

Univerza v Ljubljani
Fakulteta za *matematiko in fiziko*



NALOGA 9: SPEKTRALNE METODE ZA ZAČETNE PROBLEME PDE

MATEMATIČNO-FIZIKALNI PRAKTIKUM

DIMITRIJE PEŠIĆ

VPISNA ŠTEVILKA: 28201072

PREDAVATELJ: PROF. DR. BORUT PAUL KERŠEVAN

LJUBLJANA, 21.12.2023

1 Uvod

Naloga je od nas zahtevala, da rešimo difuzijsko enačbo v eni razsežnosti $x \in [0, a]$ z začetnim pogojem po plasti gaussovske porazdeljene temperature

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

z uporabo Fourierove in kolokacijske metod na homogeniem Dirichletovem robnem pogoju $T(0, t) = T(a, t) = 0$, ter primerjati obe metodi.

Dodatna naloga je pa zahtevala izračun še kakšnega primera začetnih pogojev, jaz sem kar izbral

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

2 Ozadje

Za reševanje začetnih problemov s parcialnimi diferencialnimi enačbami (PDE) imamo na voljo dva obsežna razreda metod. Pri *diferenčnih metodah* na neki način aproksimiramo časovne in krajevne parcialne odvode s končnimi diferencami. Reševanje PDE nato prevedemo na reševanje algebrajskih enačb ali sistemov enačb za približne vrednosti funkcij, ki v teh diferencah nastopajo. Diferenčne metode spoznamo pri naslednji vaji. Pri tej vaji obravnavamo *spektralne metode*: pri njih iskano rešitev formalno izrazimo z nekim naborom funkcij, nato pa v času spremljamo koeficiente v takem razvoju. Kako se selimo med krajevno in časovno sliko problema, je odvisno od posamezne metode. Osnovne prijeme spoznamo ob Fourierovi metodi in metodi končnih elementov s kubičnimi B -zlepki (B -splines).

Fizikalno ozadje naj bo enorazsežna difuzijska enačba, ki opisuje na primer temperaturno polje $T(x, t)$ v homogeni neskončni plasti s končno debelino a brez virov toplote:

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

Temperaturo v poljubni točki x ob času t izrazimo s Fourierovo vrsto

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

kjer je $f_k = k/a$, torej

$$\sum_k \frac{\partial \tilde{T}_k(t)}{\partial t} e^{-2\pi i f_k x} = D \sum_k (-4\pi^2 f_k^2) \tilde{T}_k(t) e^{-2\pi i f_k x}.$$

Od tod sledi evolucijska enačba za Fourierove koeficiente

$$\frac{\partial \tilde{T}_k(t)}{\partial t} = D (-4\pi^2 f_k^2) \tilde{T}_k(t). \quad (1)$$

Pogosto uporabimo spektralno reprezentacijo za krajevni odvod, medtem ko časovni korak naredimo z neko eksplicitno integracijsko shemo, na primer kar po Eulerju

$$\tilde{T}_k(t+h) = \tilde{T}_k(t) + hD(-4\pi^2 f_k^2) \tilde{T}_k(t). \quad (2)$$

Reprezentacijo $T(x, t)$ v običajnem prostoru nato dobimo z obratno Fourierovo transformacijo.

Tu lahko v splošnem časovni korak izvedeš po Eulerju, v tem konkretnem primeru pa obstaja tudi enostavna analitična rešitev enačbe 1, ki jo lahko uporabiš za primerjavo. V numerični metodi tako

najprej izračunaj Fourierovo reprezentacijo $\tilde{T}_k(0)$ začetnega pogoja, nato pa jo po Eulerju evolviraj v času. Pri tem moraš paziti na stabilnost Eulerjeve diferenčne sheme: pri katerem koli koraku mora veljati

$$\left| \frac{\tilde{T}_k(t+h)}{\tilde{T}_k(t)} \right| = |1 + hD(-4\pi^2 f_k^2)| < 1.$$

Nekaj pozornosti zahteva tudi diskretizacija: za vsak k seveda velja $-f_{\text{Nyquist}} < f_k < f_{\text{Nyquist}}$ in s tem povezan možen pojav *aliasinga* (Kaj je že to?). Ta pojav lahko študiraš, če se spomniš, da obstaja analitična rešitev FT Gaussove funkcije (je spet Gaussova funkcija) - kaj se z le-to dogaja znotraj dovoljenega frekvenčnega intervala? Če izbereš veliko število točk, je seveda smiselno uporabiti kar algoritem FFT. Temperaturni profil $T_j(t) \equiv T(x, t)$ ob poljubnem času nato dobiš z inverzno FFT.

Pri razvoju $T(x, t)$ nismo omejeni na trigonometrične funkcije. Rešitev PDE na $0 \leq x \leq a$ lahko aproksimiramo tudi z drugačno vrsto funkcij, na primer kubičnimi B -zlepki,

$$T(x, t) = \sum_{k=-1}^{N+1} c_k(t) B_k(x), \quad (3)$$

kjer je $B_k(x)$ kubični zlepek s središčem okrog $x = x_k$. aastnosti B -zlepkov so navedene v dodatku. Tako zasnujemo *metodo končnih elementov*, s *kolokacijskim pogojem*, da naj se zlepek ujema z rešitvijo v določenih izbranih točkah. Podobno kot pri Fourierovi metodi tudi pri tej metodi zahtevamo, da razvoj (3) zadošča osnovni PDE in robnim pogojem. Razvoj (3) vstavimo v PDE in izvednotimo rezultat pri $x = x_j$. (Interval $[0, a]$ diskretiziramo na N podintervalov širine Δx s točkami $x_j = j\Delta x$, kjer je $j = 0, 1, \dots, N$. Za kolokacijo je smiselno izbrati enake točke kot za diskretno mrežo.) Tako dobimo

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

Upoštevamo lastnosti B -zlepkov in dobimo sistem diferencialnih enačb za koeficiente $c_j(t)$:

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

kjer je $j = 0, 1, \dots, N$. Iz robnega pogoja pri $x = 0$ ugotovimo $c_{-1} = -4c_0 - c_1$. Če dodamo še zahtevo za 'naravni' kubični zlepek, da je na robu $\sum_{k=-1}^{N+1} c_k(t) B_k''(x = (0, a)) = 0$, sledi $c_0 = c_N = 0$ in $c_{-1} = -c_1$ ter $c_{N-1} = -c_{N+1}$. Reševanje enačbe (3) smo torej prevedli na reševanje matričnega sistema

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

kjer je

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

in $\vec{c} = (c_1(t), c_2(t), \dots, c_{N-1}(t))^T$. Začetni pogoj za PDE je $T(x_j, 0) = f(x_j)$, torej je začetni približek za kolokacijsko aproksimacijo

$$A\vec{c}^0 = \vec{f},$$

kjer je $\vec{f} = (f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_{N-1}))^T$. To zdaj rešujemo s kako metodo, ki jo poznamo iz prejšnjih nalog, recimo z eksplicitno Eulerjevo metodo: ob zaporednih časih $n\Delta t$ dobimo

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

Ob poljubnem času nato dobimo temperaturni profil tako, da znova izračunamo vsoto (3). Ker nam je že znano, da je Eulerjeva ob predolgih časovnih korakih lahko nestabilna, lahko uporabimo stabilno implicitno metodo, kjer v vsakem časovnem koraku rešujemo

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

3 Analitična rešitev

Sprva se mi je zdelo smiselno implementirati analitično rešitev, za lažjo predstavo iskanih rezultatov ter referenčno funkcijo za primerjanje odstopanj.

Rešitev dobimo s separacijo spremenljivk, za izpeljavo sem se zgledoval po prilogi na spletni učilnici [2] ter seveda zapiskih predmeta Matematika IV [3] in sicer na straneh 7 in 8, kjer dobimo končno rešitev:

$$T(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \sin(n\pi x) e^{-n^2 \pi^2 D t}, \quad (4)$$

kjer so koeficienti B_n :

$$B_m = 2 \int_0^1 \sin(m\pi x) f(x) dx$$

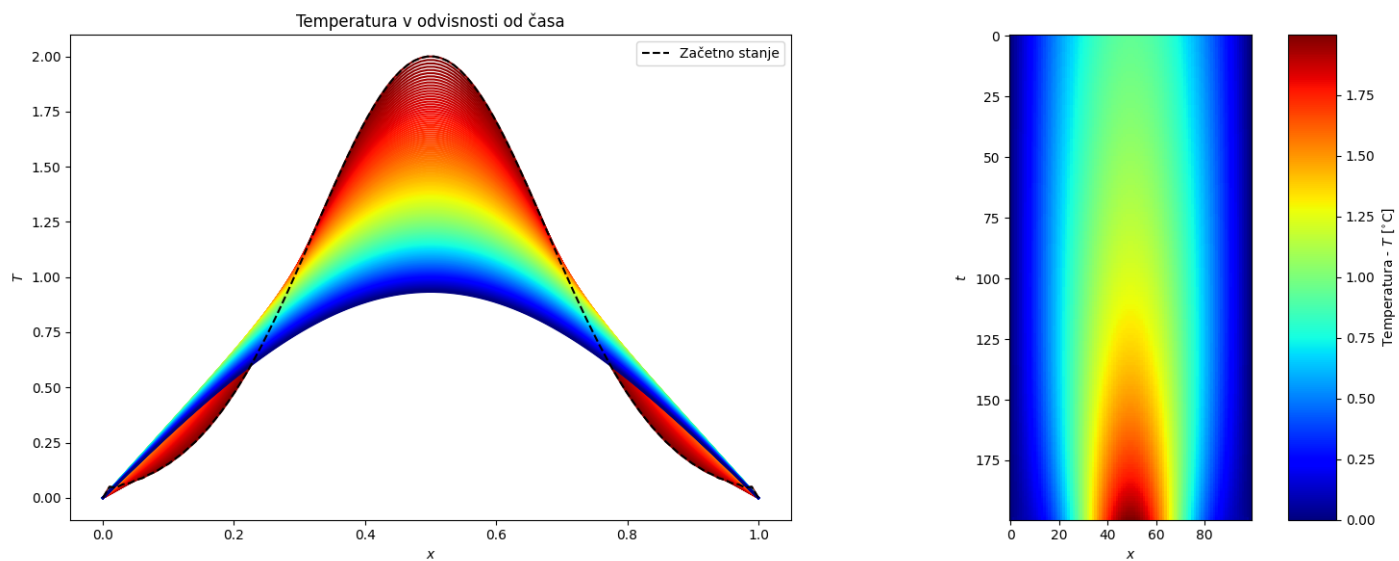
$$f(x) = T(x, 0). \quad (5)$$

Integral za koeficiente sem izračunal z vgrajeno funkcijo `scipy.integrate.quad`, ki izračuna določen integral.

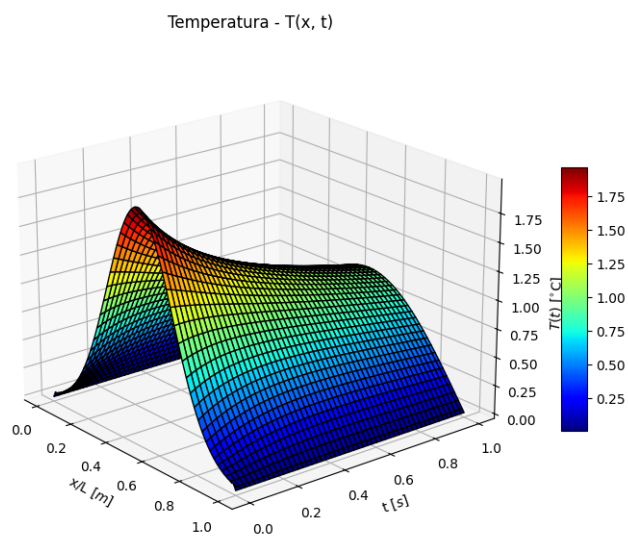
Za vse 3 implementacije sem uporabljal vrednosti za parametre $a = 1.0$, $\sigma = a/4$ in $D = 0.05$.

Na slik je prikazan rezultat za začetni pogoj Gaussove krivulje 1, 2.

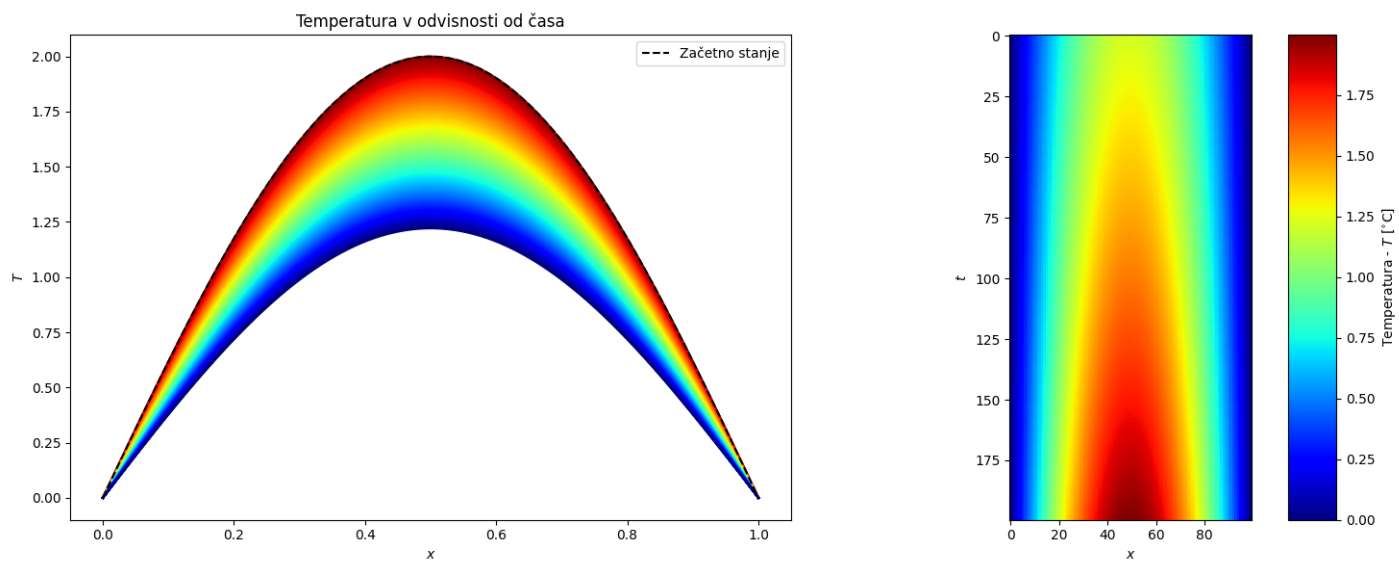
Dodatna naloga je od nas zahtevala implementacijo še neke druge začetne funkcije kot npr sinusna krivulja. Ker je to zelo majhna sprememba v kodi sem to storil kar sproti za vse metode 3, 4.



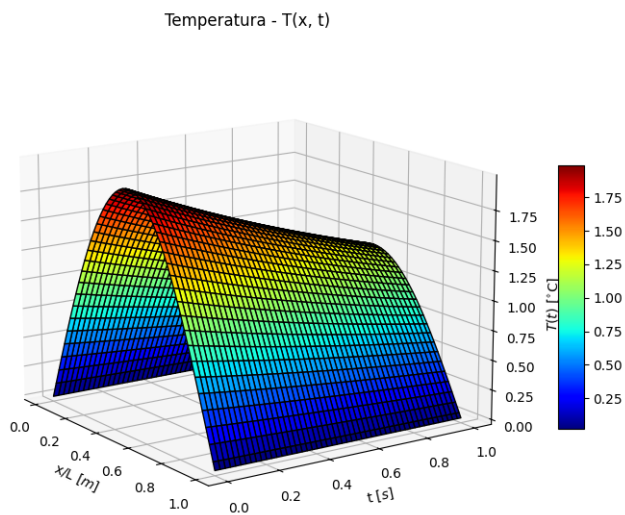
Slika 1: Analitična rešitev z začetnim pogojem v obliki Gaussove krivulje.



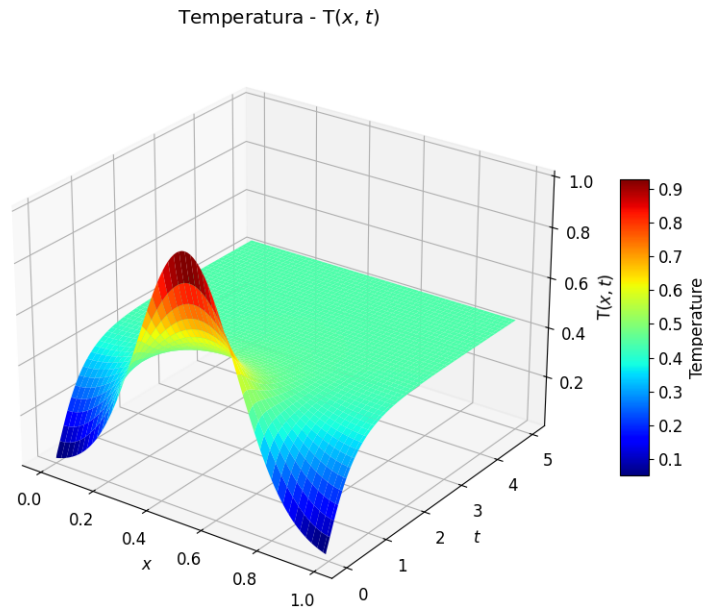
Slika 2: Analitična rešitev za Gauss.



Slika 3: Analitična rešitev z začetnim pogojem v obliki sinusne krivulje.



Slika 4: Analitična rešitev za sinus.



Slika 5: Periodični robni pogoj, Gauss.

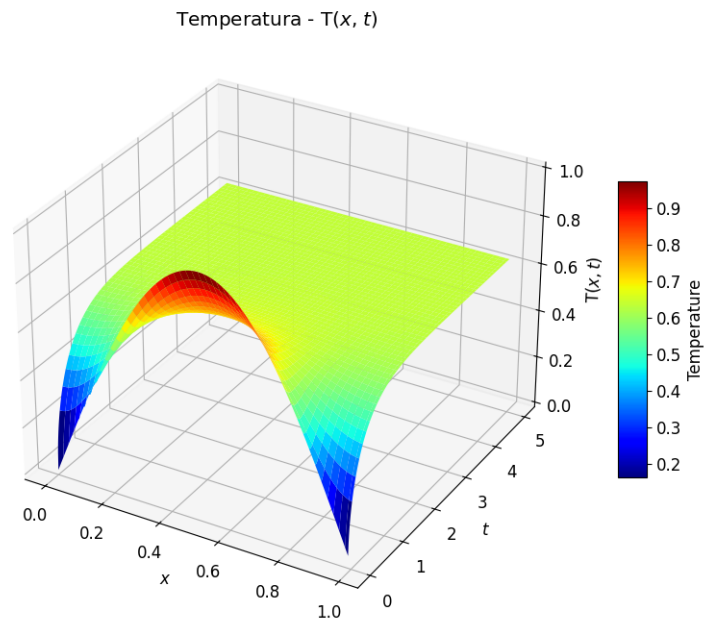
4 Fourierova metoda

Implementacija Fourierove metode je potekala bolj gladko kot implementacija analitične metode zahvaljujoč zelo dobremu posnetku [1], ki sem ga odkril. Za integracijo sem uporabljal funkcijo *scipy.integrate.odeint* za fourierovo transformacijo pa *numpy.fft.fft*.

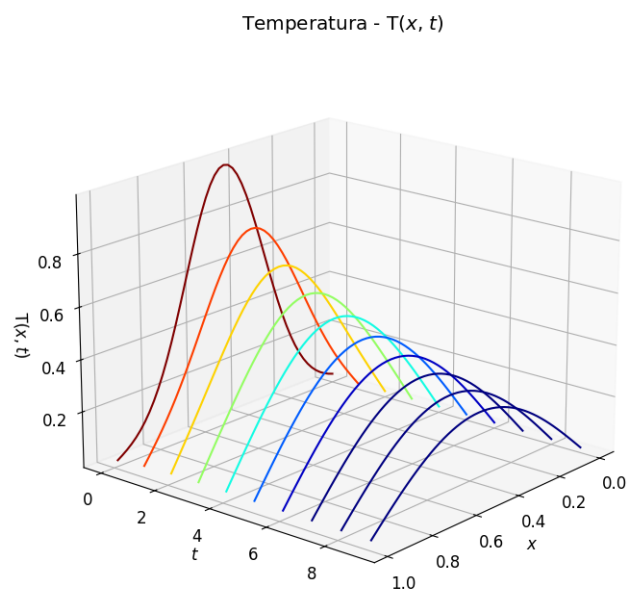
Na slikah 5 in 6 so prikazani grafi za začetni pogoj Gaussove ter sinusne krivulje za periodične robne pogoje $T(0, t) = T(a, t)$

Na slikah 7 in 8 so pa prikazani grafi zopet za Gaussovo ter sinusno krivuljo, vendar tokrat za homogen Dirichletov robni pogoj $T(0, t) = T(a, t) = 0$.

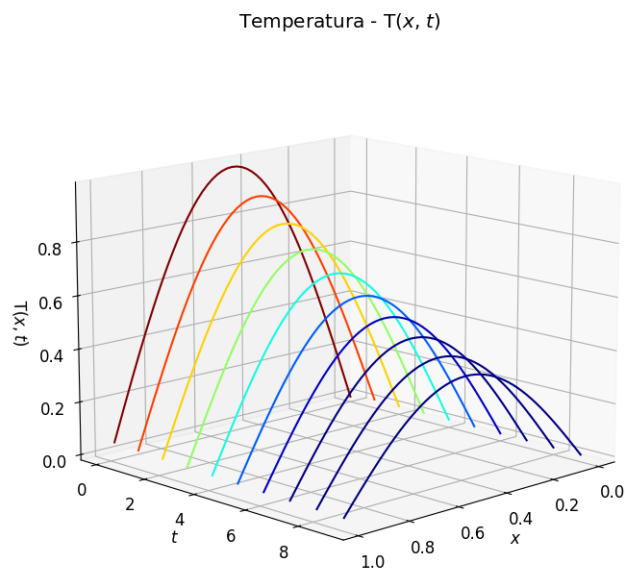
Pri Dirichletovem robnem pogoju smo morali paziti na območje transformacije saj je potrebno zadostovati pogoju periodičnosti, zato sem prvo razširil Gaussovo funkcijo tako, da sem dodal še eno nasprotno obrnjeno kot razvidno iz slik 9 in 10.



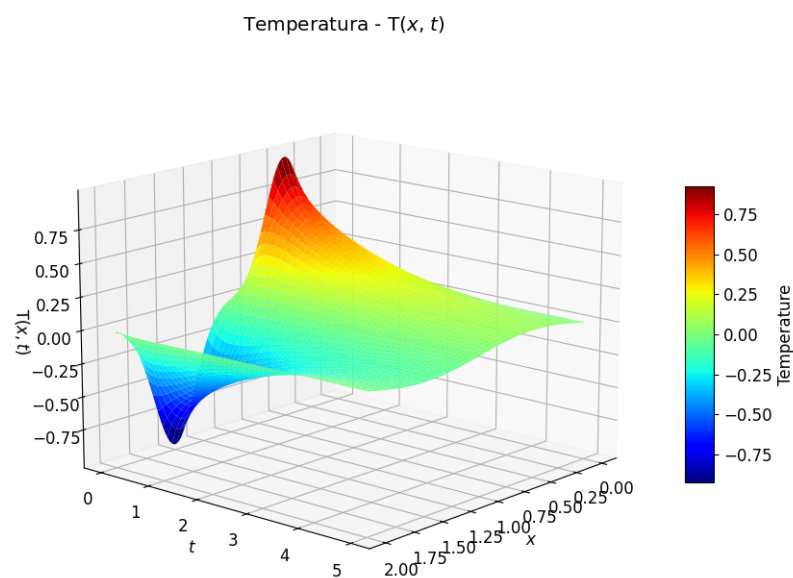
Slika 6: Periodični robni pogoj, sinus.



Slika 7: Homogen Dirichletov robni pogoj, Gauss.



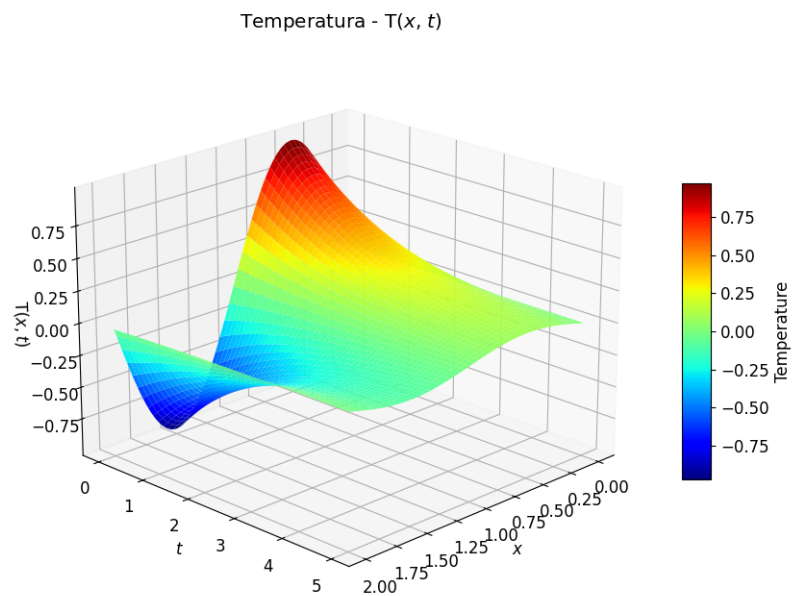
Slika 8: Homogen Dirichletov robni pogoj, sinus.



Slika 9: Homogen Dirichletov robni pogoj, Gauss.

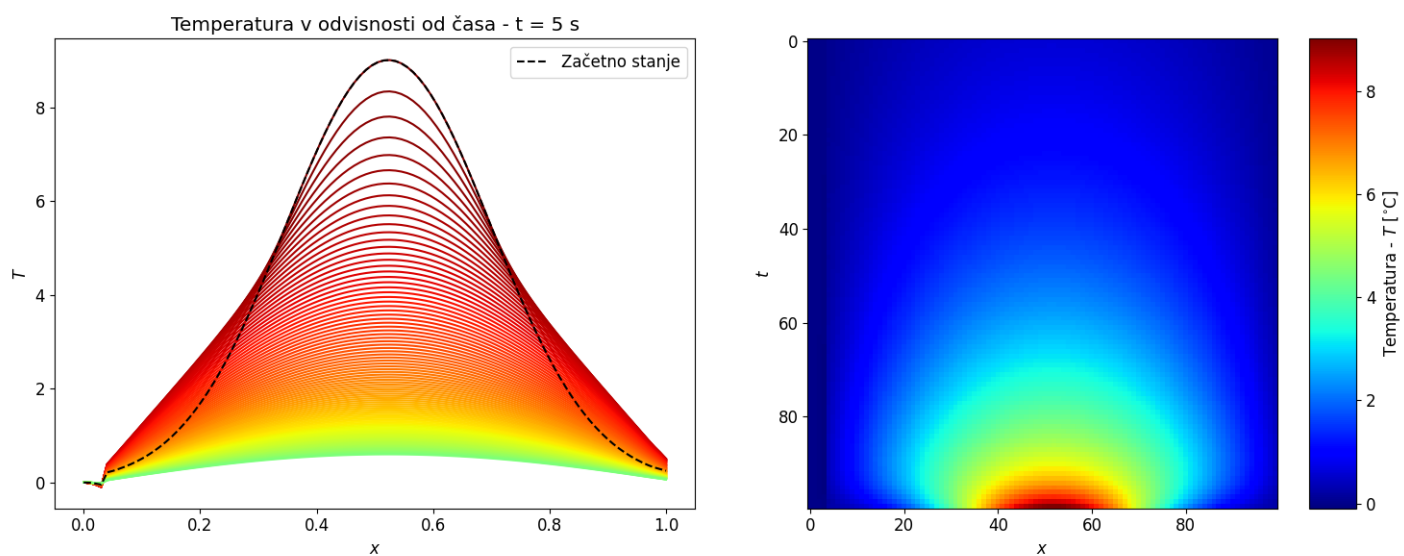
5 Kolokacijska metoda

Pri implementaciji kolokacijske metode sem si prida poskušal pomagati s člankom [4], vendar z malo uspeha kar se tudi izraža v samih rezultatih.

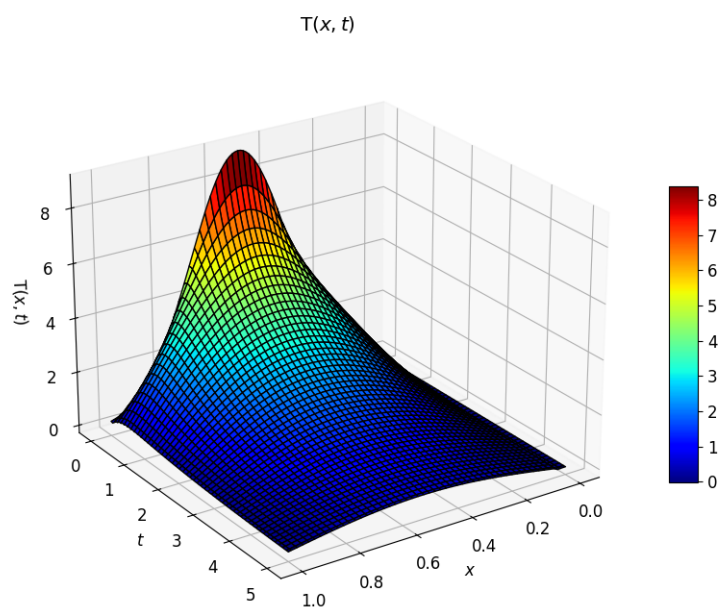


Slika 10: Homogen Dirichletov robni pogoj, sinus.

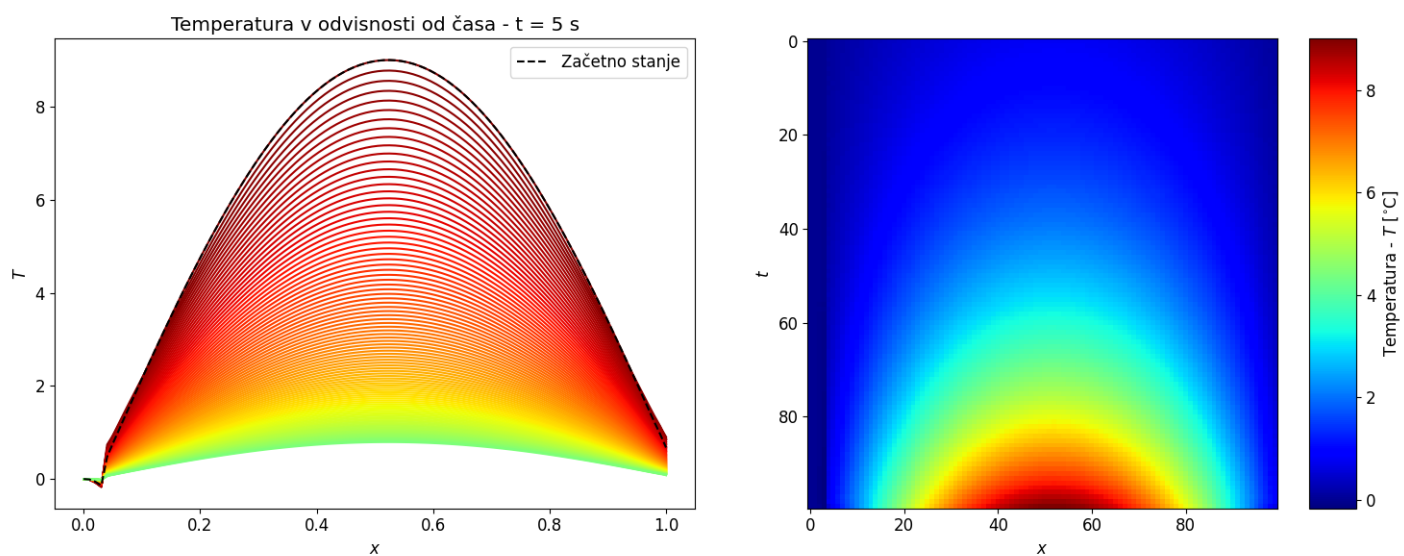
Implementacija mi je povzročala veliko vrtoglavic, saj še zmeraj nisem čisto siguren kaj je vodilo do tako velike napake kot vidno na slikah 11, 12, 13 in 14.



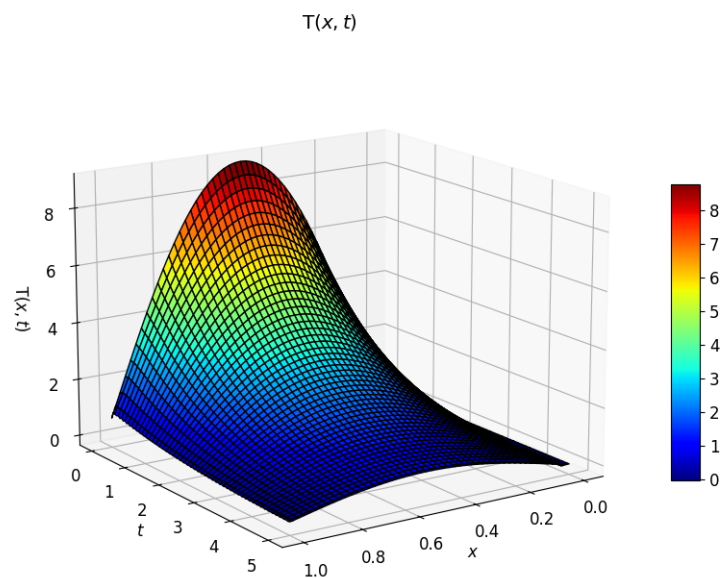
Slika 11: Kolokacijska metoda, Gauss.



Slika 12: Kolokacijska metoda, Gauss.



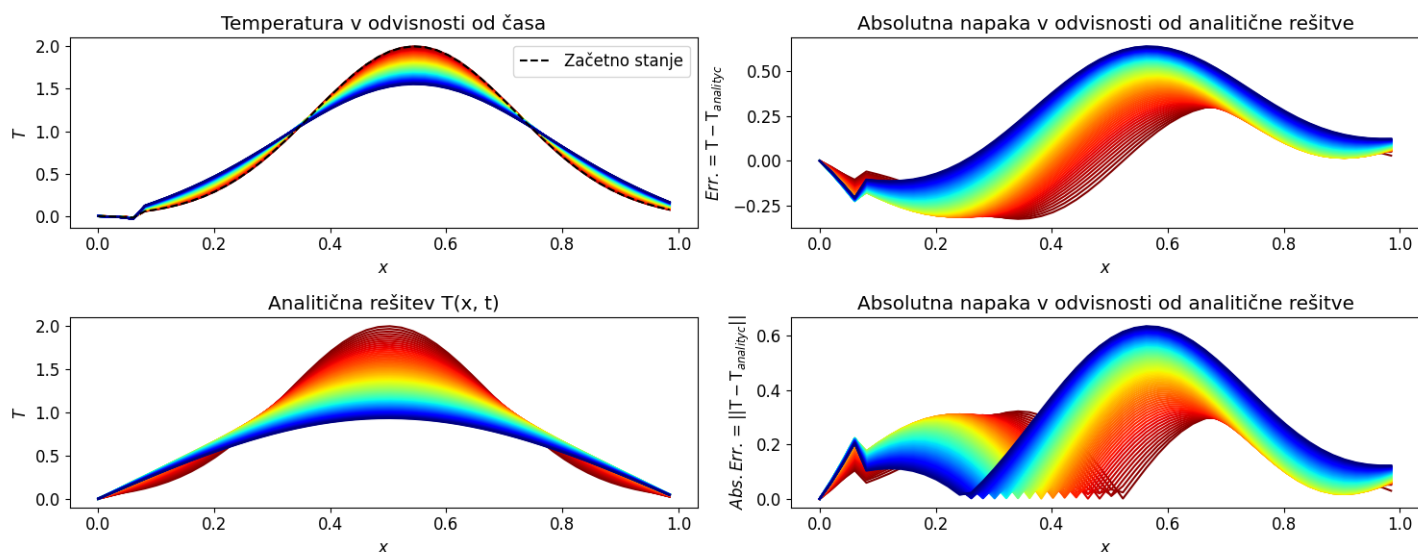
Slika 13: Kolokacijska metoda, sinus.



Slika 14: Kolokacijska metoda, sinus.

6 Napaka

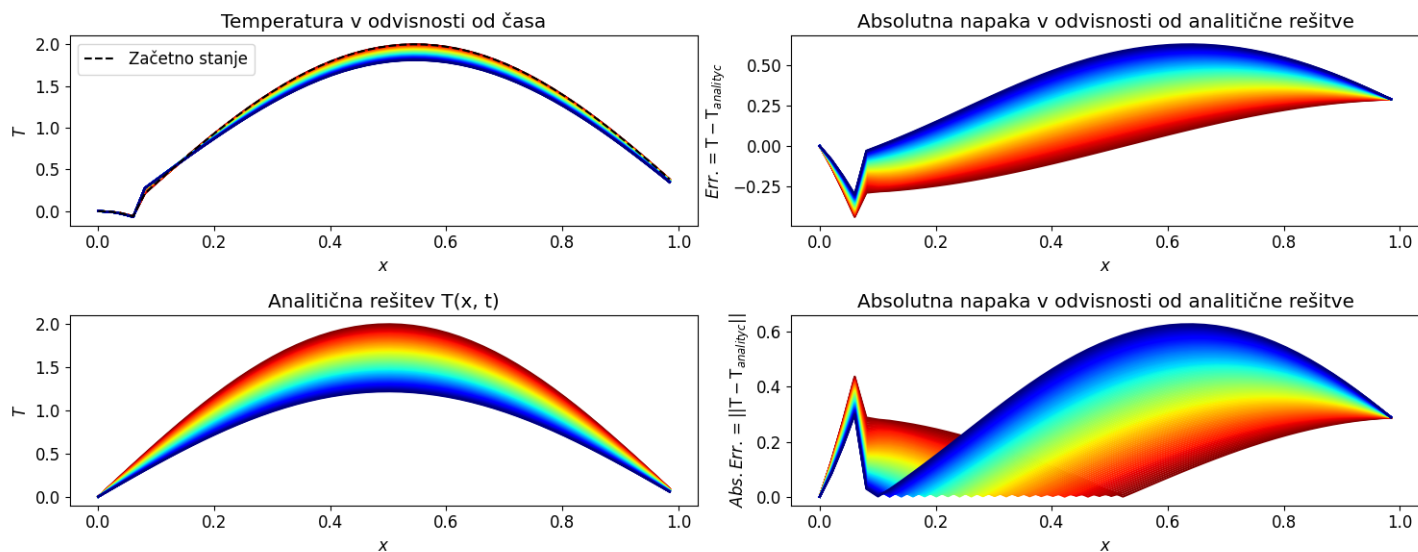
Kot že prej omenjeno, sem pri kolokacijski metodi naletel na nekakšne artefakte katere si ne znam pojasniti. Še bolj razvidno je iz grafov 15 in 16, kjer že na oč opazimo močno odstopanje od analitične rešitve, poleg tega nam pa grafa napake 'paint a bleak picture'.



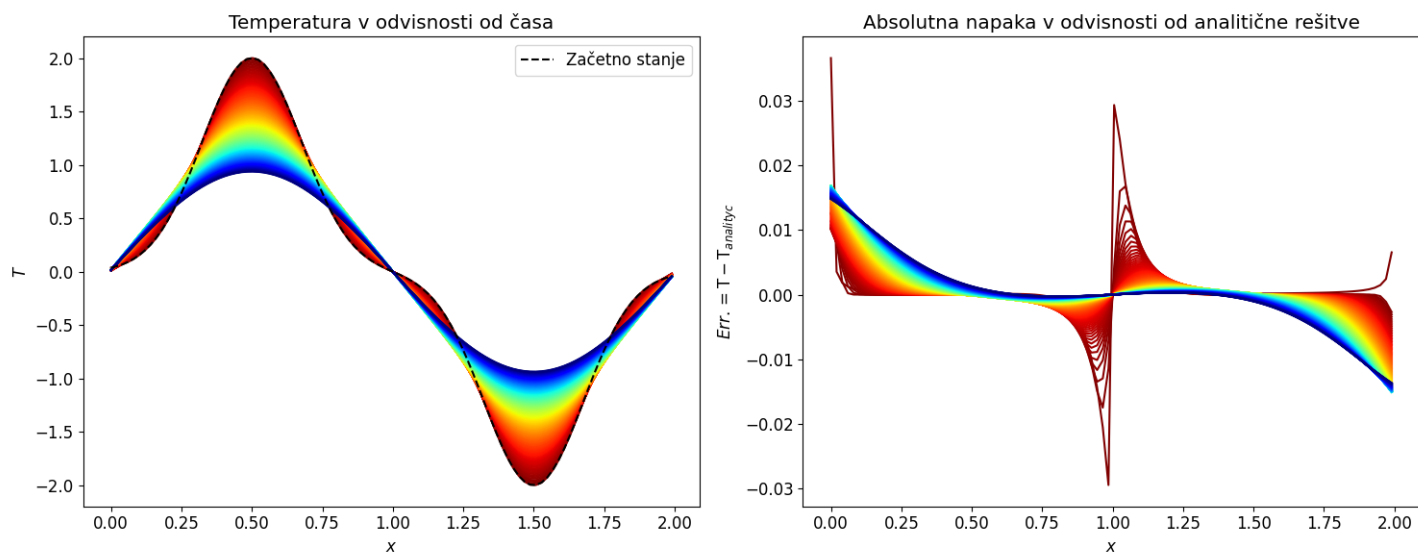
Slika 15: Napaka kolokacijska metode, Gauss.

Tudi implementacija Fourierove metode ni brezhibna, saj se na grafu 17 in 18 lepo vidijo določeni artefakti na robovih območja. Podobni artefakti so razvidni tudi pri analitični rešitvi.

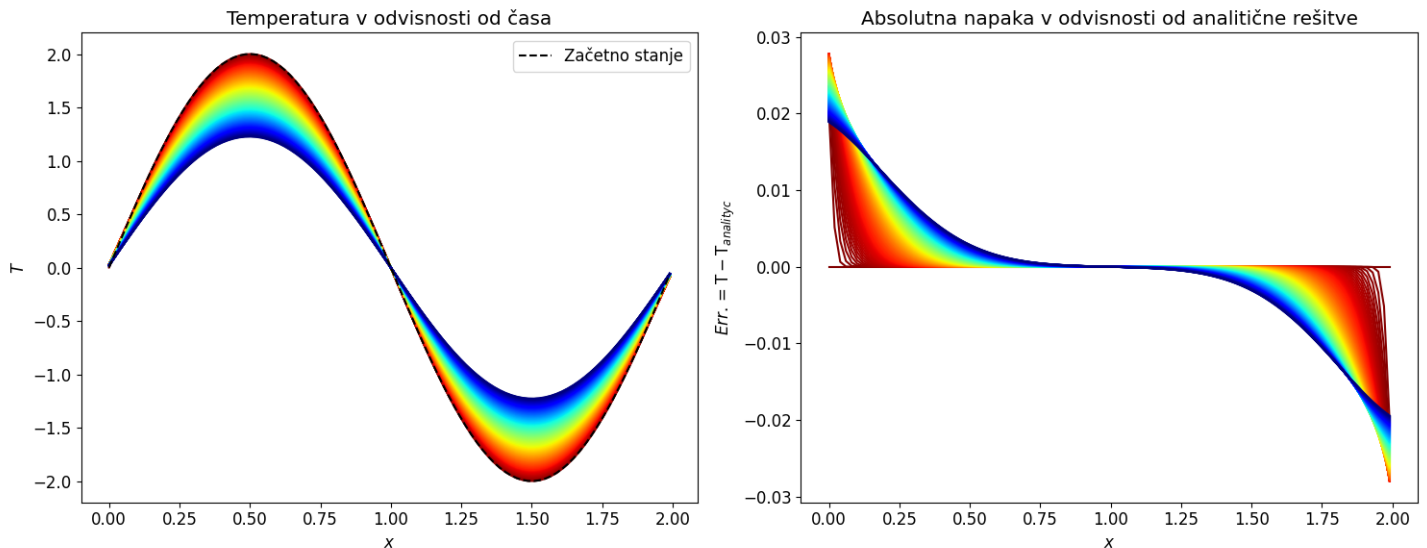
Kot je že navada pri tem predmetu, mi je zmanjkalo časa za globlje razhroščevanje in pa še kakšne dodatke kot izračun časa izvajanja in porabe pomnilnika. Po občutku je Fourierova metoda hitrejša, kar je posledica uporabe hitre fourierove transformacije. Kolokacijska metoda temelji na reševanju matričnega sistema, kar bi lahko ob uporabi grafične kartice pomenilo hitrejše račune pri velikih vrednostih.



Slika 16: Napaka kolokacijske metode, sinus.



Slika 17: Napaka Fourierove metode, Gauss.



Slika 18: Napaka Fourierove metode, sinus.

7 Zaključek

Cilj naloge je bil, da se spoznamo z dvema spektralnima metodama in sicer, s Fourierovo metodo in Kolokacijsko metodo. Komentarje sem priložil sproti. Zapuščam Vas z ChatGPT-jevim lepim in jedrnatim povzetkom mojih frustracij med študijem: "Experiencing the feeling of coherence, only to be swiftly replaced by perplexity, is like glimpsing clarity amidst the chaos, only to find it slipping away, leaving a sense of disarray and bewilderment in its wake."

Literatura

- [1] Steve Brunton, *Solving PDEs with the FFT [Python]*.
- [2] Matthew J. Hancock, *The 1-D Heat Equation*, 18.303 Linear Partial Differential Equations, Fall 2004
- [3] Simon Bukovšek, *Skripta predavanj Matematika 4, Ljubljana 2023*.
- [4] Joan Goh, Ahmad Abd. Majid, and Ahmad Izani Md. Ismail, *Cubic B-Spline Collocation Method for One-Dimensional Heat and Advection-Diffusion Equations*.