Multirooster en multischaal oplossingsmethoden

Project 2023-2024: Simulatie van het Double Slit Experiment en simulatie van Wi-Fi signalen in huis

Dr. Siegfried Cools

Deadline verslag: zaterdag 13 januari 2024, 24u00. Pagina-limiet: max. 7 blz.

Mondeling examen: vrijdag 19 januari 2024, 10h00.

In dit project simuleren we enkele interessante golfverstrooingsfenomenen en kijken we hoe Multigrid kan helpen bij het oplossen van het bijhorende lineaire stelsel. Het project bouwt voort op je eigen geometrische Multigrid code uit de practica bij de cursus 'Multirooster en Multischaal Oplossingsmethoden' en (gedeeltelijk) je inzichten uit Project 1. Extra achtergrond informatie bij dit project kan worden gevonden in referentie [3].

1 Algemene parameters doorheen dit project

De focus van dit project ligt op het oplossen van 2D golfverstrooingsproblemen onderhevig aan de Helmholtz vergelijking

$$(-\Delta + \sigma(x))\, u(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{x} \in [0,1]^2, \tag{1}$$

Hierbij noemen we $\sigma(x)$ het (kwadraat van het) golfgetal, dat de frequentie van de golven bepaalt. Een plaatsafhankelijke $\sigma(x)$ simuleert verschillende materiaaleigenschappen in het computationeel domein (zie verder).

We maken steeds gebruik van een discretizatie van het 2D domein $\Omega = [0,1]^2$, i.e. het eenheidsvierkant. Beschouw in dit project een typische discretizatie met $n = 2^7 = 128$ rooster-intervallen in elke richting. Dat wil zeggen: het domein Ω wordt discreet voorgesteld door $n+1$ roosterpunten in elke dimensie: bijvoorbeeld `x` $= \{x_0 = 0, x_1, \ldots, x_{n-1}, x_n = 1\}$ voor de x-richting. Het 2D rooster kan worden bekomen via `[X,Y] = meshgrid(x,y)`. Dit geldt ook voor niet-uniforme meshes, zie ook verder.

2 Exterior Complex Scaling (ECS) randvoorwaarden

Voor het simuleren van golfverstrooiingsproblemen worden vaak uitgaande randvoorwaarden gebruikt, i.e. de golven worden verondersteld op een natuurlijke manier uit het computationele domein te vloeien aan de randen (géén refractie of absorptie). Dit gedrag kan niet bekomen worden door de klassieke randvoorwaarden zoals Dirichlet, Neumann, etc. We kijken daarom naar Exterior Complex Scaling (ECS) randvoorwaarden [1].

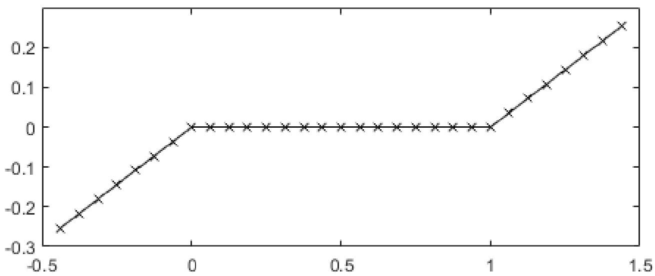

Figure 1: Illustratie van een 1D ECS rooster op het eenheidsinterval $\Omega = [0,1]$ met $n = 16$, gegenereerd via de function call `linspacecs(0,1,17,`π`/6)`.

Bij ECS wordt het domein uitgebreid met één of meerdere artificiële complexe delen of "contouren", zie Figuur 1. Van elke complexe contour heeft het reële deel lengte 0.5. De draaiingshoek van de contouren in het complexe vlak bedraagt $\theta = \pi/6$. Op de complexe eindpunten worden Dirichlet randvoorwaarden opgelegd (vandaar dat deze eindpunten niet getoond worden in Figuur 1). Het reële deel van het domein, i.e. $\Omega = [0, 1]$, telt $n + 1$ roosterpunten, knikpunten (op $x = 0$ en $x = 1$) inclusief. Dit aantal wordt als input meegegeven aan de functie `linspacecs`. Het uitbreiden van het rooster impliceert dat de roosterafstanden nu niet-uniform en (lokaal) complex-waardig zijn.

Een voorbeeld oplossing van een Helmholtz stelsel met ECS randvoorwaarden wordt getoond in Figuur 2. Merk op dat deze figuur ter illustratie ook de oplossing in de complexe contouren toont. We zijn in principe echter enkel op zoek naar de oplossing in het reële domein $\Omega = [0, 1]^2$; de ECS regio is een louter artificiële toevoeging om uitgaande randvoorwaarden te simuleren.

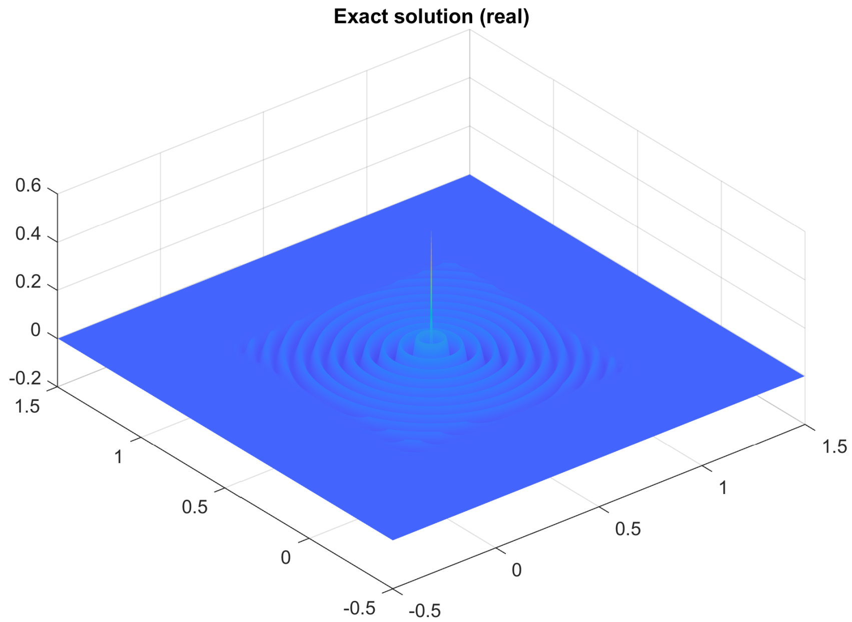

Figure 2: Oplossing (reëel deel) van een Helmholtz vergelijking met $\sigma = -10000$ en puntbron op $(x, y) = (0.5, 0.5)$ geplot op het reële deel van het uitgebreide domein met ECS randvoorwaarden. De ECS regio zorgt voor een demping van de oplossing voorbij de randen van het reële domein, wat perfect uitgaande golven simuleert.

Vraagstelling:

- Zoals je observeerde in Project 1 zorgt het toevoegen van een complex deel aan het golfgetal σ ervoor dat de golf-oplossing van de Helmholtz vergelijking gedempt wordt. Waarom is dit ook het geval indien we de roosterafstanden complexwaardig kiezen? Met andere woorden: wat is de relatie tussen een complexe roosterafstand en een complex golfgetal? Toon theoretisch aan.

- Implementeer de 2D Helmholtz discretizatiematrix voor **niet-uniforme** ECS roosters. Maak hiervoor gebruik van de Shortley-Weller formules voor niet-uniforme eindige differenties, zie Practicum 5. Je 1D functie neemt dus het uitgebreide ECS rooster `x` als input, en geeft de Poisson matrix op dit niet-uniforme rooster als output terug. De 2D Poisson matrix kan je definiëren via Kronecker producten (zie practica). Daarna voeg je $\sigma(x)$ toe op de diagonaal om de Helmholtz operator te verkrijgen.

  Hint: Je kan hierbij handig gebruik maken van `h = diff(x)`, de vector van roosterafstanden. Deze `h` laat je toe om de 1D Poisson matrix vector-gewijs te definiëren via `spdiags`. Let hierbij op de details!

- Pas je Multigrid code `vcycle2d` aan zodat ze geschikt is voor het oplossen van ECS Helmholtz problemen. De voornaamste aanpassing is de constructie van de intergrid operatoren I_h^{2h} en I_{2h}^h: de functie die de 1D operatoren construeert moet op elk level in de multigrid hierarchie het bijhorende niet-uniforme (1D) ECS rooster `x` als input krijgen, en een aangepaste operator vormen. Zie [1], p.129, uitdrukking (7.20) en/of Practicum 5 voor de niet-uniforme lineaire interpolatie operator. De restrictie operator kan je vormen via de variationele eigenschap zoals voorheen. De Galerkin eigenschap kan worden gebruikt om de coarse grid matrix te vormen. Gebruik de standaard gewogen-Jacobi methode met $\omega = 2/3$ als smoother.

  Hint: De intergrid operator(en) kan je op een vrij gelijkaardige manier implementeren als de discretizatiematrix hierboven (i.e. via `spdiags`), in combinatie met hoe we dit in het practicum reeds deden.

  Hint: Om het 1D ECS rooster `x` aan te maken op elk level van de multigrid hierarchie via `linspacecs` moet je het aantal reëelwaardige roosterpunten $n + 1$ (in 1D) kennen op elk level.

Enkele aanvullende verduidelijkingen bij de implementatie

(a) Grootte van grid en bijhorende matrices. Het 1D ECS grid telt $n+1$ roosterpunten op het interval $[0,1]$, incl. de punten $x_0 = 0$ en $x_n = 1$. Daaraan worden twee complexe contouren toegevoegd die elk uit $n/2$ roosterpunten bestaan; maar de twee complexe Dirichlet randpunten (uiterst links/rechts in de contouren) worden niet gegenereerd, aangezien daar de oplossing reeds gekend is. Dus concreet heeft elk van de complexe contouren lengte $(n/2-1)$, en is de totale grootte van het ECS grid $(2n-1)$. Elk van deze roosterpunten komt overeen met een onbekende, en dus een rij in de 1D matrix van grootte $(2n-1)\times(2n-1)$. Voorbeeld: stel $n = 2^7 = 128$, dan creëert $\texttt{linspacecs}(0,1,n+1,\theta)$ een rooster met $129+63+63 = 255$ roosterpunten, complexe Dirichlet randpunten exclusief. De bijhorende 1D discretizatiematrix telt 255 rijen/kolommen. Dit impliceert dat op het grovere $2h$-rooster de 1D matrix $(2n/2-1) = (n-1) = 127$ rijen/kolommen telt.

(b) Discretizatiematrix met niet-uniforme roosterafstanden. De 1D discretizatiematrix telt $(2n-1)$ rijen, zoals hierboven uitgelegd. Zoals je zal merken, is de vector `h = diff(x)` echter een vector van lengte $(2n-2)$, dus eentje korter dan het aantal onbekenden. Wanneer je dus de linker- en rechter-roosterafstanden in elk punt definieert, zal je de vector `h` een elementje langer moeten maken (aan het begin of einde van de vector, afhankelijk van of je de linker- of rechter-roosterafstanden maakt). Het elementje dat je toevoegt is simpelweg de complexe roosterafstand, en is dus gewoon een kopie van een bestaand elementje uit `diff(x)`. Merk op: de Dirichlet randpunten zitten niet vervat in de onbekenden (zie uitleg hierboven), dus er is geen nood aan het invoeren van bijvoorbeeld ghost points of iets dergelijks. De meest linkse of meest rechtse roosterafstand tussen het laatste punt van het ECS rooster en het Dirichlet randpunt is gewoon de complexe roosterafstand.

3 Test probleem: 2D Helmholtz met puntbron en klein golfgetal

Een eenvoudig probleem om je Multigrid code te valideren is een 2D Helmholtz probleem met een constant (i.e. niet-plaatsafhankelijk) en zeer klein golfgetal $\sigma = -10$. De rechterhand is een puntbron in het centrum van het computationele domein: `F(0.5,0.5) = n*n`. De oplossing van dit probleem wordt weergegeven in Figuur 3.

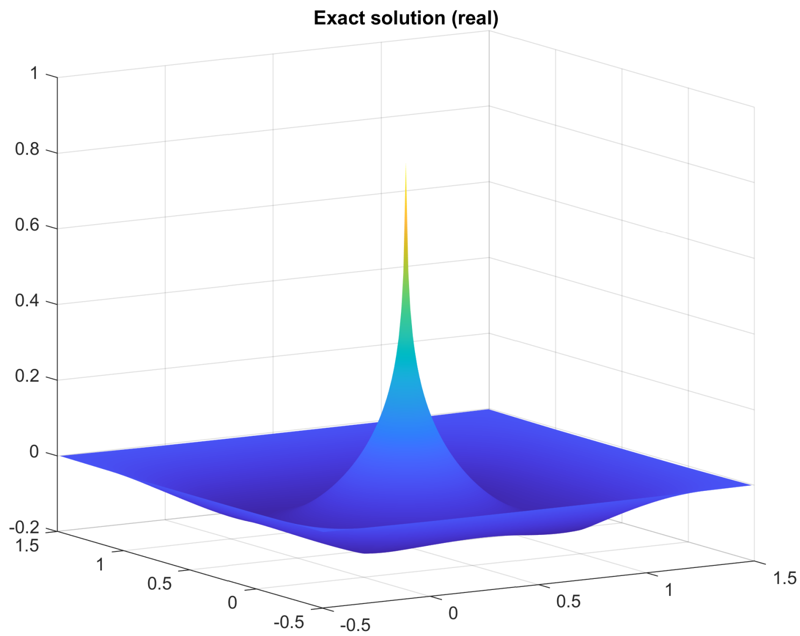

Figure 3: Oplossing (reëel deel) van een Helmholtz vergelijking met $\sigma = -10$ en puntbron op $(x, y) = (0.5, 0.5)$ geplot op het reële deel van het uitgebreide domein met ECS randvoorwaarden.

Vraagstelling:

- Toets je Multigrid code aan dit probleem; Multigrid zou zonder problemen moeten convergeren. Gebruik bijvoorbeeld 20 V(3,3)-cycles om de oplossing te bepalen.
- Plot ook het convergentie verloop (error norms). Om de error na elke V-cycle de berekenen kan je vooraf (eenmalig) de exacte oplossing bepalen via `u = H\f`, met `f = F(:)`.

4 Simulatie van het Double Slit Experiment

Het Double Slit Experiment is een klassiek experiment uit de quantum-mechanica dat aantoont dat licht en materie zowel een deeltjes-karakter als een golf-karakter hebben – ze zijn dus golf en deeltje tegelijkertijd (!) – wat de probabilistische grondslag van de quantum-mechanica vormt. Zie [4] voor meer achtergrond informatie over het Double Slit Experiment. We maken hier een computationele simulatie van dit experiment.

De staande golf die vertrekt vanaf de linkerzijde van het 2D domein wordt gesimuleerd door een bron (rechterhand) over de gehele lengte van één zijde van het domein: `F = n*n*(real(X)==0)`. Hier is `(real(X)==0)` een boolean matrix die 1 is waar $x = 0$, en elders overal 0 is.

Het scherm of muur-vormig object met twee spleten kan worden gesimuleerd door lokaal een zeer hoog golfgetal te kiezen. Dit betekent dat $\sigma(x) = -10000$ overal in het domein, behalve in de muur: daar is het golfgetal 101 keer groter: $\sigma(x) = -1010000$, wat de ondoordringbaarheid van dit object simuleert. Onderstaand code-fragment geeft een mogelijke implementatie hiervan aan de hand van boolean matrices. Het resulterende golfgetal is te zien in Figuur 4 (rechts).

```
sigma = -10000;
boolean_wall = (real(X)>0.48) .* (real(X)<0.52) .* ((real(Y)<0.30) + (real(Y)>0.34)) ...
                  ...  .* ((real(Y)<0.65) + (real(Y)>0.69));
wall_const = 100;
sigmamatrix = sigma * (ones(size(X)) + wall_const * boolean_wall);
```

De niet-constante vector `sigmamatrix(:)` wordt dan gebruikt als plaatsafhankelijk golfgetal (i.e. toegevoegd op de diagonaal) voor het opstellen van de 2D Helmholtz matrix.

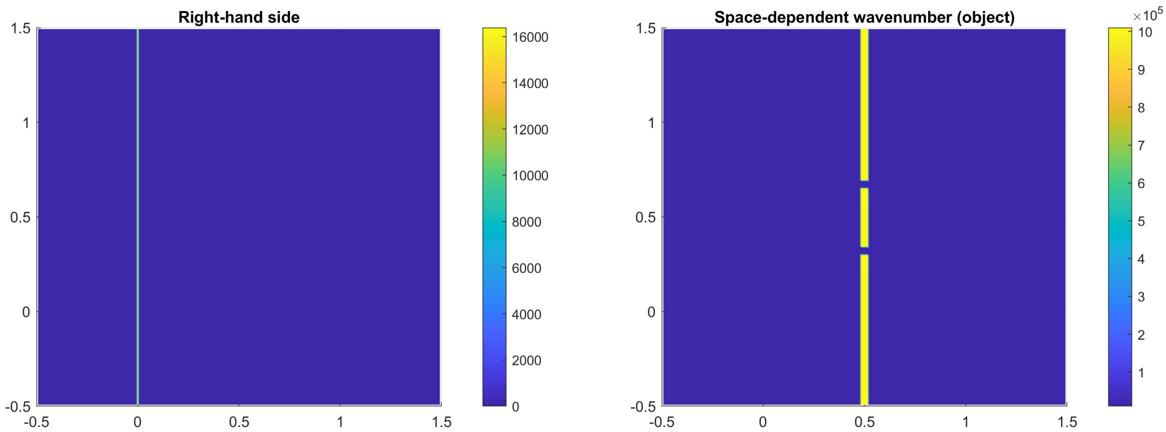

Figure 4: Input parameters voor het Double Slit Experiment. Links: rechterhand of bron functie $F(x)$. Bovenaanzicht van de plot gemaakt via `surf(real(X),real(Y),real(F))`. Rechts: plaatsafhankelijk golfgetal $\sigma(x)$.

Dit type van Helmholtz problemen met een sterk plaatsafhankelijk golfgetal zijn bekend in de literatuur als noemenswaardig moeilijk oplosbaar aan de hand van numerieke (iteratieve) methoden. Desalniettemin stellen we een method voor gebaseerd op Multigrid als preconditioner.

Vraagstelling:

- Test je Multigrid code als oplossingsmethode voor dit probleem. Wat merk je op als je het convergentieverloop (error norms) bekijkt?
- Analyseer de eigenwaarden van de 1D ECS Poisson operator met $n = 2^7 = 128$. Welke mogelijke spectrale oorzaken zie je voor het hierboven geobserveerde convergentiegedrag van Multigrid voor dit Helmholtz probleem? Verklaar aan de hand van je kennis over de basiscomponenten van Multigrid, en je ervaring met Helmholtz problemen uit Project 1.
- Voeg een complexe shift in op het golfgetal, i.e. $\tilde{\sigma}(x) = \sigma(x)\,(1 + 1i)$, zoals in Project 1. Kan je het Complex Shifted probleem benaderend oplossen aan de hand van Multigrid?
- Gebruik één V-cycle op het Complex Shifted probleem als preconditioner voor GMRES, zoals je dat ook deed in Project 1. Een 100-tal GMRES iteraties zou moeten volstaan om een goede benadering te verkrijgen. Vergelijk de snelheid van convergentie (relatieve residuen) van preconditioned GMRES met die van GMRES zonder preconditioner. Is Multigrid geschikt als preconditioner voor dit probleem?

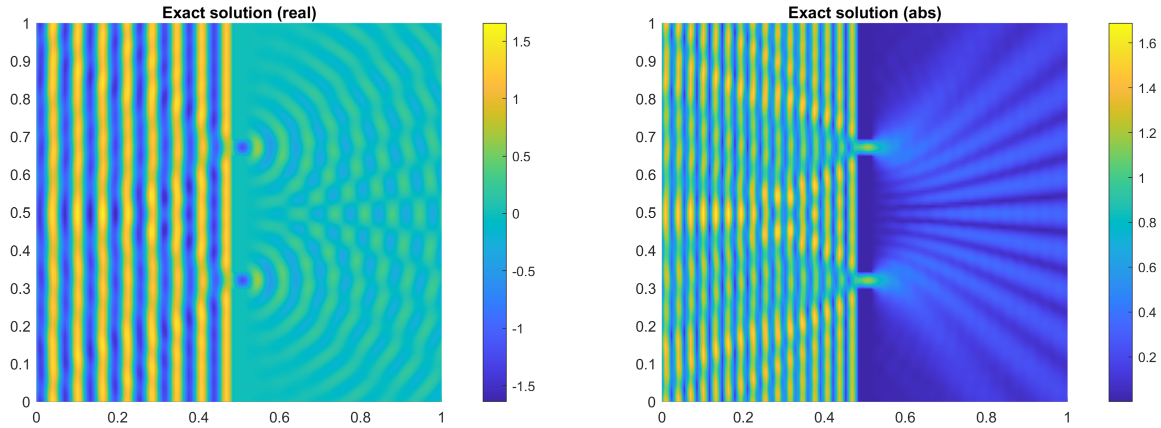

Figure 5: Oplossing van het Double Slit Experiment op het reële deel van het domein, i.e. $[0,1]^2$. Links: reëel deel `real(V)` geeft de golfoplossing weer. Bovenaanzicht van de plot gemaakt via `surf(real(X),real(Y),real(V))`. Rechts: absolute waarde `abs(V)` geeft de bijhorende intensiteit weer.

5 Simulatie van Wi-Fi signalen bij je thuis

Op een zeer gelijkaardige manier aan de simulatie van het Double Slit Experiment kan een heel ander golf-gedreven fenomeen worden beschreven: de simulatie van de sterkte van een Wi-Fi signaal op een 2D plattegrond (of bij uitbreiding 3D voorstelling) van een ruimte, zie ook [5]. Net zoals het scherm in het Double Slit Experiment, kunnen de materiaaleigenschappen van de muren (en eventueel andere objecten) worden gesimuleerd door het plaatsafhankelijke golfgetal $\sigma(x)$. Voor de meeste materialen bestaat het golfgetal uit een reëel en een complex deel: het reële deel stelt de mate van doordringbaarheid van het materiaal voor (*phase velocity*), terwijl het complexe deel de absorptie van de golf door het materiaal representeert (*extinction coefficient*).

Vraagstelling:

- Teken een 2D plattegrond van een verdieping of enkele kamers van je eigen (of een fictief) huis. Je kan dit bijvoorbeeld doen via een combinatie van boolean matrices zoals in het Double Slit Experiment. Beschouw opnieuw een golfgetal $\sigma(x) = -10000$ in de vrije ruimte. Kies voor het golfgetal in de muren bijvoorbeeld $\sigma(x) = -50000\,(1.2 + 0.2i)$. Je kan deze parameter ook zelf tweaken. Plaats als rechterhand een puntbron (geschaald met n^2) ergens in de vrije ruimte; deze stelt de bron van het Wi-Fi signaal voor (modem). Figuur 6 toont een voorbeeld ter illustratie. Merk op dat in deze simulatie het domein weldegelijk ECS randvoorwaarden heeft, maar de assen van de figuren zijn begrensd tot het originele domein $[0,1]^2$.

- Los de resulterende Helmholtz vergelijking op via Multigrid-preconditioned GMRES. Gebruik ook hier één V(3,3)-cycle op het Complex Shifted probleem met $\tilde{\sigma}(x) = \sigma(x)\,(1 + 1i)$ als preconditioner. Mogelijk zijn (afhankelijk van de grootte van $\sigma(x)$) enkele honderden GMRES iteraties nodig om een accurate oplossing te bekomen. Plot de GMRES convergentie (relatieve residuen).

Referenties

[1] W.L. Briggs, W.L., V.E. Henson and S.F. McCormick. *A Multigrid Tutorial.* Society for Industrial and Applied Mathematics, 2000.

[2] B. Simon. *The definition of molecular resonance curves by the method of exterior complex scaling.* Physics Letters A, 71:211, 1979.

[3] B. Reps, W. Vanroose, H. bin Zubair. *On the indefinite Helmholtz equation: complex stretched absorbing boundary layers, iterative analysis, and preconditioning.* Journal of Computational Physics 229:22, 8384-8405, 2010.

[4] Wikipedia contributors. *Double-slit experiment — Wikipedia, The Free Encyclopedia*, 2021, `https://en.wikipedia.org/wiki/Double-slit_experiment`.

[5] Jason Cole, blog-post: *Almost Looks Like Work – Helmhurts*, 2014, `https://jasmcole.com/2014/08/25/helmhurts/`.

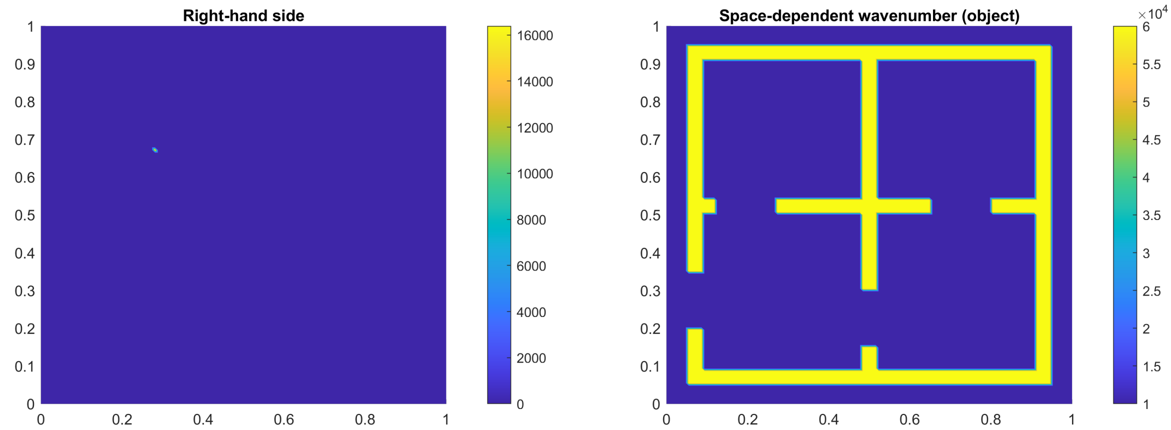

Figure 6: Input parameters voor een Wi-Fi simulatie, geplot op het reële deel van het domein, i.e. $[0,1]^2$. Links: rechterhand of bron functie $F(x)$. Rechts: plaatsafhankelijke golfgetal $\sigma(x)$. De openingen in de muren stellen bijvoorbeeld (dunne of openstaande) deuren voor.

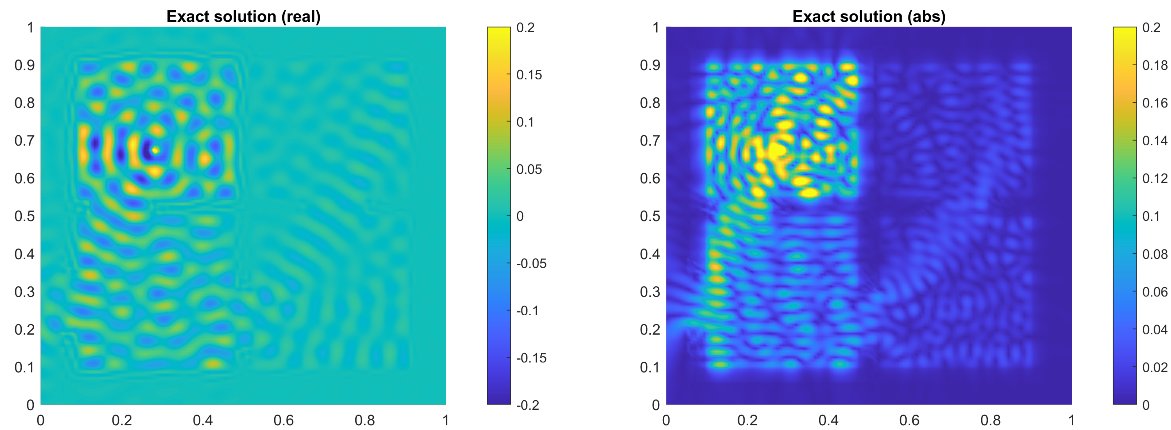

Figure 7: Oplossing van de Wi-Fi simulatie, geplot op het reële deel van het domein, i.e. $[0,1]^2$. Links: reëel deel `real(V)` geeft de golfoplossing weer. Rechts: absolute waarde `abs(V)` geeft de bijhorende intensiteit of signaalsterkte weer.