

ANALIZA DOKŁADNOŚCI OBLICZENIOWEJ WYBRANYCH METOD NUMERYCZNYCH WYZNACZANIA ODWROTNEJ TRANSFORMATY LAPLACE'A

ANALYSIS OF THE ACCURACY OF SELECTED NUMERICAL METHODS FOR THE INVERSION OF THE LAPLACE TRANSFORM

Małgorzata Wójcik

Mirosław Szukiewicz

Politechnika Rzeszowska im. Ignacego Łukasiewicza

Wydział Chemiczny

Katedra Inżynierii Chemicznej i Procesowej

al. Powstańców Warszawy 6

35-959 Rzeszów

e-mail: wojcik.mm@op.pl

e-mail: ichms@prz.edu.pl

Abstract: This paper presents an analysis in terms of their accuracy of selected numerical methods for the inversion of the Laplace transform. They were used to find solution of a gas flow model in real measuring system. The measurement unit, its application as well as its useful model were described in details in a work. We examined the Gaver-Stehfest method and the Honig and Hirdes method. The first one is based on combination of Gaver functionals. The second one is based on the Fourier series expansions. The results have confirmed the fact that the selected methods are suitable to solve analyzed problem, and showed that the algorithm developed by D. P. Gaver and H. Stehfest allows to obtain the best results of calculations. All calculations were using the computer algebra system Maple®. The presented algorithms have been implemented by the authors.

Keywords: Laplace transform, numerical methods for the inversion of the Laplace transform, the Gaver-Stehfest method, the Honig and Hirdes, program Maple®.

Wprowadzenie

W ciągu ostatnich kilkunastu lat, rozwój języków programowania oraz techniki przyczynił się do powstania nowych metod obliczeniowych, metod do numerycznego wyznaczania odwrotnej transformaty Laplace'a. Pierwsze opracowania dotyczące takich algorytmów powstały w latach sześćdziesiątych XX wieku. Za klasyczne monografie można uznać prace takich autorów, jak: Widder'a, Wynn'a, Piessens'a, Dubner'a i Abate'a, Durbin'a, Silverberg'a, Crump'a, Talbot'a. Metody te pozwalają na łatwe wykonanie przekształcenia funkcji zmiennej zespolonej $F(s)$ na funkcję czasu $f(t)$ dla analizowanych funkcji:

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

gdzie:

s - liczba zespolona.

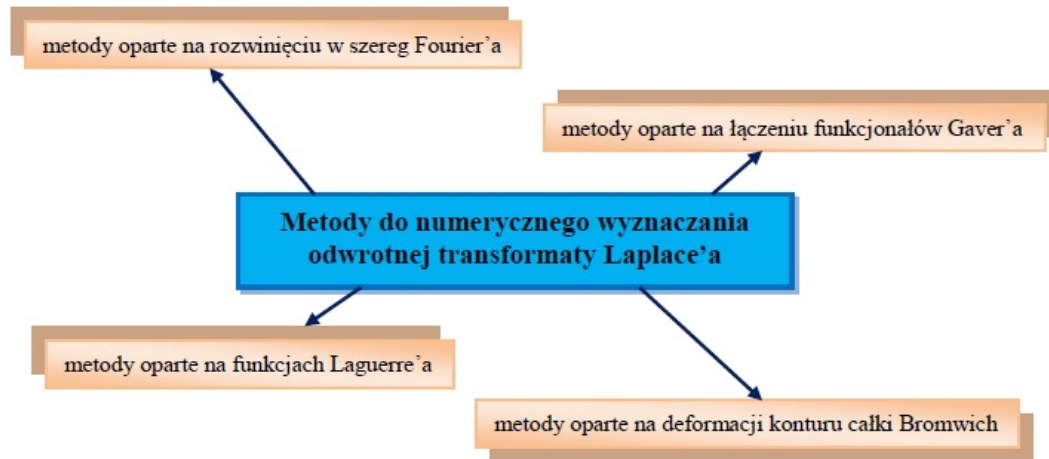
Metody do numerycznego obliczania odwrotnej transformaty Laplace'a znalazły szerokie zastosowanie do rozwiązywania zagadnień w wielu dziedzinach nauki, jak w matematyce, fizyce, chemii, ekonomii, inżynierii,

a także automatyce. Szczególnie chętnie są one wykorzystywane przy trudnościach w analitycznym wyznaczeniu oryginału ze wzoru Riemanna-Melina (1).

W wielu dostępnych publikacjach można znaleźć wiele informacji na temat charakterystyki oraz zastosowania metod do numerycznego wyznaczania odwrotnej transformaty Laplace'a, np. Davies i Martin w swojej pracy przedstawili szczegółowy przegląd metod [4], Wang i Zhan zaprezentowali algorytmy te jako efektywny sposób do rozwiązania zagadnień związanych z procesami przepływowymi w inżynierii [6], a Chiang przedstawił porównanie kilku metod do numerycznego wyznaczania odwrotnej transformaty Laplace'a do rozwiązywania zagadnień związanych z transportem wody powierzchniowej [3].

Obecnie, według dostępnych danych literaturowych jest opracowanych ponad 100 algorytmów do numerycznego obliczania odwrotnej transformaty Laplace'a.

Numeryczne metody zostały zakwalifikowane w cztery główne grupy przedstawione na rys. 1.



Rys. 1. Główne grupy metod numerycznych wg [1].

Na podstawie przeglądu literaturowego można stwierdzić, że nie ma określonej metody, która umożliwiłaby otrzymanie dobrych rezultatów we wszystkich, analizowanych przypadkach. W zależności od postaci obrazu funkcji jest stosowana odpowiednia metoda numeryczna znajdowania oryginału. W niniejszej pracy wykorzystano dwie takie metody tj. metodę Gaver-Stehfest'a (metoda z grupy metod opartych na łączeniu funkcjonalów Gaver'a) oraz metodę Honig'a i Hirdes'a (metoda z grupy metod opartych na rozwinięciu w szereg Fourier'a), które wydają się odpowiednie do zagadnień przepływu gazu.

Metoda Gaver-Stehfest'a została opracowana w latach 60-tych XX wieku przez dwóch uczonych D.P. Gaver'a i H. Stehfest'a. Do dnia dzisiejszego metoda ta jest najpopularniejszą metodą do numerycznego wyznaczenia odwrotnej transformaty Laplace'a, stosowaną do rozwiązywania różnorodnych zagadnień w matematyce, ekonomii, fizyce, chemii, geofizyce, inżynierii chemicznej m.in. do wyznaczania współczynników dyspersji radialnej [6]. Metoda ta przybliża rozwiązanie do dziedziny rzeczywistej za pomocą wzoru [5]:

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

W wyrażeniu (2) znajduje się współczynnik V_k , który można przedstawić w następujący sposób:

$$V_k = (-1)^{k+\frac{N}{2}} \frac{j^{\frac{N}{2}} (2j)!}{\sum_{j=\frac{k+\frac{N}{2}}{2}}^{\min(k, \frac{N}{2})} \left(\frac{N}{2} - j\right)! J!(j-1)!(k-j)!(2j-k)!} \quad (3)$$

Wartość tego współczynnika zależy od parametru N , który jest liczbą wyrazów w szeregu. Parametr ten jest liczbą całkowitą. Liczba ta jest wybierana do obliczeń metodą 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 [8]. Wielu badaczy przedstawia różne wartości parametru N , które pozwalają na otrzymanie dokładnych wyników obliczeń wymienionym algorytmem, np. Cheng i Sidauruk zaproponowali zakres wartości parametru N od 6 do 20 [2].

W 1984 roku G. Honig i U. Hirdes przedstawili metodę opartą na rozwinięciu w szereg Fourier'a do numerycznego obliczania odwrotnej transformaty Laplace'a. Od nazwisk tych uczonych została ona nazwana metodą Honig'a i Hirdes'a. Istotą działania tego algorytmu jest całkowanie za pomocą reguły trapezów. Metoda ta przybliża rozwiązanie do dziedziny rzeczywistej za pomocą wzoru (3):

$$f(t) = \frac{e^a}{t} \left[\frac{1}{2} F\left(\frac{a}{t}\right) \sum_{k=1}^N \operatorname{Re} \left\{ F\left(\frac{a}{t} + \frac{ik\pi}{t}\right) e^{\frac{ik\pi}{t}} \right\} \right] \quad (4)$$

dla $t \in \left[0, \frac{T}{2}\right]$, gdzie $T > 0$ i $a \in R$

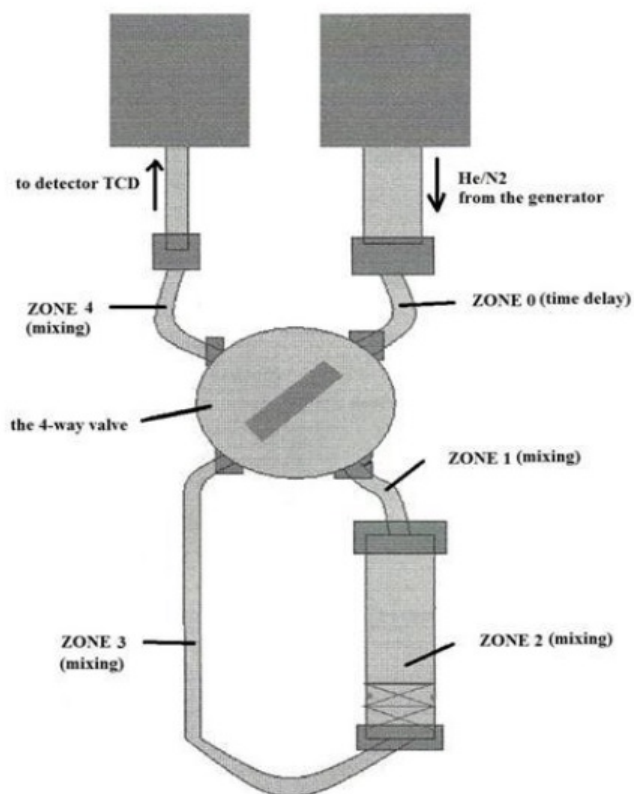
W wyrażeniach (1)-(4) symbolem F oznaczono funkcję zmiennej zespolonej, której oryginał jest poszukiwany.

Opis zagadnienia

Głównym celem niniejszej pracy było wykonanie analizy zaprezentowanych algorytmów pod względem ich dokładności obliczeniowej do rozwiązania modelu matematycznego procesu przepływu gazu. Szczegółowy opis modelu, procesu oraz układu pomiarowego znajduje się w pracy [7].

Na rys. 2 przedstawiono schemat układu pomiarowego.

W tabeli 1 przedstawiono opis procesu za pomocą układu równań różniczkowych zwyczajnych.



Rys. 2. Schemat układu pomiarowego.

Tabela 1. Bilans masowy procesu.

Strefa 0	$c_0(t) = c_{in}(t - t_d)$	(5)
Strefa 1	$V_{c1} \frac{dc_{1,1}}{dt} = q(c_0 - c_{1,1})$	(6)
	$V_{c1} \frac{dc_{1,k}}{dt} = q(c_{1,k-1} - c_{1,k}); \quad k = 2 \dots n1$	(7)
Strefa 2	$V_{c2} \frac{dc_{2,1}}{dt} = q(c_{1,n1} - c_{2,1})$	(8)
	$V_{c2} \frac{dc_{2,k}}{dt} = q(c_{2,k-1} - c_{2,k}); \quad k = 2 \dots n2$	(9)
Strefa 3	$V_{c3} \frac{dc_{3,1}}{dt} = q(c_{2,n2} - c_{3,1})$	(10)
	$V_{c3} \frac{dc_{3,k}}{dt} = q(c_{3,k-1} - c_{3,k}); \quad k = 2 \dots n3$	(11)
Strefa 4	$V_{c4} \frac{dc_{4,1}}{dt} = q(c_{3,n3} - c_{4,1})$	(12)
	$V_{c4} \frac{dc_{4,k}}{dt} = q(c_{4,k-1} - c_{4,k}); \quad k = 2 \dots n4$	(13)

Warunki początkowe określono w tabeli 2.

Tabela 2. Warunki początkowe.

Strefa 1	$c_{1,1}(0) = c_T; \quad c_{1,k}(0) = c_T; \quad k=1 \dots n1$	(14)
Strefa 2	$c_{2,1}(0) = c_T; \quad c_{2,k}(0) = c_T; \quad k=1 \dots n2$	(15)
Strefa 3	$c_{3,1}(0) = c_T; \quad c_{3,k}(0) = c_T; \quad k=1 \dots n3$	(16)
Strefa 4	$c_{4,1}(0) = c_T; \quad c_{4,k}(0) = c_T; \quad k=1 \dots n4$	(17)

Zastosowanie transformacji Laplace'a do analizowanego zagadnienia

Po wykonaniu transformacji Laplace'a na układzie równań (5-13) i wykorzystaniu warunków początkowych (14-17) otrzymano równanie (18):

$$c_{4,n4} = \frac{1}{s} \left[\left(\frac{q}{n4 \cdot V_{c4} \cdot s + q} \right)^{n4} \left(\frac{q}{n3 \cdot V_{c3} \cdot s + q} \right)^{n3} \cdot \left(\frac{q}{n2 \cdot V_{c2} \cdot s + q} \right)^{n2} \cdot c_{in} + \left(\frac{q}{n4 \cdot V_{c4} \cdot s + q} \right)^{n4} \cdot c_{in} \right] \cdot e^{t_d s} \quad (18)$$

gdzie:

s – zespolony parametr transformaty Laplace'a;

$c_{4,n4}$ – stężenie gazu na wylocie z układu [mol/dm³];

q – strumień gazu [dm³/min];

c_{in} – stężenie gazu na wejściu [mol/dm³];

V_{cn} – objętość n -tej celki [dm³];

$c_{j,k}$ – stężenie gazu w j -tej strefie, w k -tej celce [mol/dm³];

t – czas [min];

t_d – opóźnienie [min].

Rozwiązanie równania (18) wyznaczono w dziedzinie czasu przy zastosowaniu wybranych metod numerycznych.

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

- dokładność obliczeń, w programie Maple® liczba ta jest oznaczona jako zmienna systemowa Digits i określa liczbę cyfr znaczących, Digits = 38;

- liczby punktów: 70;

- przedział czasu: [0,1];

- różnych wartości parametru N .

Badania prowadzono w warunkach:

$p = 1 \cdot 10^5$ Pa;

$T = 308$ K;

$q = 1 \cdot 10^{-2}$ dm³·min⁻¹.

Liczbę celek w strefach układu pomiarowego określono następująco:

- strefa 1 (n1)= 1;

- strefa 2 (n2)= 12;

- strefa 3 (n3)= 1;

- strefa 4 (n4)= 1.

Sposób określenia odpowiedniej liczby celek w strefach został szczegółowo przedstawiony w pracy [7].

Wyniki obliczeń dotyczące zastosowania opisanych algorytmów do rozwiązania modelu matematycznego przedstawiono w tabelach 3–6 oraz na rys. 3.

Tabela 3. Wyniki obliczeń dla metody Gaver-Stehest'a.

t	Numeryczne rozwiązanie			Analityczne rozwiązanie
	$N=10$	$N=20$	$N=28$	
0.1	3.888317E-02	3.901654E-02	3.901244E-02	3.901085E-02
0.2	3.858486E-02	3.855351E-02	3.855128E-02	3.855342E-02
0.3	2.910324E-02	2.923100E-02	2.923734E-02	2.923104E-02
0.4	1.219744E-02	1.206493E-02	1.210067E-02	1.206477E-02
0.5	2.962068E-03	2.926946E-03	2.922149E-03	2.927181E-03
0.6	3.660138E-04	5.102861E-04	5.526687E-04	5.099350E-04
0.7	2.472003E-05	7.436487E-05	1.293120E-04	7.464655E-05
0.8	6.424272E-05	9.983652E-06	-1.399669E-04	1.011954E-05
0.9	7.341008E-05	1.628676E-06	3.697340E-04	1.334140E-06
1.0	4.275550E-05	3.009964E-07	4.319747E-05	1.744290E-07

Tabela 4. Wyniki obliczeń dla metody Gaver-Stehfest'a.

	$N=10$	$N=20$	$N=28$
Średni błąd bezwzględny	1.2767E-05	5.6914E-07	1.5954E-07
Czas obliczeń numerycznych [s]	0.437	0.860	1.859

Tabela 5. Wyniki obliczeń dla metody Honig'a i Hirdes'a.

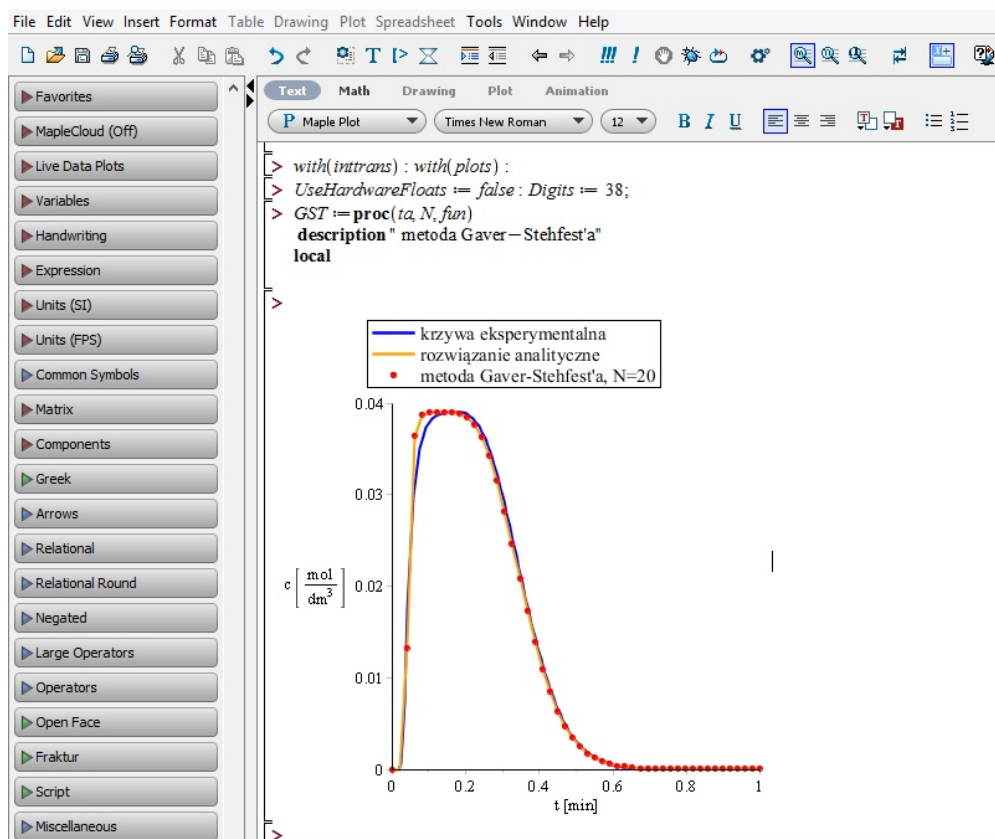
t	Numeryczne rozwiązanie			Analityczne rozwiązanie
	$N=50$	$N=100$	$N=1000$	
0.1	3.888229E-02	3.904528E-02	3.901063E-02	3.901085E-02
0.2	3.734580E-02	3.822860E-02	3.855240E-02	3.855342E-02
0.3	3.064861E-02	2.895701E-02	2.923670E-02	2.923104E-02
0.4	1.356640E-02	1.202497E-02	1.206775E-02	1.206477E-02
0.5	2.867651E-03	3.749772E-03	2.934783E-03	2.927181E-03
0.6	-8.871550E-04	1.035733E-03	5.028167E-04	5.099350E-04
0.7	-2.137642E-03	-1.053090E-04	7.472794E-05	7.464655E-05
0.8	-2.614766E-03	-7.578129E-04	-4.823726E-06	1.011954E-05
0.9	-2.792604E-03	-1.107535E-03	5.252302E-06	1.334140E-06
1.0	-2.826498E-03	-1.234039E-03	-2.392027E-06	1.744290E-07

Tabela 6. Wyniki obliczeń dla metody Honig'a i Hirdes'a.

	$N=50$	$N=100$	$N=1000$
Średni błąd bezwzględny	1.2855E-05	3.4429E-06	2.1174E-08
Czas obliczeń numerycznych [s]	33.016	61.937	676.265

Analizując otrzymane wyniki obliczeń, można zauważyć, że zaprezentowane algorytmy są odpowiednie do rozwiązania modelu procesu przepływu gazu. Obie metody charakteryzują się dużą dokładnością wyników obliczeń, co można zaobserwować na podstawie otrzymanych wartości średnich błędów bezwzględnych. W przypadku metody Gaver-Stehfest'a można zauważyć, że wartości średniego błędu bezwzględnego maleją do określonej wartości parametru N ($N=20$), a następnie rosną, co wynika ze wzrastającego błędu zaokrągleń. Dla tego optymalnego parametru N otrzymano minimalną

wartość średniego błędu względnego ($5.6914E-07$), a w metodzie Honig'a i Hirdes'a dopiero dla $N=1000$ ($2.1174E-08$). Zaletą metody Gaver-Stehfest'a był również krótszy czas obliczeń numerycznych. Dla najdokładniejszych obliczeń ($N=20$) algorytm ten był około sześćdziesięciokrotnie szybszy od metody Honig'a i Hirdes'a. Graficzna ilustracja wyników (rys. 3) potwierdza dobrą zgodność przebiegu krzywej eksperymentalnej z przebiegiem krzywej rozwiązania numerycznego algorytmem Gaver-Stehfest'a.



Rys. 3. Porównanie analitycznych, numerycznych i eksperymentalnych profili stężeń gazu dla układu pomiarowego. Program Maple®.

Podsumowanie

Na podstawie analizy otrzymanych wyników obliczeń stwierdzono, że przedstawione algorytmy są odpowiednie do rozwiązania modelu procesu przepływu gazu. Charakteryzują się one zbliżoną dokładnością wyników obliczeń, co potwierdzają otrzymane wartości średniego

błędu bezwzględnego. Pod względem czasu obliczeń numerycznych, metoda Gaver-Stehfest'a okazała się szybszym algorytmem obliczeniowym. Podsumowując, algorytm wykorzystujący funkcjonalny Gaver'a okazał się bardziej efektywnym algorytmem do rozwiązania zagadnienia.

Literatura

1. Abate, J., Valkó, P., Multi-precision Laplace transform inversion, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2004, 60, pp. 979-993.
2. Cheng, A. H-D., Sidauruk, P., Approximate Inversion of the Laplace Transform, *The Mathematical Journal*, 1994, 4, pp. 76-82.
3. Chiang Li-Wei, The Application of Numerical Laplace Inversion Methods to Groundwater Flow and Solute Transport Problems, New Mexico Institute of Mining and Technology, 1989.
4. Davies, B., Martin, B., Numerical Inversion of the Laplace transform: a survey and comparison of methods, *Journal of Computational Physics*, 1978, 33, pp. 1-32.
5. Egonmwan, A.O., The Numerical Inversion of the Laplace Transform: Gaver-Stehfest, Piessens, and Regularized Collocation methods, LAP LAMBERT Academic Publishing: Saarbrücken, Germany, 2012.
6. Wang, Q., Zhan, H., 2015. On different numerical inverse Laplace methods for solute transport problems, *Advances in Water Resources*, 2015, 75, pp. 80-92.
7. Wójcik, M., Szukiewicz, M., Kowalik, P., The application of the Laplace transform for modeling of gas flow using Maple®, *The Journal of Applied Computer Science Methods*, 2014, 6, pp. 43-53.
8. Zhang, J., Some innovative numerical approaches for pricing American options. University of Wollongong, Thesis Collection, 2007.