



9. naloga

Spektralne metode za IVP PDE

Ma-Fi praktikum 2022/23



Parcialne Diferencialne Enačbe

- Danes bomo naše znanje o reševanju diferencialnih enačb z začetnimi pogoji razširili na reševanje **parcialnih** diferencialnih enačb, torej DE z odvodi po več parametrih.
 - Med te spadata **difuzijska enačba** in **valovna** enačba, zato si bomo zglede pogledali na takšnih primerih - npr. Schrödingerjeva enačba je po obliki difuzijska PDE! (doma vas tokrat čaka prevajanje toplote...).
 - Konkretnije si bomo pogledali kategorijo **spektralnih metod** na zaledu difuzijske enačbe- bolj klasični pristop nas čaka pri naslednji vaji.



Difuzijska enačba

- Naš današnji zgled za difuzijsko enačbo bo prevajanje toplote:
 - Temperaturno polje $T(x,t)$ v razsežni plasti s končno debelino a v smeri x je podano z difuzijsko formulo:
 - $q(x,t)$ je **gostota izvirov**, ostale količine so vam tudi znane...

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{q}{\rho c}, \quad 0 < x < a, \quad D = \frac{\lambda}{\rho c}.$$

- Ne gre pa pozabiti, da za specifično rešitev le-tega potrebujemo tudi ustrezne **začetne in robne pogoje**:

$$T(x, t = 0) = f(x)$$

$$T(x = 0, t) = g_0(t)$$

$$T(x = a, t) = g_1(t)$$

- kot splošni izraz za iskano funkcijo v receptih uporabimo $u(x,t)$ in formulo:
 - Lahko bi se še bolj potrudili in napisali formulo brezdimenzijsko....

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + Q$$

$$\begin{aligned} u(x, t = 0) &= f(x) \\ u(x = 0, t) &= g_0(t) \\ u(x = a, t) &= g_1(t) \end{aligned}$$



Difuzijska enačba

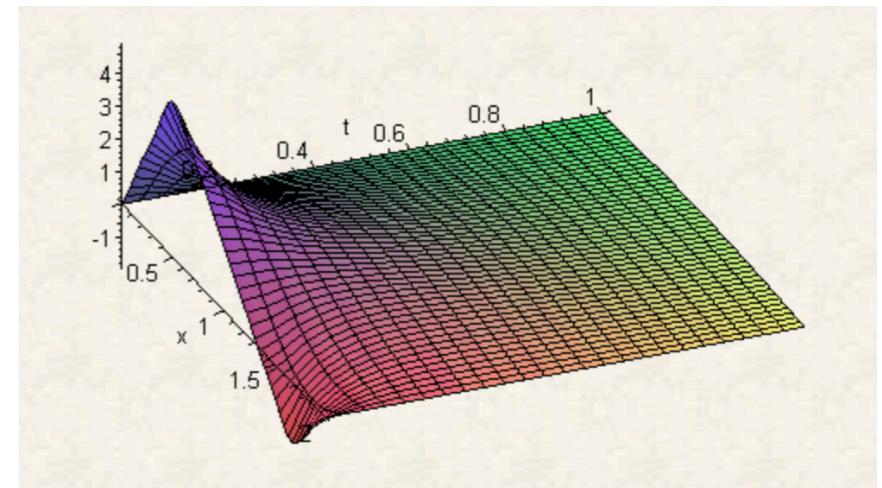
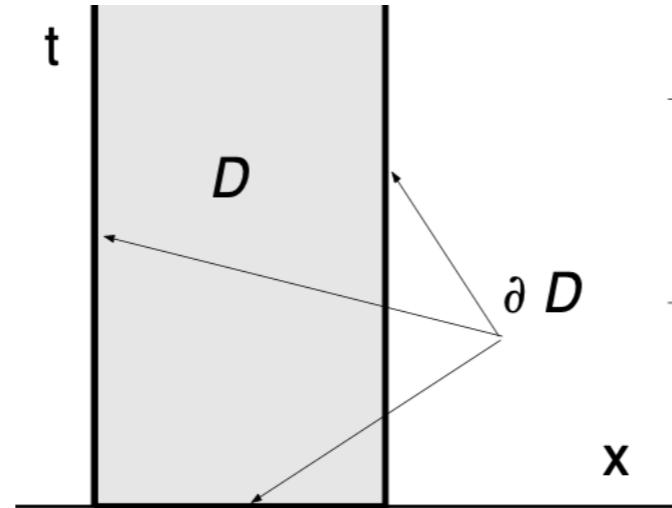
- Za poseben primer, ko v enačbi ni izvirov, torej gre za **čisto** difuzijo, velja pri reševanju tudi **MINMAX** princip:
 - Funkcija $u(x,t)$ doseže ekstremne vrednosti na robu definicijskega območja (torej ali na robovih ali ob začetnem času...).
 - Fizikalno** logično, če si predstavljamo nek začetni temperaturni profil...

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$u(x, t=0) = f(x)$$

$$u(x=0, t) = g_0(t)$$

$$u(x=a, t) = g_1(t)$$



- Če nas zanimajo ekstremi (minimum ali maksimum) torej moramo nujno preveriti vrednosti pri **začetnih in robnih pogojih!**
 - Če nas zanimajo samo le-te, nam sploh ni treba reševati PDE!



Spektralne metode

- Osnovna ideja spektralnih metod za reševanje PDE, kot je na primer difuzijska enačba:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + Q$$

izvori (opcionalno)

je po logiki analogna separaciji spremenljivk in zapisu z razvojem po lastnih funkcijah, kot ga dobimo npr. pri Schrödingerjevi enačbi:

$$u(x, t) = \sum_{k=1}^{\infty} c_k(t) \varphi_k(x)$$
$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x)$$

- Ker imamo opravka z numeričnimi metodami, bo seveda naša vsota **končna**:

$$u(x, t) = \sum_{k=1}^M c_k(t) \varphi_k(x)$$

- Naknadno si bomo tudi morali nastaviti **diskretno mrežo točk v x in t!**
- Seveda morajo dani nastavki zadovoljiti tako **začetnim** kot tudi **robnim** pogojem!



Spektralne metode

$$u(x, t) = \sum_{k=1}^M c_k(t) \varphi_k(x)$$

- Očitno je smiselno, da imajo funkcije $\varphi_k(x)$ nekaj koristnih lastnosti, kot so:
 - So **linearno neodvisne**,
 - odlično, če tvorijo ortogonalno bazo glede na nek dobro definiran skalarni produkt (**takoj lahko pomislimo na (D)FT ...**).
 - Imamo **dovolj gradnikov, da funkcijo poljubno natančno opišemo** (**alternativna ‘definicija’ baze**)
 - **Ustrezano robnim pogojem** ‘avtomatsko’ (**lastne funkcije danega problema**...).
- V naši metodi imamo pravzaprav **dve možnosti**:
 - Vsaka funkcija $\varphi_k(x)$ **neodvisno** izpolnjuje robne pogoje.
 - Pogosto v literaturi **formalna predpostavka za spektralne metode**...
 - **Superpozicija** funkcij $\varphi_k(x)$ v $u(x, t)$ izpolnjuje robne pogoje.
 - Uporabimo v primerih konstrukcije $\varphi_k(x)$ z **metodo končnih elementov** (Finite Element Method, FEM)
 - Pravzaprav se bomo danes naučili tudi pristop FEM...



Uporaba spektralne metode

- Za naš problem temperaturnega profila $T(x, t)$ uporabimo kar **končno Fourierovo vrsto** (našo končno vrsto iz DFT):

$$T(x, t) = \sum_{k=0}^{N-1} c_k(t) e^{-2\pi i f_k x}, \quad f_k = \frac{k}{a} \leftarrow \begin{array}{l} \text{izbor sicer ne} \\ \text{upošteva r.p. ...} \end{array}$$

- Ko to vstavimo v našo PDE, dobimo preprosto DE za koeficiente $c_k(t)$:

$$\frac{dc_k(t)}{dt} = D (-4\pi^2 f_k^2) c_k(t),$$

ki ga iz pedagoških razlogov lahko rešujemo numerično (npr Euler) in študiramo elemente, kot je numerična stabilnost, lahko pa tudi uporabimo očitno analitično rešitev:

$$c_k(t) = H_k e^{-4\pi^2 f_k^2 D t}$$

- Naš nastavek za začetni pogoj torej postane:

$$T(x, t = 0) = f(x) = \sum_{k=0}^{N-1} H_k e^{-2\pi i f_k x}$$

- Če vpeljemo še diskretno mrežo za koordinato x (drugače ne gre...):

$$T(x_n, t = 0) = f(x_n) = \sum_{k=0}^{N-1} H_k e^{-2\pi i f_k x_n}; \quad x_n = n\Delta = n \frac{a}{N}$$



Uporaba spektralne metode

- Očitno smo (namenoma) dobili DFT!

$$T(x_n, t = 0) = f(x_n) = \sum_{k=0}^{N-1} H_k e^{-2\pi i f_k x_n}; \quad x_n = n\Delta = n \frac{a}{N}$$

- Koeficiente H_k očitno dobimo kar z DFT (uporabi FFT!) začetnega pogoja!
 - Še več: te koeficiente nato propagiramo po času kot $c_k(t)$...
 - ... in ob izbranem času uporabimo inverzno DFT (FFT), pa dobimo našo rešitev $T(x_n, t_{(m)})$!
- Seveda ne smemo pozabiti na možne pojave, vezane na DFT, kot so potujevanje (aliasing), puščanje (leakage...)...
- Kaj pa robni pogoji ?
 - Seveda je dana oblika uporabna le za določene primere, kjer r.p. lahko zadovoljimo!
 - **Implicitna periodičnost** postane zdaj najlegantnejša lastnost DFT, saj nam to pove, da dani nastavek **avtomatično ustreza periodičnim r.p. !!!**
 - Izpolnimo lahko tudi npr **homogene Dirichletove r.p.** $T(x = 0, t) = T(x = a, t) = 0$
 - Izkoristimo lastnost, da gre liha funkcija lahko simetrično skozi izhodišče in naredimo **liho razširitev začetnega pogoja**.
 - Po potrebi uvedemo še premik funkcije za konstanto (preveri konsistenco med r.p. in z.p. !)

v DN Gauss

Neuman pa soda...



Uporaba spektralne metode

- V splošnem je potrebno (in formalno pravilno) za spektralne metode vnaprej uporabiti robne pogoje za določitev funkcij $\varphi_k(x)$:

- za primer Dirichletovih r.p. recimo lahko raje vzamemo:

$$T(x, t) = \sum_{k=1}^N c_k(t) \sin\left(\frac{k\pi x}{a}\right),$$

ki ima tudi vse željene ortogonalne relacije (moramo pa potem skalarne produkte sami sprogramirati, lahko poskusite za DN ...).

- Nekaj dodatnega materiala na to temo je na spletni učilnici ...



Metoda končnih elementov

- Za ilustracijo metode nam bo dovolj DE po enem parametru. Za ilustracijo vzemimo LDE z Dirichletovimi r.p. :

$$y'' + Q(x)y = R(x), \quad y(0) = y(1) = 0$$

- Naš nastavek je spet:

$$y(x) = \sum_{k=1}^M c_k \varphi_k(x),$$

kjer imajo funkcije $\varphi_k(x)$ prej predvidene lastnosti (izpolnijo r.p. , ‘baza’ funkcijskega prostora...).

- Ker imamo M prostih parametrov c_k , lahko **zahtevamo, da se DE točno reši v M kolokacijskih točkah - kolokacijski pogoj (pristop, metoda).**

Poleg r.p.!

$$\sum_{k=1}^M c_k (\varphi_k''(x_j) + Q(x_j)\varphi_k(x_j)) = R(x_j), \quad j = 1, \dots, M$$

- To lahko zapišemo tudi **vektorsko**:

$$A\vec{c} = \vec{r}$$

$$A_{jk} = \varphi_k''(x_j) + Q(x_j)\varphi_k(x_j)$$

$$r_j = R(x_j)$$



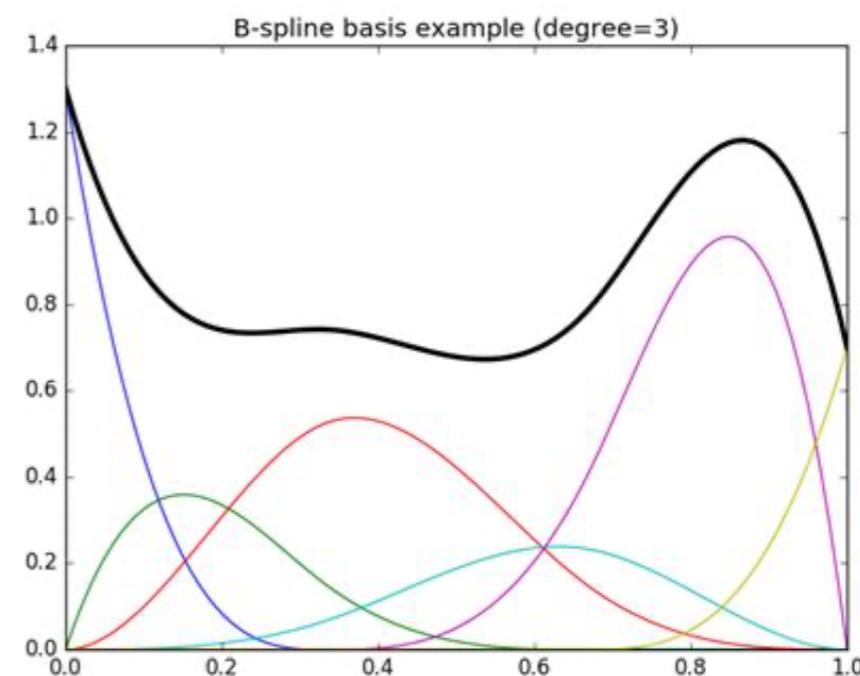
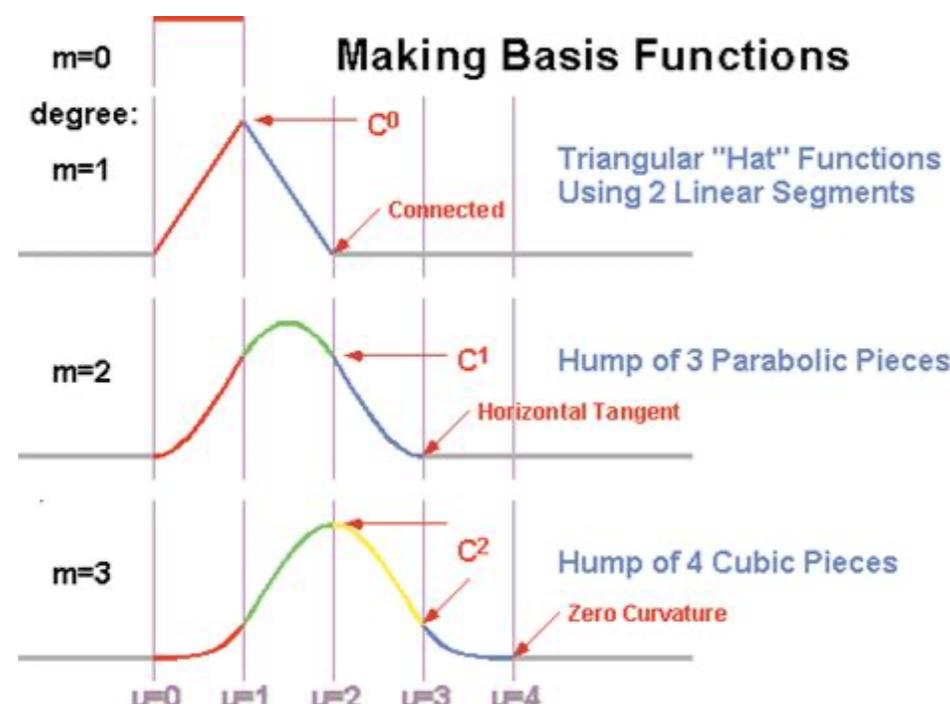
Metoda končnih elementov

$$A\vec{c} = \vec{r}$$

$$A_{jk} = \varphi_k''(x_j) + Q(x_j)\varphi_k(x_j)$$

$$r_j = R(x_j)$$

- Rešiti moramo torej zgornji matrični sistem....
- V splošnem je matrika A polna (kar je drago rešiti kot sistem..., reda **M³**).
 - Poceni bi bilo, če bi bila samo tridiagonalna ... (Thomasov alg., reda **M**).
 - Kar se da doseči, če so funkcije samo lokalno različne od nič.
 - Aplicira se koncept **preprostih, lokaliziranih funkcij** kot nabor končnih elementov.
- Ena najbolj pogostih izbir so kubični B-zlepki ('cubic B-splines'):

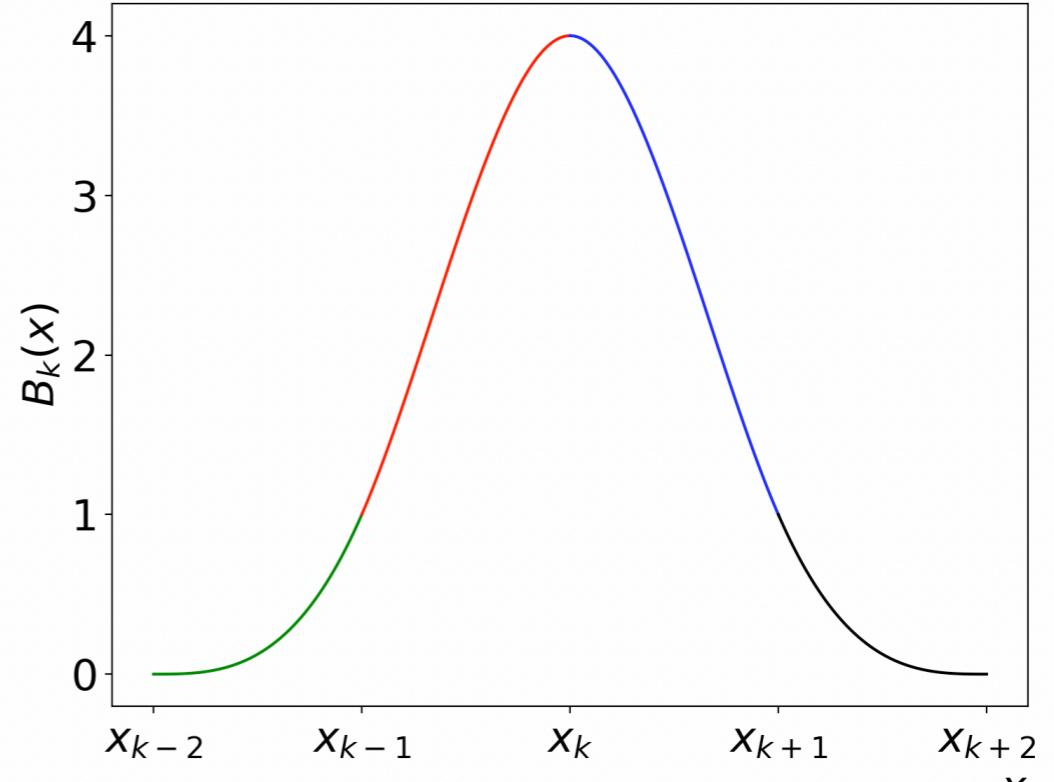




B-splines

- Obstaja več oblik parametrizacije kubičnega B-zlepka:

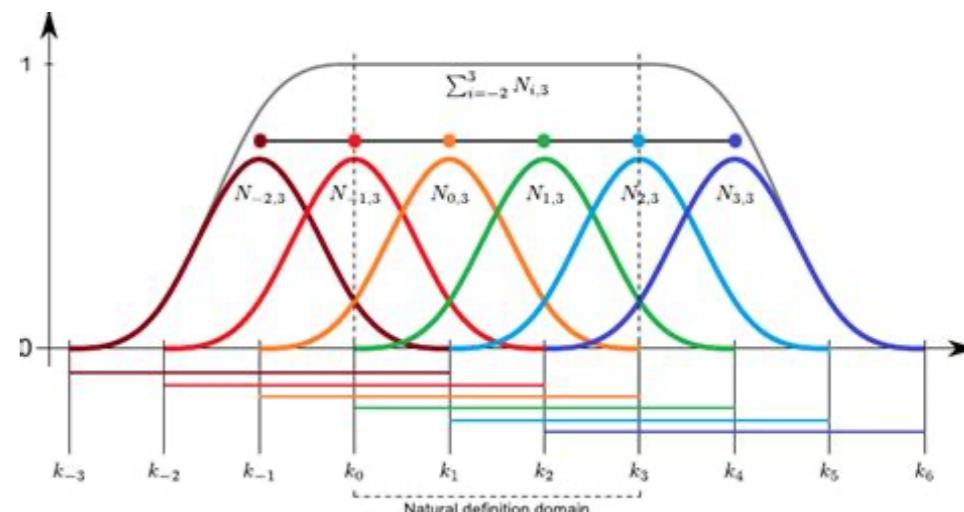
$$B_k(x) = \begin{cases} 0 & \text{če } x \leq x_{k-2} \\ \frac{1}{\Delta x^3}(x - x_{k-2})^3 & \text{če } x_{k-2} \leq x \leq x_{k-1} \\ +\frac{1}{\Delta x^3}(x - x_{k-2})^3 - \frac{4}{\Delta x^3}(x - x_{k-1})^3 & \text{če } x_{k-1} \leq x \leq x_k \\ +\frac{1}{\Delta x^3}(x_{k+2} - x)^3 - \frac{4}{\Delta x^3}(x_{k+1} - x)^3 & \text{če } x_k \leq x \leq x_{k+1} \\ \frac{1}{\Delta x^3}(x_{k+2} - x)^3 & \text{če } x_{k+1} \leq x \leq x_{k+2} \\ 0 & \text{če } x_{k+2} \leq x \end{cases}$$



$$B_j(x) = \begin{cases} \frac{(\Delta x_{j-2})^3}{4h^3}, & x_{j-2} \leq x \leq x_{j-1} \\ \frac{1}{4} + \frac{3\Delta x_{j-1}}{4h} \left[1 + \frac{\Delta x_{j-1}}{h} - \left(\frac{\Delta x_{j-1}}{h} \right)^2 \right], & x_{j-1} \leq x \leq x_j \\ \frac{1}{4} - \frac{3\Delta x_{j+1}}{4h} \left[1 - \frac{\Delta x_{j+1}}{h} - \left(\frac{\Delta x_{j+1}}{h} \right)^2 \right], & x_j \leq x \leq x_{j+1} \\ -\frac{(\Delta x_{j+2})^3}{4h^3}, & x_{j+1} \leq x \leq x_{j+2} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$B_{3,i}(x) = \frac{1}{6h^3} \begin{cases} (x - x_i)^3, & x \in [x_i, x_{i+1}], \\ h^3 + 3h^2(x - x_{i+1}) + 3h(x - x_{i+1})^2 - 3(x - x_{i+1})^3, & x \in [x_{i+1}, x_{i+2}], \\ h^3 + 3h^2(x_{i+3} - x) + 3h(x_{i+3} - x)^2 - 3(x_{i+3} - x)^3, & x \in [x_{i+2}, x_{i+3}], \\ (x_{i+4} - x)^3, & x \in [x_{i+3}, x_{i+4}], \end{cases}$$

Vse oblike so ekvivalentne (do konstante...!)

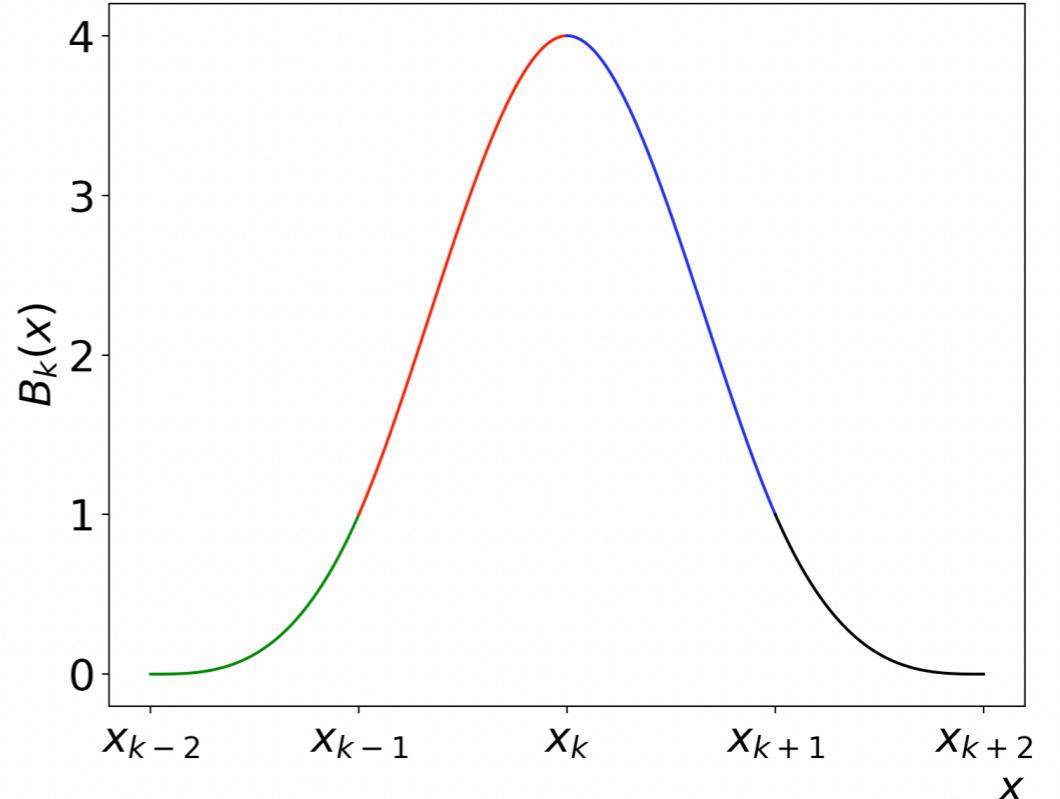




B-splines

- Obstaja več oblik parametrizacije kubičnega B-zlepka:

$$B_k(x) = \begin{cases} 0 & \text{če } x \leq x_{k-2} \\ \frac{1}{\Delta x^3}(x - x_{k-2})^3 & \text{če } x_{k-2} \leq x \leq x_{k-1} \\ +\frac{1}{\Delta x^3}(x - x_{k-2})^3 - \frac{4}{\Delta x^3}(x - x_{k-1})^3 & \text{če } x_{k-1} \leq x \leq x_k \\ +\frac{1}{\Delta x^3}(x_{k+2} - x)^3 - \frac{4}{\Delta x^3}(x_{k+1} - x)^3 & \text{če } x_k \leq x \leq x_{k+1} \\ \frac{1}{\Delta x^3}(x_{k+2} - x)^3 & \text{če } x_{k+1} \leq x \leq x_{k+2} \\ 0 & \text{če } x_{k+2} \leq x \end{cases}$$



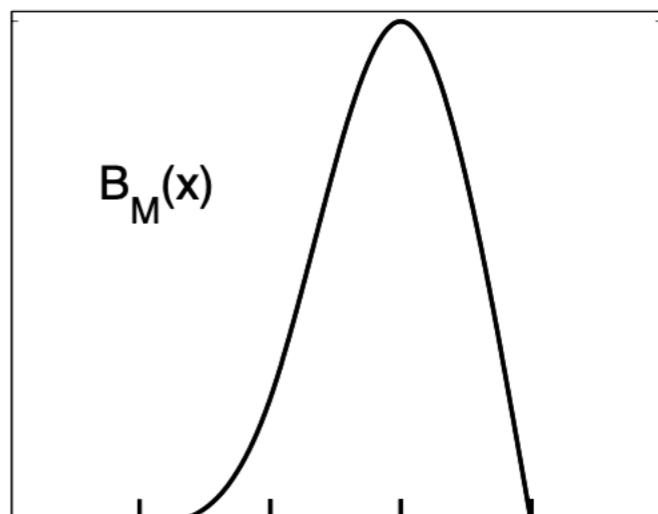
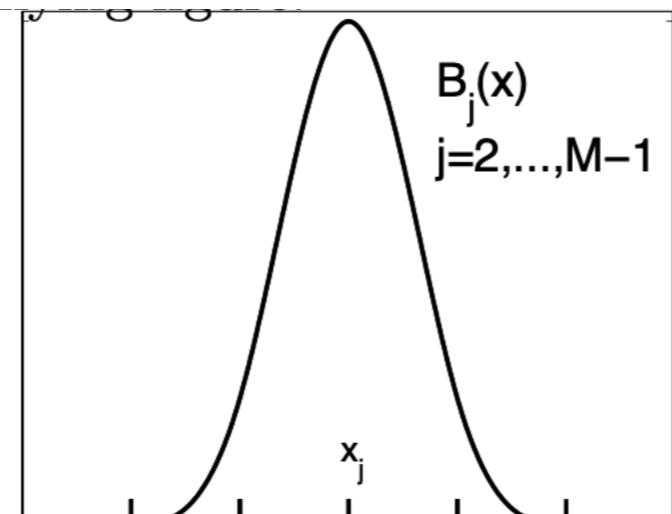
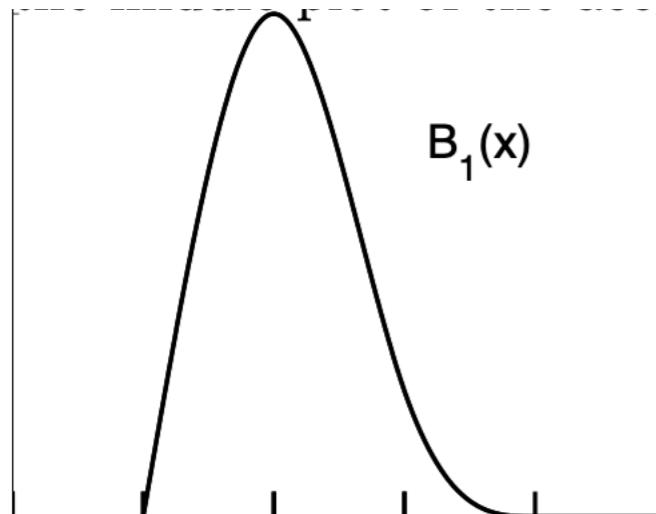
- Zapišimo vrednosti in odvode v posameznih točkah:

	x_{k-2}	x_{k-1}	x_k	x_{k+1}	x_{k+2}
$B_k(x)$	0	1	4	1	0
$B'_k(x)$	0	$\frac{3}{\Delta x}$	0	$-\frac{3}{\Delta x}$	0
$B''_k(x)$	0	$\frac{6}{\Delta x^2}$	$-\frac{12}{\Delta x^2}$	$\frac{6}{\Delta x}$	0



B-splines

- Obstajajo razne možnosti, kaj naredimo na robu območja, da zadostimo (različnim) robnim pogojem - posebni zlepki ipd...
 - Tipično imamo določeno vrednost ali odvod, torej nekaj (preveč) prostosti pri zlepkih



$$B_1(x) = \begin{cases} \frac{1}{2(4-3h)} \left[3(6-5h)\frac{\Delta x_0}{h} - 9(1-h) \left(\frac{\Delta x_0}{h}\right)^2 + \left(\frac{\Delta x_0}{h}\right)^3 \right], & x_0 \leq x \leq x_1 \\ \frac{1}{4} - \frac{3\Delta x_2}{4h} \left[1 - \frac{\Delta x_2}{h} - \left(\frac{\Delta x_2}{h}\right)^2 \right], & x_1 \leq x \leq x_2 \\ -\frac{(\Delta x_3)^3}{4h^3}, & x_2 \leq x \leq x_3 \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$



B-splines

- Obstajajo razne možnosti, kaj naredimo na robu območja, da zadostimo (različnim) robnim pogojem - posebni zlepki ipd...
 - Tipično imamo določeno vrednost ali odvod, torej nekaj (preveč) prostosti pri zlepkih

5.4: Cubic Splines-Boundary Conditions

We can define two extra boundary conditions. One has several alternatives:

Naša izbira
v tej nalogi...

↗ **Natural Spline**

$$s_0''(x_0) = 0 \text{ and } s_{m-1}''(x_m) = 0$$

End Slope Spline

$$s_0'(x_0) = y_0' \text{ and } s_{m-1}'(x_m) = y_m'$$

Periodic Spline

$$s_0'(x_0) = s_{m-1}'(x_m) \text{ and } s_0''(x_0) = s_{m-1}''(x_m)$$

Not-a-Knot Spline

$$s_0'''(x_1) = s_1'''(x_1) \text{ and } s_{m-2}'''(x_{m-1}) = s_{m-1}'''(x_{m-1})$$

We consider here natural splines.

MATLAB uses splines with a not-a-knot condition.



B-splines v PDE

- Uporabimo zdaj naše zlepke še v naši difuzijski PDE. Začnimo z nastavkom:

$$T(x, t) = \sum_{k=-1}^{N+1} c_k(t) B_k(x)$$

predpostavimo, da imamo
 $M=N+3$ kolokacijskih točk
($N+1$ 'notranjih' + 2 r.p.)

- Ko to vstavimo v našo PDE, dobimo $N+1$ enačb kot kolokacijski pogoj:

$$\sum_{k=-1}^{N+1} \dot{c}_k(t) B_k(x_j) = D \sum_{k=-1}^{N+1} c_k(t) B''_k(x_j), \quad x_j = \Delta x \cdot j, \quad j = 0, 1, \dots, N.$$

- Ker odvode in vrednosti B-zlepkov v točkah poznamo, dobimo:

$$\dot{c}_{j-1}(t) + 4\dot{c}_j(t) + \dot{c}_{j+1}(t) = \frac{6D}{\Delta x^2} (c_{j-1}(t) - 2c_j(t) + c_{j+1}(t)), \quad j = 0, \dots, N$$

- Dirichletovi robni pogoji nam skupaj dajo še dva pogoja:

$$c_{-1}(t) + 4c_0(t) + c_{+1}(t) = 0$$

$$c_{N-1}(t) + 4c_N(t) + c_{N+1}(t) = 0$$



B-splines v PDE

- Skupaj z naravnim pogojem za B-zlepke na robovih $B_k''(x = 0, a) = 0$ pa dobimo še:

$$c_{-1}(t) - 2c_0(t) + c_1(t) = 0$$

$$c_{N-1}(t) - 2c_N(t) + c_{N+1}(t) = 0$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \Big|_{x=0,a} = 0$$

- Iz prejšnje enačbe:

$$c_{-1}(t) + 4c_0(t) + c_1(t) = 0$$

$$c_{N-1}(t) + 4c_N(t) + c_{N+1}(t) = 0$$

- takoj vidimo, da velja:

$$c_0(t) = 0 \quad c_{-1}(t) = -c_1(t)$$

$$c_N(t) = 0 \quad c_{N+1}(t) = -c_{N-1}(t)$$

- S čemer smo naš sistem ustreznno poenostavili...



B-splines v PDE

- Za dokončno rešitev sistema zapišimo vse skupaj spet v vektorski obliki:

$$A \frac{d\vec{c}}{dt} = B\vec{c}$$

Tridiagonalni matriki A, B,
(N-1 dimenzij...)

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 1 & & & \\ 1 & 4 & 1 & & \\ & 1 & 4 & 1 & \\ & & \vdots & & \\ & & 1 & 4 & 1 & \\ & & & 1 & 4 & 1 & \\ & & & & 1 & 4 & \end{pmatrix}, \quad B = \frac{6D}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & 1 & -2 & 1 & \\ & & \vdots & & \\ & & 1 & -2 & 1 & \\ & & & 1 & -2 & 1 & \\ & & & & 1 & -2 & \end{pmatrix}$$

- Z začetnim pogojem pa dobimo tridiagonalen sistem za začetne vrednosti parametrov $\vec{c}(t = 0) = \vec{c}^0$:

$$A\vec{c}^0 = \vec{f}, \quad \vec{f} = (f(x_1), \dots, f(x_{N-1}))$$



B-splines v PDE

- Za dokončno rešitev sistema zapišimo vse skupaj spet v vektorski obliki:

$$A \frac{d\vec{c}}{dt} = B\vec{c}$$

$\vec{c} = (c_1(t), c_2(t), \dots, c_{N-1}(t))$

- Z začetnim pogojem pa dobimo tridiagonalen sistem za začetne vrednosti parametrov $\vec{c}(t=0) = \vec{c}^0$:

$$A\vec{c}^0 = \vec{f}, \quad \vec{f} = (f(x_1), \dots, f(x_{N-1}))$$

- Sistem lahko elegantno rešimo numerično, lahko kar z Eulerjem:

$$\vec{c}^{n+1} = \vec{c}^n + \Delta t A^{-1} B \vec{c}^n = (1 + \Delta t A^{-1} B) \vec{c}^n$$

časovni korak $\Delta t = t_{n+1} - t_n$

- ... še raje pa s stabilno implicitno metodo (implicitni Euler, tu matrično rešljiv):

$$\left(A - \frac{\Delta t}{2} B \right) \vec{c}^{n+1} = \left(A + \frac{\Delta t}{2} B \right) \vec{c}^n$$

Tridiagonalni sistem
zahtevnosti reda M !

Tudi Crank-Nicholson,
naslednji teden ...



Naloga

- **Naloga:**
- S Fourierovo spekralno metodo reši difuzijsko enačbo v eni razsežnosti $x \in [0, a]$:
 - z začetnim pogojem po plasti gaussovsko porazdeljene temperature:

$$T(x, 0) \propto e^{-(x-a/2)^2/\sigma^2}$$

(izberi razumne vrednosti za D, a in σ)

- Vzami:
 - periodični robni pogoje $T(0, t) = T(a, t)$,
 - homogeni Dirichletov robni pogoj $T(0, t) = T(a, t) = 0$
- Kolokacijsko (FEM) metodo uporabi ob zgornjem Gaussovem začetnem pogoju in homogenih Dirichletovih robnih pogojih $T(0, t) = T(a, t) = 0$ ter primerjaj obe metodi.
- **Dodatna naloga:** Izberi si še kakšen primer začetnih pogojev, recimo:

$$T(x, 0) = f(x) = \sin(\pi x/a)$$

in preizkusi obe metodi.