

Matematično-fizikalni praktikum

Avtor: Andraž Seničar

6. september 2024

Naloga 9: Začetni problem PDE - spektralne metode

Datum: september 2024

1 Uvod

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 algebraskih 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 -zlepkih 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 izvrednotimo 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 -zlepkih 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

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

Naloga:

- Reši difuzijsko enačbo v eni razsežnosti $x \in [0, a]$ z začetnim pogojem po plasti gaussovske porazdeljene temperature

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

(izberi razumne vrednosti za D , a in σ) in

1. periodičnim robnim pogojem $T(0, t) = T(a, t)$.
2. homogenim Dirichletovim robnim pogojem $T(0, t) = T(a, t) = 0$.

po Fourierovi metodi.

- Kolokacijsko metodo uporabi ob Gaussovem začetnem pogoju in homogenih Dirichletovih robnih pogojih $T(0, t) = T(a, t) = 0$ ter primerjaj obe metodi.

2 Reševanje

2.1 Analitična rešitev

Prvo sem se lotil pogledati analitično rešitev za oba problema. To mi bo omogočalo primerjati natančnost obeh napisanih metod. Reševanja se lahko lotimo s separacijo spremenljivk, kar nam paricalno enačbo prevede v dve navadno. Če za temperaturo vzamemo $T(x, y) = X(x)Y(t)$, dobimo diferencialni enačbi

$$\begin{aligned} \frac{X''}{X} &= -\lambda \\ \frac{1}{D} \frac{Y''}{Y} &= -\lambda \end{aligned}$$

Splošne rešitve za ti dve enačbi imajo obliko

$$\begin{aligned} X(x) &= A \sin(\omega x) + B \cos(\omega x) \\ Y(t) &= C e^{-\lambda t} \end{aligned}$$

kjer je $\omega^2 = \lambda$.

2.2 Dirichletovi robni pogoji

Pri upoštevanju Dirichletovih robnih pogojev nam konstanta B izginje, vrednost ω pa se diskretizira v $\omega = \frac{n\pi}{a}$, kar nam da končno rešitev

$$T(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-k(n\pi/a)^2 t}$$

Konstanto A_n lahko določimo tako, da izkoristimo ortogonalnost baze, ki jo tvorijo sinusne rešitve krajevnega dela enačbe. Koeficienti so enaki

$$A_n = \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) f(x) dx$$

kjer je $f(x)$ začetni pogoj $T(x, t = 0) = f(x)$.

2.3 Periodični robni pogoji

Tu je za analitično rešitev potrebno upoštevati še ujemanje odvodov na robu območja $X'(-\frac{a}{2}) = X'(\frac{a}{2})$. Reševanje nam olajša premik intervala reševanja na $x \in [-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}]$, kjer končno rešitev potem samo premaknemo za $\frac{a}{2}$. Po ponovni rabi ortogonalnosti dobimo končno rešitev

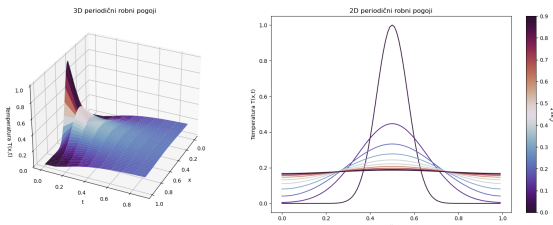
$$u(x, t) = A_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left[A_n \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) + B_n \sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \right] e^{-k(n\pi/a)^2 t} \quad (4)$$

kjer so koeficienti enaki

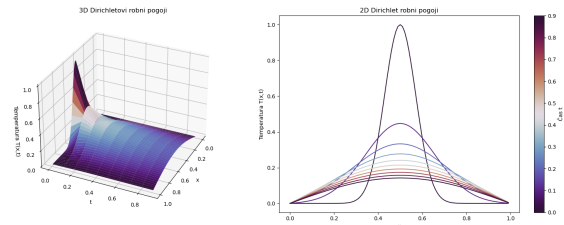
$$\begin{aligned} A_0 &= \frac{1}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} f(x) dx \\ A_n &= \frac{2}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) f(x) dx \\ B_n &= \frac{2}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) f(x) dx \end{aligned} \quad (5)$$

Potrebno je omeniti še koeficient A_0 , ki nastane pri vrednosti $\lambda = 0$. To se pravi člen, ki nima časovne odvisnosti in je enak končni temperaturi.

Na začetku si lahko pogledamo kako izgleda graf $T(x, t)$ pri obeh robnih pogojih. Za vse spodnje grafe je bila uporabljena vrednost difuzijske konstante $D = 0.1$, širina intervala $a = 1$ in začetni pogoj gaussovka z amplitudo 1 ter deviacijo $\sigma = 0.1$. Od tu naprej bodo začetni pogoji in difuzijska konstanta zmeraj enaki tem, razen če bo specificirano drugače.



(a) Periodični 3D graf



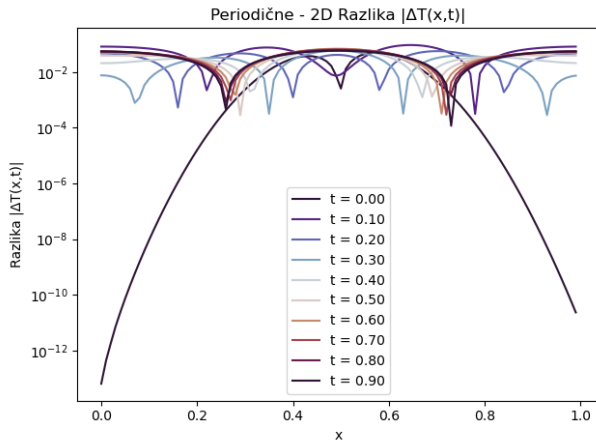
(b) Dirichlet 3D graf

Vidimo, da so rešitve enačb podobne fizikalnemu obnašanju, ki bi ga pričakovali. Začetni, ozki Gaussovi krivulji se s časoma amplituda zmanjša, širina pa poveča.

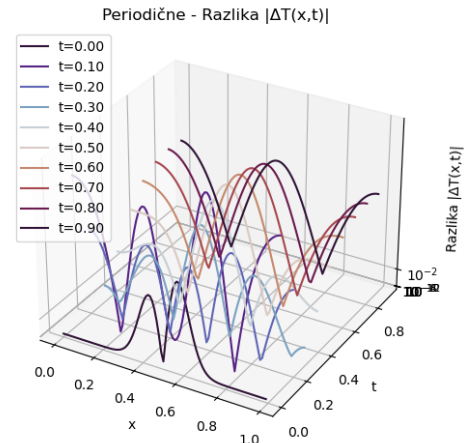
2.4 Fourierova metoda

Pri tej metodi sem najprej izračunal Fourierovo transformacijo začetnega pogoja. Tu sem si pomagal z funkcijo `fft.fft()` iz knjižnice NumPy. Nato sem dobljene koeficiente s pomočjo Eulerjeve metode propagiral po času.

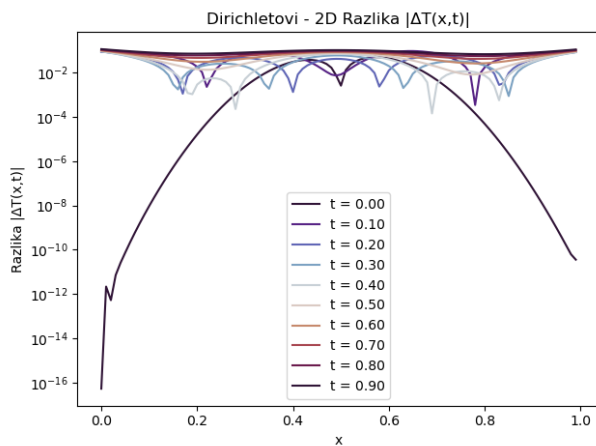
Prvo me je zanimala natančnost te metode, zato sem pogledal odstopanja vrednosti od dejanskih.



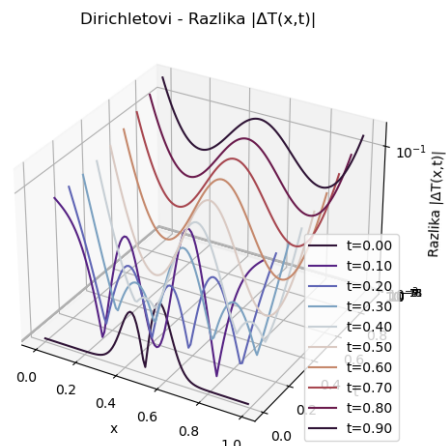
(a) 2D prikaz napake za periodične robne pogoje



(b) 3D prikaz napake za periodične robne pogoje



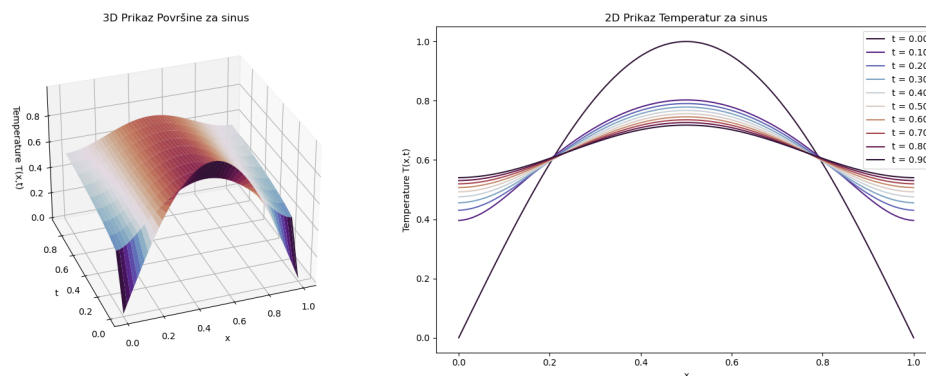
(a) 2D prikaz napake za Dirichletove robne pogoje



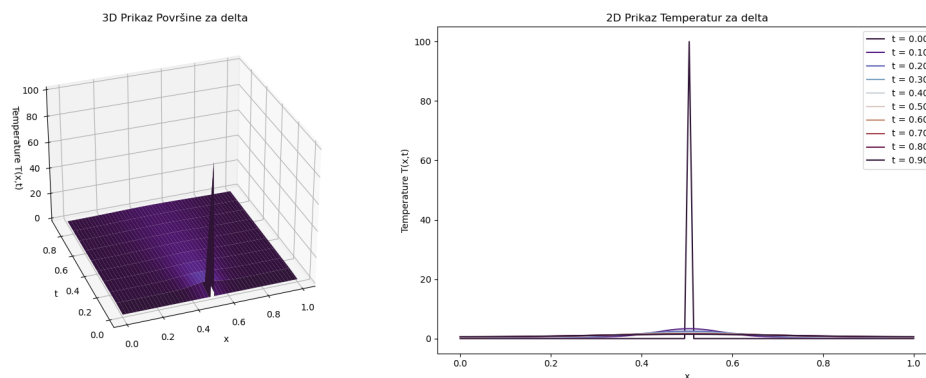
(b) 3D prikaz napake za Dirichletove robne pogoje

2.5 Dodatna naloga

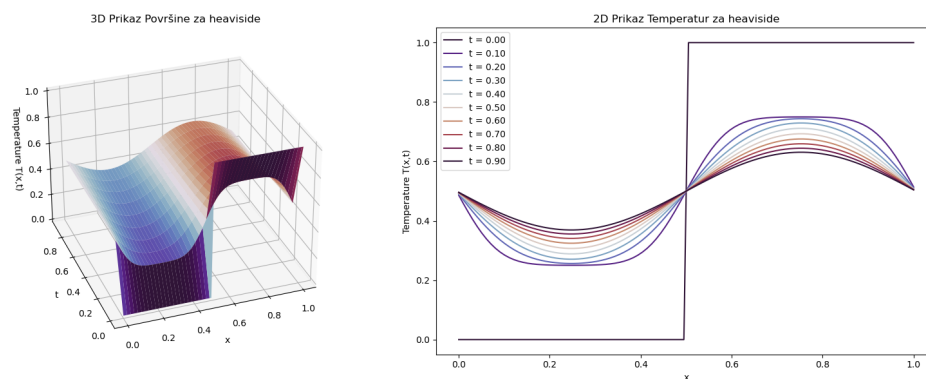
V tem odstavku sem si pogledal še nekaj rešitev difuzijske enačbe, kjer sem za začetno vrednost vzel nekaj najbolj uporabljenih funkcij. Tu sem vzel le Dirichletove robne pogoje saj mi je zmanjkalo časa za periodične robne pogoje. upam da mi boste lahko oprostili. Za vse grafe sem uporabil Fourierovo metodo.



(a) Graf rešitve za začetni pogoj $f(x) = \sin(\pi x/a)$



(b) Graf rešitve za začetni pogoj $f(x) = \delta(x - a/2)$



(c) Graf rešitve za začetni pogoj $f(x) = \Theta(x) - a/2$

Slika 4: Kombinirani grafi za Dirichletove pogoje

3 Zaključek

Pri tej nalogi sem imel precej težav s pravilno implementacijo robnih pogojev. S težavami sem se tudi soočal pri kolokacijski metodi. Pri tej metodi sem dobil veliko prevelike napake in sem se je odločil raje sploh ne priložiti je pa na voljo v datoteki koda.ipynb.