Meshless Method for Solving Coupled Nonlinear Reaction-Diffusion Equations Using Moving Kriging Approximation

Miss Kanittha Yimnak M.Sc. (Applied Statistics)

A Dissertation Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Doctor of Philosophy (Applied Mathematics)
Faculty of Science
King Mongkut's University of Technology Thonburi
2014

Dissertation Committee

.... Chairman of Dissertation Committee
(Asst. Prof. Surattana Sungnul, Ph.D.)

.... Member and Dissertation Advisor
(Asst. Prof. Anirut Luadsong, Ph.D.)

.... Member
(Asst. Prof. Sumlearng Chunrungsikul, Ph.D.)

.... Member
(Assoc. Prof. Settapat Chinviriyasit, Ph.D.)

Dissertation Title	Meshless Method for Solving Coupled Nonlinear Reaction-Diffusion Equations Using Moving Kriging Approximation
Dissertation Credits	36
Candidate	Miss Kanittha Yimnak
Dissertation Advisor	Asst. Prof. Dr. Anirut Luadsong
Program	Doctor of Philosophy
Field of Study	Applied Mathematics
Department	Mathematics
Faculty	Science
Academic Year	2014

ABSTRACT

In this research, the meshless local Pretrov-Galerkin method with the test function in view of the Heaviside step function is developed to solve the system of coupled nonlinear reaction-diffusion equations in two dimensional spaces subjected to Dirichlet and Neumann boundary conditions on a square domain. Two-field velocities are approximated by moving Kriging approximation for constructing nodal shape function that holds the Kronecker delta property, thereby enhancing the arrangement nodal shape construction accuracy while the Euler, Runge-Kutta and Crank-Nicolson methods are chosen for temporal discretization. For the Crank-Nicolson method, the nonlinear terms are treated iteratively within each time step. The developed formulation is verified in two numerical examples with investigations on the convergence and the accuracy of numerical results. The numerical experiments reveal the solutions using the developed formulation which are stable and more precise.

Keywords : Crank-Nicolson Method / Euler Method / Meshless Local Pretrov-Galerkin Method / Moving Kriging Approximation / Reaction-Diffusion Equations / Runge-Kutta Method

หัวข้อวิทยานิพนธ์ วิธีเมชเลสสำหรับการแก้ปัญหาสมการการแพร่ปฏิกิริยาเคมีที่ไม่เป็นเชิงเส้นแบบคู่โดยการใช้ตัวประมาณแบบมูฟวิ่งคริกกิง
หน่วยกิต 36
ผู้เขียน นางสาวกนิษฐา ยิ้มนาค
อาจารย์ที่ปรึกษา ผศ. ดร. อนิรุธ ลวดทรง
หลักสูตร ปรัชญาดุษฎีบัณฑิต
สาขาวิชา คณิตศาสตร์ประยุกต์
ภาควิชา คณิตศาสตร์
คณะ วิทยาศาสตร์
ปีการศึกษา 2557

บทคัดย่อ

วิทยานิพนธ์นี้นำเสนอการพัฒนาวิธีเมชเลสโลคัลพีทรอฟ-กาเลอคินกับการใช้ฟังก์ชันทดสอบแบบฟังก์ชันเฮฟวีไซด์เสต็ป เพื่อใช้ในการแก้ปัญหาสมการการแพร่ปฏิกิริยาที่ไม่เป็นเชิงเส้นแบบคู่ใน 2 มิติภายใต้เงื่อนไขขอบเขตแบบดีริเคล และนอยมันน์ ในโดเมนที่มีลักษณะเป็นแบบสี่เหลี่ยม สำหรับในขั้นตอนการสร้างฟังก์ชันรูปร่างเพื่อประมาณค่าตัวแปรที่เกี่ยวกับความเร็วทั้งสองตัวแปรจะทำการประมาณค่าโดยวิธีมูฟวิ่งคริกกิง ทั้งนี้เนื่องจากวิธีมูฟวิ่งคริกกิงมีคุณสมบัติฟังก์ชันเดลตาโครเนกเกอร์ ซึ่งคุณสมบัติดังกล่าวมีส่วนช่วยในการเพิ่มความแม่นยำในการประมาณค่าตัวแปรที่เกี่ยวกับความเร็วในส่วนของการประมาณค่าแบบไม่ต่อเนื่องเชิงเวลา ในวิทยานิพนธ์นี้จะประยุกต์ใช้ ทั้งวิธีออยเลอร์ วิธีรุงเงอ-คุททา และ วิธีแครงค์นิโคลสัน โดยสำหรับวิธีแครงค์นิโคลสันนี้จะคำนวณพจน์ของสมการที่ไม่เป็นเชิงเส้นด้วยวิธีทำซ้ำในแต่ละขั้นของเวลา และวิธีที่พัฒนาขึ้นนี้จะนำไปประยุกต์ใช้ในสองตัวอย่างเพื่อตรวจสอบการลู่เข้าและความถูกต้องของผลลัพธ์ในเชิงตัวเลข ซึ่งจากผลการทดลองแสดงให้เห็นว่าวิธีที่พัฒนาขึ้นมานี้มีความเสถียรและแม่นยำในการแก้ปัญหาดังกล่าว

คำสำคัญ : ตัวประมาณมูฟวิ่งคริกกิง / วิธีแครงค์นิโคลสัน / วิธีเมชเลสโลคัลพีทรอฟ-กาเลอคิน / วิธีรุงเงอ-คุททา / วิธีออยเลอร์ / สมการการแพร่ปฏิกิริยาเคมี

ACKNOWLEDGEMENTS

This dissertation has been completed because of suggestion from the a state-of-the-art technical computing language and numerical algorithms by Asst. Prof. Dr. Anirut Luadsong who is my advisor. I would like to express appreciation for his kindness. In addition, I would like to show my gratitude towards Asst. Prof. Surattana Sungnul, the chairman of the dissertation committee, who shared her valuable time with her thoughtful comments. I also would like to thank Asst. Prof. Dr. Sumlearng Chunrungsikul and Assoc. Prof. Dr. Settapat Chinviriyasit, who shared their time as my dissertation committee. Moreover, I would like to thank Dhurakij Pundit University for the scholarship and their financial support.

Finally, I would like to thank my family and friends in King Mongkut's University of Technology Thonburi, for encouragement.

CONTENTS

PAGE

PAGE

LIST OF TABLES

TABLE **PAGE**

LIST OF FIGURES

FIGURE **PAGE**

LIST OF FIGURES (Cont.)

FIGURE **PAGE**

LIST OF FIGURES (Cont.)

FIGURE **PAGE**

LIST OF TECHNICAL VOCABULARY AND ABBREVIATIONS

u, v	=	two-field velocities
$\mathbb{R}^2$	=	2-dimensional real space
D_1, D_2	=	the diffusion coefficients of the chemical species
δ	=	the Kronecker delta
$\phi(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{x})$	=	shape function and its vector form
Ω	=	problem domain, plate domain
Ω_s^i	=	local sub-domain
$\partial\Omega_s^i$	=	boundary of local sub-domain
Γ	=	boundary of domain
Γ_D	=	essential boundary
Γ_N	=	natural boundary
L_s^i	=	the part of boundary L_s which is inside the global domain
Γ_{sD}^i	=	the part of overlap between the boundary of the local sub-domain and the essential boundary
Γ_{sN}^i	=	the part of overlap between the boundary of the local sub-domain and the natural boundary
$\boldsymbol{n}$	=	the outward unit normal direction to the boundary $\partial\Omega$
A, B	=	functions of the field variable u and v
f_1, f_2	=	functions of prescribed sources
w	=	a Heaviside step
u^*	=	a fundamental solution
m	=	the order of monomial basis
N	=	the number of nodes
$p(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{P}(\boldsymbol{x})$	=	basis function and its vector form
$\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$	=	coefficients vector form by MKA method
$\gamma(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{r}(\boldsymbol{x})$	=	correlation Gaussian function and its vector form
$\boldsymbol{R}$	=	correlation matrix
r_{ij}	=	the distance between point of interest $\boldsymbol{x}$ and a node (x_i, y_i)
$a, \boldsymbol{a}$	=	coefficients and its vector form by RPIM method
$b, \boldsymbol{b}$	=	coefficients and its vector form by RPIM method
$R_i(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{R}_Q$	=	radial basis functions and its vector form by RPIM method
t	=	time variable
Δt	=	time-step
θ	=	correlation parameters
c	=	shape-parameter