je moral uporabiti določene matematične modele, ki so kar najboljše opisovali obravnavani fizikalni problem. Rešitev tega modela z računskimi metodami pa je dala končni rezultat – številke, ki jih je moral biti inženir sposoben pravilno interpretirati. Širše področje mehanike zavzema v sklopu uporabnih znanosti še posebej pomembno mesto, saj pod njeno okrilje uvrščamo mehaniko trdnin, mehaniko tekočin, termodinamiko, prenos toplote in snovi, pa tudi elektromagnetiko, tok plazme itd.

Stvarno kazalo

- Aproksimacija, 4
 - Niza podatkov, 94
 - Sovetrna (upwind), 142
- CFL-število, 175
- Courant-Friedrichs-Levy število, 175
- Crank-Nicolsonova shema, 169, 173
- Diferenčna metoda
 - metoda končnih razlik, 135
- Diferenčne formule, 88
- Diferencialne enačbe
 - Difuzijsko-konvektivna, 149, 152
 - Linearna diferencialna enačba 2. reda, 129
 - Navadne, 7, 10, 115
 - Parcialne, 7, 80, 123, 124, 126
- Diracova delta funkcija, 127, 128
- Direktna polinomska interpolacija, 77
- Dvomrežna metoda, 36
- EksPLICITNA shema, 168, 169, 175
- Enačba nihanja, 157
- Eulerjeva metoda
 - Desna, 169
 - Enokoračna, 116
 - Izboljšana, 118
 - Leva, 169
 - Modificirana, 118
- Galerkinova metoda, 24, 128
 - Generalizirana, 125
- Gauss-Seidlova iteracija, 21
- Gaussov divergenčni teorem, 89
- Gaussova Eliminacijska metoda, 13
- Gaussova eliminacijska metoda z LU-razcepom, 15
- Gaussova integracija, 107
- Glajenje napak, 37, 40
- GMRES, 24, 26
- ILU – nepopolna dekompozicija, 31
- Implicitna shema, 168, 172
- Indirektno naslavljanje sistemskih matrik, 17
- Integracija, 7, 101
 - Gaussova, 107, 109
 - Newton-Cotesova, 103
 - Pravokotna formula, 102
 - Simpsonovo pravilo, 104, 106, 108
 - Trapezna formula, 104, 108
- Interpolacija

- Direktna polinomska, 77
 Funkcij več spremenljivk, 82
 Funkcije, 6, 75
 Lagrangeeva, 77
 Linearna, 43
 Newtonova, 80
- Iteracija
 Gauss-Seidlova, 21
 Jacobijeva, 20
 Picardova, 58
 SOR, 20, 22
- Iterativne metode, 17, 19
 Klasične, 20
 Krylovega podprostora, 24
- Jacobijeva iteracija, 20
- Kolokacijska metoda, 127
- Konvergenca, 21
 Kriterij, 23
 Pogoj, 22
 Pospešitev, 30
 Prag, 23, 24
- Korekcija z redko mrežo, 37
- Lagrangeeva interpolacija, 77
- Laplaceov operator, 125, 143, 162
- Lastne vrednosti, 69
- Linijska zasledovalna tehnika, 61
- Metoda
 Enokoračna, 116
 Galerkinova, 127
 Generaliziranega minimalnega re-
 siduuma, 26
 GMRES, 26
 Kolokacijska, 127
 Končnih razlik, 24, 135
 Konjugiranih gradientov, 24, 25
 Krylovega podprostora, 19, 24,
 62
- Milne-Simpsonova, 119
- Multigrid, 35
- Najmanjših kvadratov, 94
- Newton-Raphsen, 55
- Newtonova iteracija, 62
- Podobmočna, 127
- Polinomska, 70
- Potenčna, 69, 70
- Runge-Kutta, 10, 168, 171
- Sekantna, 57
- Utežnih ostankov, 80, 124
- Variacijska, 124
- Večmrežna, 19, 35
- Milne-Simpsonova metoda, 119
- Multigrid (večmrežna) metoda, 35
- Napaka
 Absolutna, 23
 Relativna, 23
- Napake pri numeričnem računanju, 7
- Navadna iteracijska metoda, 53
- Navadne diferencialne enačbe, 7, 115
- Nelinearne enačbe, 53
 Nelinearna enačba, 53
 Newtonova iteracijska metoda, 60
 Newtonova metoda, 55
 Sekantna metoda, 57
 Sistemi nelinearnih enačb, 57
- Nepopolna dekompozicija (ILU), 31
- Newton-Cotesova integracija, 103
- Newtonova interpolacija, 80
- Newtonova metoda (Newton-Raphsen),
 55
- Nizi podatkov, 94
- Numerične napake, 7
- Odvajanje, 7
 Diferenčne formule, 88
 Newtonovih formul, 87
 Numerično, 87

-
- V metodi končnih volumnov, 89
 - Odvodi
 - Drugi in mešani, 139
 - Prvi, 136, 137
 - Parcialne diferencialne enačbe, 7, 80, 123, 124, 126
 - Picardova iteracija, 58
 - Plavajoča vejica, 8
 - Podobmočna metoda, 127
 - Polinomska metoda, 70
 - Posredno naslavljanje sistemskih matrik, 17
 - Potenčna metoda, 69, 70
 - Predpogojevanje, 30
 - Prenos toplote, 3
 - Prenosna enačba, 142
 - Prenosni pojav, 136
 - Prevod toplote, 129, 130, 176
 - Prolongacija, 38, 43

 - Restrikcija, 40, 44
 - Robni pogoj
 - Cauchyjev, 146, 148
 - Dirichletov, 142, 146, 147, 164
 - Neumannov, 146, 147
 - Robni problemi, 115, 123
 - Runge-Kutta, 168, 171

 - Scilab, 9, 185
 - Sekantna metoda, 57
 - Schema
 - Eksplcitna, 168, 169
 - Implicitna, 168, 172
 - Sistemska matrika, 12, 58, 144
 - SOR-iteracija, 20, 22
 - Sovetrna (upwind) shema, 142
 - Stabilnost metode končnih razlik, 149

 - Taylorjeva vrsta, 59, 116, 117, 135

Literatura

- [1] Hackbusch, W.: 'Iterative Lösung grosser schwachbesetzter Gleichungssysteme', Teubner Studienbücher, Mathematik, Stuttgart, 1991.
- [2] Hriberšek, M.: Iterativne metode v robno-območni integralski metodi za dinamiko tekočin. Doktorsko delo. Fakulteta za strojništvo, Univerza v Mariboru, 1995.
- [3] Ferziger, J. H., Perič, M.: Computational methods for fluid dynamics. Springer Verlag, 1997.
- [4] Van der Ploeg, A.: 'Preconditioning techniques for non-symmetric matrices with application to temperature calculations of cooled concrete', *Int.j.numer.methods eng.*, **35**, 1311–1328, 1992.
- [5] Hackbusch, W.: 'Multigrid methods and Applications', Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, Tokio, 1985.
- [6] Fletcher, R.: 'Conjugate gradient methods for indefinite systems', *Lecture Notes in Mathematics 506, Numerical Analysis (Ed. Watson, G.A.)*, 73–89, Springer Verlag, Berlin, 1976.
- [7] Sonneveld P., Wesseling P.: 'Multigrid and conjugate gradient methods as convergence acceleration techniques', *Multigrid methods for integral and differential equations*, 117–167, Claredon Press, Oxford, (1985).

-
- [8] Van der Vorst, H. A.: 'BiCGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems', *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **13**, 631–644, 1992.
- [9] Brussinno, G., Sonnad, V.: 'A comparison of direct and preconditioned iterative techniques for sparse, unsymmetric systems of linear equations', *Int.j.numer.methods eng.*, **28**, 801–815, 1989.
- [10] Saad, Y., Schultz, M. H.: 'GMRES: a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems', *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **7**, 856–869, 1986.
- [11] Hriberšek, M., Škerget, L.: Iterative methods in solving Navier-Stokes equations by the Boundary Element Method. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, **39**, 115–139, 1996.
- [12] Hriberšek, M., Škerget, L.: Fast boundary-domain integral algorithm for computation of incompressible fluid flow problems. *Int. J. Num. Meth. Fluids.* **31**, 891–907, 1999.
- [13] Ravnik, J., Škerget, L., Hriberšek, M., Žunič, Z.: Numerical simulation of dilute particle laden flows by wavelet BEM-FEM *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, **197**, 789–805, 2008.
- [14] Vidav, I.: Višja matematika. Ljubljana: DMFA – založništvo, 2008.
- [15] Saad, Y.: Iterative methods for sparse linear systems. 2nd Edition. Youcef Saad, 2000.
- [16] Bohte, Z.: Numerične metode, DMFA, Ljubljana, 1985.
- [17] Kreyszig, E.: Advanced Engineering Mathematics, 9th Edition. Wiley, 2006