

## ZASTOSOWANIE METOD NUMERYCZNEGO ODWRÓCENIA PRZEKSZTAŁCENIA LAPLACE'A W MODELOWANIU MATEMATYCZNYM WYBRANYCH PROCESÓW INŻYNIERII CHEMICZNEJ

### APPLICATION OF NUMERICAL LAPLACE INVERSION METHODS IN MATHEMATICAL MODELING OF SELECTED PROCESSES OF CHEMICAL ENGINEERING

**Małgorzata Wójcik**

Politechnika Rzeszowska im. Ignacego Łukasiewicza

Wydział Chemiczny

Katedra Inżynierii Chemicznej i Procesowej

al. Powstańców Warszawy 6

35-959 Rzeszów

e-mail: wojcik.m@aol.com

**Abstract:** The main aim of this work was a choice of a suitable numerical inversion method of Laplace transform to solving the model of gas flow through the measuring system for the determination of effective diffusion coefficient. In this paper, selected numerical Laplace inversion methods have been shown. These methods were implemented in the computer algebra system Maple®. Calculations have been made for a few tests of mathematical functions and the equation of heat conduction. The results allowed us to compare the accuracy of the calculations and speed of selected numerical inversion methods for Laplace transform. The Gaver-Stehfest method has proven the most effective to solving this problem.

**Key words:** Laplace transform, numerical Laplace inversion methods, Maple program.

#### Wprowadzenie

Przekształcenie Laplace'a jest jednym z najbardziej znanych przekształceń całkowych, które jest stosowane do rozwiązywania równań różniczkowych i całkowych. Wymienione przekształcenie całkowe jest również wykorzystywane w wielu zagadnieniach matematycznych, fizycznych i inżynierskich, np. do obliczania parametrów kinetycznych adsorpcji białek na powierzchni porów [1], do rozwiązywania równań dyfuzji ciepła [2].

Ogólna definicja przekształcenia Laplace'a jest określana jako przekształcenie, które funkcji  $f(t)$  zmiennej rzeczywistej  $t$  przyporządkowuje funkcję zespoloną  $F(s)$  zmiennej zespolonej  $s$  według wzoru:

$$\mathcal{L}\{f(t)\}=F(s)=\int_0^{\infty} f(t)e^{-st} dt \quad (1)$$

gdzie:

$s$  - liczba zespolona.

Całka, która występuje w powyższym wzorze jest określana całką Laplace'a, a funkcja  $e^{-st}$  jest jądrem tej całki.

Ważnym zagadnieniem obok kwestii wyznaczenia transformat  $F(s)$  dla znanych funkcji  $f(t)$  jest zagadnienie określenia funkcji  $f(t)$ , których transformaty  $F(s)$  są znane. Zagadnienie to sprowadza się do rozwiązania równania całkowego (1). Rozwiązanie tego równania jest określone poniższym wzorem Riemanna-Melina:

$$f(t) = \mathcal{L}^{-1}(F(s)) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-j\omega}^{\sigma+j\omega} F(s) \cdot e^{st} ds \quad (2)$$

a przekształcenie to jest nazywane odwrotnym przekształceniem Laplace'a. W praktyce bezpośrednio korzystanie ze wzoru (2) jest trudne. W celu ułatwienia wykonywania obliczeń są stosowane efektywne metody. Do wyznaczania odwrotnej transformaty Laplace'a dla prostych funkcji jest stosowana metoda oparta na wykorzystaniu tablic transformat Laplace'a. Odwrotna transformata Laplace'a dla złożonych funkcji jest obliczana za pomocą metody rozkładu analizowanej funkcji na ułamki proste, a następnie poprzez zastosowanie tablic transformat Laplace'a. Inna metoda polega na wyznaczeniu residuów dla danej funkcji.

Jeżeli wymienione metody analityczne nie pozwalają na szybkie i łatwe wykonywanie operacji odwrotnego przekształcenia Laplace'a dla analizowanej funkcji, to wówczas są stosowane metody numeryczne. Obecnie znanych jest ponad 100 metod numerycznego odwrócenia przekształcenia Laplace'a. Metody te można podzielić na cztery główne grupy:

1. oparte na rozwinięciu w szereg Fourier'a,
2. oparte na łączeniu funkcjonałów Gaver'a,
3. oparte na funkcjach Laguerre'a,
4. oparte na deformacji konturu całki Bromwich'a.

W pracy przedstawiono porównanie dokładności obliczeń i szybkości działania numerycznych metod odwrotnego przekształcenia Laplace'a. W tym celu wybrano metodę Gaver-Stehfest'a (kategoria metod opartych na łączeniu funkcjonałów Gaver'a) oraz metodę Dubner'a i Abate'a (metoda z grupy metod opartych na rozwinięciu w szereg Fourier'a).

Metoda Gaver-Stehfest'a jest szeroko stosowana w takich dziedzinach jak w geofizyce, matematyce, fizyce, chemii, inżynierii chemicznej. Metoda ta przybliża rozwiązanie do dziedziny rzeczywistej za pomocą wzoru (3):

$$f(t) = \frac{\ln 2}{t} \sum_{k=1}^N V_k \cdot F\left(k \frac{\ln 2}{t}\right) \quad (3)$$

Wyrażenie  $V_k$  jest współczynnikiem, który występuje w powyższym wzorze. Wartość tego współczynnika zależy od parametru  $N$ :

$$V_k = (-1)^{k+\frac{N}{2}} \frac{\sum_{j=\frac{k+1}{2}}^{\min\left(k, \frac{N}{2}\right)} j^{\frac{N}{2}} (2j)!}{\left(\frac{N}{2} - j\right)! j! (j-1)! (k-j)! (2j-k)!} \quad (4)$$

Parametr  $N$  jest liczbą wyrazów w szeregu i jest liczbą całkowitą. Liczba ta jest wybierana do obliczeń na podstawie prób i błędów. Teoretycznie, im większa wartość parametru  $N$ , to tym większa dokładność wyników obliczeń. W praktyce maksymalna wartość parametru  $N$  jest ograniczona przez błędy zaokrąglenia.

Obecnie znanych jest około 40 metod opartych na rozwinięciu w szereg Fourier'a. Po raz pierwszy, w 1968 roku metoda oparta na rozwinięciu w kosinusoidalny szereg Fourier'a została zastosowana przez Dubner'a i Abate'a do numerycznego odwrócenia przekształcenia Laplace'a. Podstawą działania tych metod jest całkowanie za pomocą reguły trapezów. Metody te przybliżają rozwiązanie za pomocą wyrażenia:

$$f(t) = \frac{e^{at}}{T} \left\{ \frac{1}{2} F(s) + \operatorname{Re} \sum_{k=1}^N F\left(a + \frac{k \cdot \pi \cdot i}{T}\right) \cdot (-1)^k \right\} \quad (5)$$

## Opis zagadnienia

W celu porównania dokładności i szybkości obliczeń wyżej wymienionych numerycznych metod odwrotnego przekształcenia Laplace'a, wykonano obliczenia dla testowych funkcji matematycznych oraz równania przewodnictwa ciepła. W tabeli 1 przedstawiono analizowane zależności matematyczne (1, 2, 3) oraz równanie przewodnictwa ciepła (5).

Wymienione funkcje testowe różnią się od siebie właściwościami. Funkcja nr 1 jest funkcją wykładniczą, funkcja nr 2 to funkcja okresowa. Funkcja nr 3 to funkcja hiperboliczna. Natomiast funkcja nr 4 jest rozwiązaniem równania przewodnictwa ciepła.

W obliczeniach uwzględniono następujące kryteria porównania dokładności wymienionych metod: maksymalny błąd względny, maksymalny błąd bezwzględny, odchylenie standardowe, czas obliczeń, łatwość zaimplementowania danej metody w programie Maple®.

Wszystkie obliczenia wykonano w programie algebry komputerowej Maple® z uwzględnieniem następujących parametrów:

- liczba cyfr znaczących: 48,
- różne wartości parametru  $N$  w zależności od testowanych funkcji.

Tabela 1. Testowane funkcje.

Nr funkcji	$F(s)$	$f(t)$
1	$\frac{1}{\sqrt{s+s}}$	$e^t \operatorname{erfc}(\sqrt{t})$
2	$\frac{1}{s^2+s}$	$\sin(t)$
3	$2 \ln \left( \frac{1}{2} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{1}{4} \cdot s\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4} \cdot s\right)} \right)$	$\frac{\tanh(t)}{t}$
4	$\frac{u_0 \left( 1 - \frac{he^{-x\sqrt{s}}}{\sqrt{s+h}} \right)}{s}$	$u_0 \operatorname{erf}\left(\frac{1}{2} \frac{x}{\sqrt{t}}\right) + \frac{u_0 \int_x^\infty e^{-h(\tau-x) - \frac{1}{4t}\tau^2} d\tau}{\sqrt{\pi}}$

W metodzie Gaver-Stehfest'a stwierdzono, że wartości maksymalnych błędów względnych i bezwzględnych oraz odchylenia standardowego maleją do pewnej wartości parametru  $N$ , a następnie rosną. Jest to spowodowane wzrastającym błędem zaokrążeń. Każda z

analizowanych funkcji posiada określoną wartość parametru  $N$ , dla której wartości maksymalnych błędów oraz odchylenia standardowego są najmniejsze. W tabeli 2 przedstawiono wyniki obliczeń dla testowych funkcji.

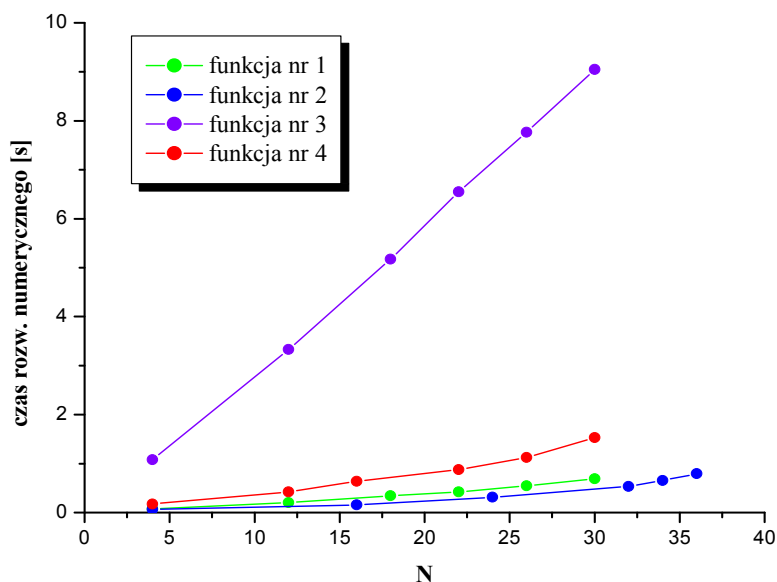
Tabela 2. Wyniki obliczeń dla testowych funkcji metodą Gaver-Stehfest'a.

Funkcja	$N$	Maksymalny błąd względny	Maksymalny błąd bezwzględny	Odchylenie standardowe
1	4	$1,984141 \cdot 10^{-4}$	$5,272716 \cdot 10^{-5}$	$4,173499 \cdot 10^{-5}$
	12	$2,819431 \cdot 10^{-11}$	$6,198540 \cdot 10^{-12}$	$4,401228 \cdot 10^{-12}$
	18	$1,800439 \cdot 10^{-16}$	$3,167639 \cdot 10^{-17}$	$2,045691 \cdot 10^{-17}$
	22	$1,175875 \cdot 10^{-19}$	$4,276368 \cdot 10^{-20}$	$1,297815 \cdot 10^{-20}$
	26	$1,759191 \cdot 10^{-14}$	$4,884954 \cdot 10^{-15}$	$1,564686 \cdot 10^{-15}$
	30	$4,964026 \cdot 10^{-9}$	$1,313477 \cdot 10^{-9}$	$3,514938 \cdot 10^{-10}$
2	4	3,414266	$9,752534 \cdot 10^{-1}$	$4,779113 \cdot 10^{-1}$
	16	$6,542851 \cdot 10^{-1}$	$9,146597 \cdot 10^{-2}$	$2,080989 \cdot 10^{-2}$
	24	$7,961035 \cdot 10^{-3}$	$9,127107 \cdot 10^{-4}$	$2,016189 \cdot 10^{-4}$
	32	$7,911394 \cdot 10^{-6}$	$9,227044 \cdot 10^{-7}$	$1,519174 \cdot 10^{-7}$
	34	$3,259853 \cdot 10^{-4}$	$5,014108 \cdot 10^{-5}$	$1,392767 \cdot 10^{-5}$
	36	$6,818276 \cdot 10^{-1}$	$2,523744 \cdot 10^{-2}$	$6,640372 \cdot 10^{-3}$
3	4	$7,877718 \cdot 10^{-3}$	$2,666026 \cdot 10^{-3}$	$1,259882 \cdot 10^{-3}$
	12	$2,599790 \cdot 10^{-6}$	$5,193588 \cdot 10^{-7}$	$2,598874 \cdot 10^{-7}$
	18	$4,751626 \cdot 10^{-9}$	$9,498926 \cdot 10^{-10}$	$4,552293 \cdot 10^{-10}$
	22	$8,639132 \cdot 10^{-11}$	$1,525881 \cdot 10^{-11}$	$7,674297 \cdot 10^{-12}$
	26	$6,294936 \cdot 10^{-8}$	$6,294936 \cdot 10^{-8}$	$8,902384 \cdot 10^{-9}$
	30	$1,972984 \cdot 10^{-2}$	$1,972984 \cdot 10^{-2}$	$2,790221 \cdot 10^{-3}$
4	4	$8,364796 \cdot 10^{-7}$	$2,555545 \cdot 10^{-4}$	$1,506251 \cdot 10^{-4}$
	12	$3,752819 \cdot 10^{-13}$	$1,129158 \cdot 10^{-10}$	$6,336843 \cdot 10^{-11}$
	16	$1,921984 \cdot 10^{-15}$	$5,727513 \cdot 10^{-13}$	$2,725131 \cdot 10^{-13}$
	22	$1,499708 \cdot 10^{-18}$	$4,469128 \cdot 10^{-16}$	$2,002887 \cdot 10^{-16}$
	26	$3,094536 \cdot 10^{-15}$	$9,286611 \cdot 10^{-13}$	$5,554152 \cdot 10^{-13}$
	30	$8,090189 \cdot 10^{-8}$	$2,434198 \cdot 10^{-7}$	$1,576573 \cdot 10^{-7}$

Dla zaznaczonych w tabeli 2 wartości parametru  $N$  otrzymuje się wyniki z minimalnymi wartościami błędów względnych i bezwzględnych. Błędy względne nie przekraczają 0,001%,

co świadczy o dużej dokładności otrzymanych wyników obliczeń.

Wzrost wartości parametru  $N$  powoduje wydłużenie czasu obliczeń dla każdej analizowanej funkcji, co ilustruje rys. 1.



Rys. 1. Zależność parametru  $N$  od czasu rozwiązania numerycznego dla analizowanych funkcji w metodzie Gaver-Stehfest'a.

Metoda Gaver-Stehfest'a charakteryzuje się nieskomplikowanymi równaniami, które łatwo można zaprogramować w programie Maple®. W metodzie Dubner'a i Abate'a stwierdzono, że wartości odchylenia standardowego oraz maksymalnego błędu względnego i bezwzględnego maleją ze wzrostem wartości parametru  $N$ , co przedstawiono w tabeli 3.

Jak wynika z rys. 2, wzrost wartości parametru  $N$  powoduje jednocześnie wydłużenie czasu obliczeń oraz zwiększenie dokładności otrzymania wyników.

W metodzie Dubner'a i Abate'a nie otrzymano optymalnej wartości parametru  $N$ . Powyżej  $N=1000$  zauważono, że wartości odchylenia standardowego oraz błędów nadal maleją. Ze względu na wydłużający się czas wykonywania obliczeń dla większych wartości parametru  $N$ ,

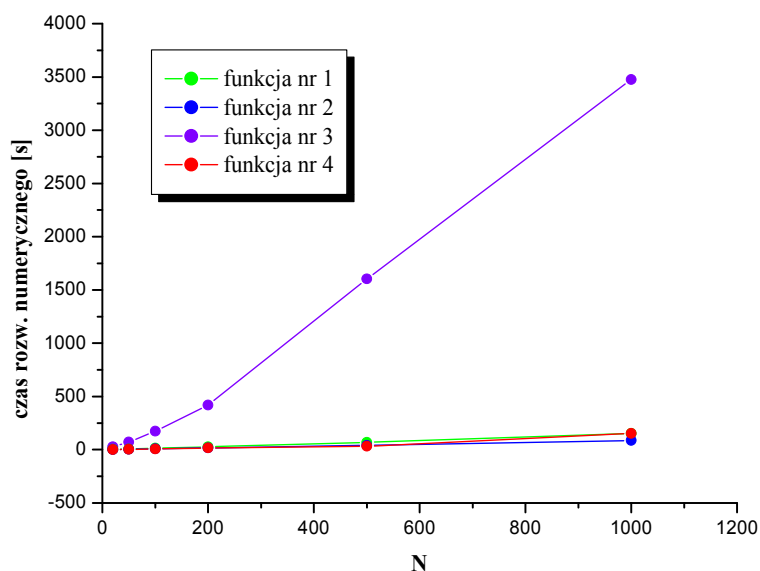
oraz na jednoczesne małe zmiany w dokładności otrzymania wyników (wartości maksymalnych błędów i odchylenia standardowego), obliczenia zostały zakończone dla tej wartości parametru. Metoda Dubner'a i Abate'a jest łatwa do zaprogramowania w programie Maple®.

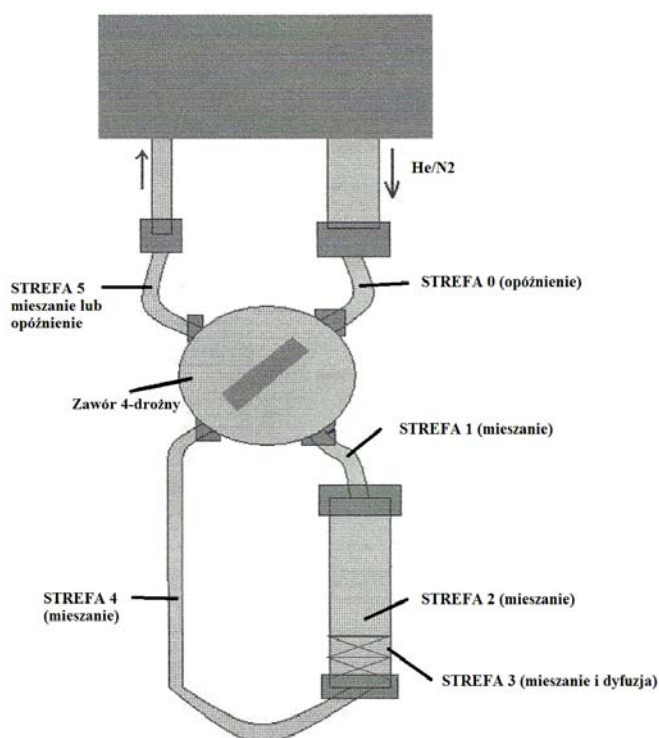
Na podstawie otrzymanych wyników stwierdzono, że metoda Gaver-Stehfest'a charakteryzuje się większą dokładnością obliczeń i szybkością działania niż metoda Dubner'a i Abate'a. Uwzględniając ten fakt, metodę Gaver-Stehfest'a wybrano do rozwiązania modelu przepływu gazu (azotu) przez układ do badania efektywnego współczynnika dyfuzji.

Na rys. 3 przedstawiono schemat analizowanego układu.

Tabela 3. Wyniki obliczeń dla testowych funkcji metodą Dubner'a i Abate'a.

Funkcja	$N$	Maksymalny błąd względny	Maksymalny błąd bezwzględny	Odchylenie standardowe
1	20	$1,959483 \cdot 10^{-1}$	$3,342441 \cdot 10^{-2}$	$3,136666 \cdot 10^{-2}$
	50	$1,921016 \cdot 10^{-1}$	$3,276825 \cdot 10^{-2}$	$2,832397 \cdot 10^{-2}$
	100	$3,099169 \cdot 10^{-2}$	$5,286491 \cdot 10^{-3}$	$4,298462 \cdot 10^{-3}$
	200	$1,244425 \cdot 10^{-2}$	$2,122711 \cdot 10^{-3}$	$1,657606 \cdot 10^{-3}$
	500	$3,514034 \cdot 10^{-3}$	$5,994159 \cdot 10^{-4}$	$4,511697 \cdot 10^{-4}$
	1000	$1,312236 \cdot 10^{-3}$	$2,238382 \cdot 10^{-4}$	$1,654521 \cdot 10^{-4}$
2	20	2,051187	$8,347594 \cdot 10^{-2}$	$4,414059 \cdot 10^{-2}$
	50	1,035758	$4,116137 \cdot 10^{-2}$	$2,329322 \cdot 10^{-2}$
	100	$9,683792 \cdot 10^{-2}$	$3,825545 \cdot 10^{-3}$	$2,206536 \cdot 10^{-3}$
	200	$2,488376 \cdot 10^{-2}$	$9,810767 \cdot 10^{-4}$	$5,688970 \cdot 10^{-4}$
	500	$4,064342 \cdot 10^{-3}$	$1,607689 \cdot 10^{-4}$	$9,281902 \cdot 10^{-5}$
	1000	$1,013989 \cdot 10^{-3}$	$3,995061 \cdot 10^{-5}$	$2,336865 \cdot 10^{-5}$
3	20	$4,030064 \cdot 10^{-1}$	$4,034098 \cdot 10^{-2}$	$2,441021 \cdot 10^{-2}$
	50	$1,278473 \cdot 10^{-1}$	$1,279753 \cdot 10^{-2}$	$9,852626 \cdot 10^{-3}$
	100	$8,996517 \cdot 10^{-3}$	$9,005522 \cdot 10^{-4}$	$8,785556 \cdot 10^{-4}$
	200	$2,268958 \cdot 10^{-3}$	$2,271229 \cdot 10^{-4}$	$2,259783 \cdot 10^{-4}$
	500	$3,681308 \cdot 10^{-4}$	$3,684992 \cdot 10^{-5}$	$3,675150 \cdot 10^{-5}$
	1000	$9,276333 \cdot 10^{-5}$	$1,027822 \cdot 10^{-5}$	$9,352589 \cdot 10^{-6}$
4	20	$1,550445 \cdot 10^{-2}$	4,620325	4,589949
	50	$8,945889 \cdot 10^{-3}$	2,665875	2,6580328
	100	$8,678942 \cdot 10^{-4}$	$2,591261 \cdot 10^{-1}$	$2,588977 \cdot 10^{-1}$
	200	$2,263022 \cdot 10^{-4}$	$6,776589 \cdot 10^{-2}$	$6,755412 \cdot 10^{-2}$
	500	$3,580709 \cdot 10^{-5}$	$1,067051 \cdot 10^{-2}$	$1,065688 \cdot 10^{-2}$
	1000	$1,027824 \cdot 10^{-5}$	$3,089357 \cdot 10^{-3}$	$3,075593 \cdot 10^{-3}$

Rys. 2. Zależność parametru  $N$  od czasu rozwiązania numerycznego dla analizowanych funkcji w metodzie Dubner'a i Abate'a.



Rys. 3. Schemat układu pomiarowego.

Układ pomiarowy charakteryzował się następującymi parametrami:  $p=1 \cdot 10^5$  Pa,  $T=308$  K,  $q=0,001$  dm<sup>3</sup>·min<sup>-1</sup>. W tabeli 4 przedstawiono wyniki obliczeń. Można zauważyć, że dla  $N=30$

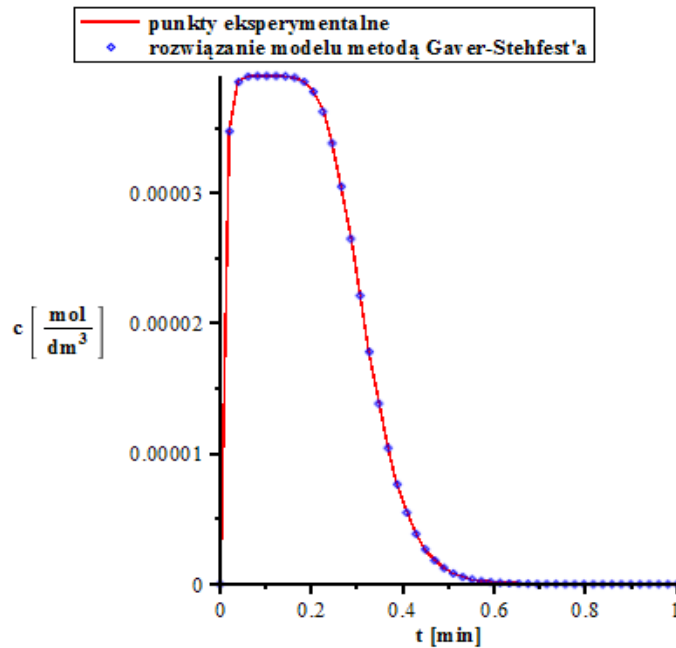
otrzymuje się wynik z maksymalnym błędem względnym wynoszącym 1,5% oraz odchyleniem standardowym  $7,5 \cdot 10^{-13}$ , co świadczy o dużej dokładności otrzymanego wyniku.

Tabela 4. Wyniki obliczeń.

$N$	Maksymalny błąd względny	Maksymalny błąd bezwzględny	Odchylenie standardowe	Czas rozw. numerycznego [s]
22	$8,747545 \cdot 10^{-1}$	$2,659120 \cdot 10^{-10}$	$1,236691 \cdot 10^{-10}$	0,422
24	$8,847634 \cdot 10^{-1}$	$7,947146 \cdot 10^{-11}$	$3,594448 \cdot 10^{-11}$	0,484
26	$1,221654 \cdot 10^{-1}$	$2,197914 \cdot 10^{-11}$	$1,022172 \cdot 10^{-11}$	0,500
28	$7,893169 \cdot 10^{-2}$	$5,938484 \cdot 10^{-12}$	$2,777782 \cdot 10^{-12}$	0,640
30	$1,542541 \cdot 10^{-2}$	$1,649136 \cdot 10^{-12}$	$7,531822 \cdot 10^{-13}$	0,719
32	$1,72221 \cdot 10^{-1}$	$1,720049 \cdot 10^{-11}$	$4,524742 \cdot 10^{-12}$	0,765
34	26,389328	$9,853475 \cdot 10^{-9}$	$3,135087 \cdot 10^{-9}$	0,907

Na rys. 4 można zaobserwować, że przebieg krzywej rozwiązania numerycznego metodą Gaver-Stehfest'a jest zgodny z przebiegiem krzywej eksperymentalnej. Wskazuje to, że

zaprezentowana metoda jest odpowiednia do rozwiązania modelu przepływu azotu przez układ do badania efektywnego współczynnika dyfuzji.



Rys. 4. Porównanie eksperymentalnych i numerycznych profili stężeń azotu dla układu pomiarowego.

### Podsumowanie

Na podstawie wyników pracy stwierdzono, że numeryczne metody odwrotnego przekształcenia Laplace'a charakteryzują się różną dokładnością obliczeń oraz szybkością działania. Zauważono, że metoda Gaver-Stehfest'a jest efektywniejsza pod względem oblicze-

niowym niż metoda Dubner'a i Abate'a. Metoda ta jest również szybsza. Z tego powodu Metoda Gaver-Stehfest'a została zastosowana do rozwiązania modelu przepływu gazu przez układ do badania efektywnego współczynnika dyfuzji. Otrzymane wyniki obliczeń wskazują, że wybrana metoda jest odpowiednia do rozwiązania tego zagadnienia.

### Literatura

1. Membrez, J., Infelta, P.P., Renken, A., Use of the Laplace transform technique for simple kinetic parameters evaluation. Application to the adsorption of a protein on porous beads, *Chemical Engineering Science*, 1996, 51, pp. 4489-4498.
2. Hassanzadeh, H., Poolad-Darvish, M., Comparison of different numerical Laplace inversion methods for engineering applications, *Applied Mathematics and Computation*, 2007, 189, pp. 1966-1981.