Решение уравнения Пуассона методом быстрого преобразования Фурье

Сотников А.Д, Северилов П.А.

Аннотация

В проекте описывается реализация решения двумерного уравнения Пуассона методом быстрого преобразования Фурье на языке программирования Python 3.

Ключевые слова: уравнение Пуассона, быстрое преобразование Фурье (FFT), уравнения в частных производных, граничные условия.

1 Преобразование Фурье

1.1 DTF

Вспомним, что мы хотим вычислить полином

$$A(x) = \sum_{j=0}^{n-1} a_j x^j$$

с границей степени n в точках $\omega_n^0, \omega_n^1, \omega_n^2, \dots, \omega_n^{n-1}$, которые представляют собой n комплексных корней n-степени из единицы. Пусть полином A задан в форме коэффициентов: $a=(a_0,a_1,\dots,a_{n-1})$. Определим результат y_k , где $k=0,1,\dots,n-1$, с помощью формулы

$$y_k = A(\omega_n^k) = \sum_{j=0}^{n-1} a_j \omega_n^{kj}.$$

Вектор $y = (y_0, y_1, \dots, y_{n-1})$ представляет собой *дискретное преобразование Фурье*.

1.2 FFT

С помощью *быстрого преобразования Фуръе (FFT)*, вычисления можно проводить за $\Theta(n \lg n)$, где n – точная степень 2. В методе FFT применяется стратегия деком-

позиции, в которой отдельно используются коэффициенты полинома A(x) с четными и нечетными индексами:

$$A^{[0]}(x) = a_0 + a_2 x + a_4 x^2 + \dots + a_{n-2} x^{n/2-1},$$

$$A^{[1]}(x) = a_1 + a_3x + a_5x^2 + \dots + a_{n-1}x^{n/2-1}.$$

Такая декомпозиция является основой следующего рекурсивного алгоритма FFT:

Algorithm 1 Recursive-FFT(a)

```
1: n = a.length
                             // n является степенью 2
 2: if n == 1 then
 3:
        return a
 4: end if
 5: \omega_n = e^{2\pi i/n}
 6: \omega = 1
 7: a^{[0]} = ((a_0, a_2, \dots, a_{n-2}))
 8: a^{[1]} = ((a_1, a_3, \dots, a_{n-1}))
 9: y^{[0]} = \text{Recursive-FFT}(a^{[0]})
10: y^{[1]} = \text{Recursive-FFT}(a^{[1]})
11: for k = 0 to n/2 - 1 do
       y_k = y_k^{[0]} + \omega y_k^{[1]}y_{k+(n/2)} = y_k^{[0]} - \omega y_k^{[1]}
13:
        \omega = \omega \omega_n
14:
15: end for
                       // Считаем, что у-вектор-столбец
16: return v
```

Видно, что в строчках 11-15 алгоритм дважды вычисляет выражение $\omega_n^k y_k^{[1]}$. Можно изменить цикл так, чтобы вычислять это значение только один раз, сохраняя его во временной переменной t. Такой прием называется **преобразованием бабочки**. Иллюстрацию работы алгоритма можно посмотреть на рис.1.

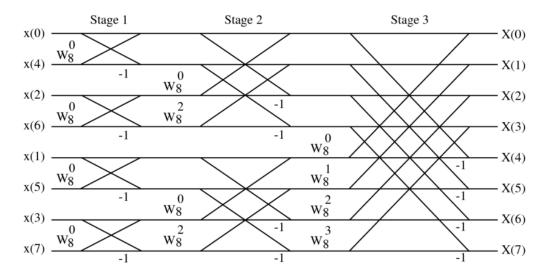


Рис. 1: Схема FFT с преобразованием бабочки.

С использованием данной операции рекурсивный метод можно ускорить и сделать итеративным следующим образом:

Algorithm 2 Iterative-FFT(a)

```
1: n = a.length
                      // n является степенью 2
2: for k = 0 to n - 1 do
      A[rev(k)] = a_k
3:
4: end for
5: for s = 1 to \lg n do
      m=2^s
6:
      \omega_m = e^{2\pi i/m}
7:
      for k = 0 to n - 1 by m do
8:
        \omega = 1
9:
        for j = 0 to m/2 - 1 do
10:
           t = \omega A[k + j + n/2]
11:
           u = A[k+j]
12:
           A[k+j] = u+t
13:
           A[k+j+m/2] = u - t
14:
           \omega = \omega \omega_m
15:
        end for
16:
      end for
17:
18: end for
19: return A
```

Полученный алгоритм можно ускорить, распараллелив вычисления на $\lg n$ этапов, на каждом из которых выполняется n/2 операций бабочки.

2 Решение уравнения Пуассона с помощью FFT

Быстрое преобразование Фурье может быть использовано для решения эллиптических дифференциальных уравнений в частных производных в измерениях разной размерности. Основная идея очень проста. Рассмотрим одномерное уравнение

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \rho(x).$$

Выразим f и ρ через их преобразование Фурье:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k)e^{ikx}dk$$

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \sigma(k) e^{ikx} dk.$$

Решение задается обратным преобразованием

$$f(x) = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \frac{\sigma(k)}{k^2} e^{ikx} dk.$$

Нужно наложить граничные условие, а также указать, что нужно делать, если k=0 под знаком интеграла.

2.1 Граничные условия и типы преобразований

Граничные условия определяют соответствующий тип преобразования Фурье для решения задачи. Некоторые задачи, которые решал Фурье, требуют синус-преобразования, другие — экспоненциального.

Рассмотрим область $0 \le x \le L$ в одномерном случае. Выберем решетку из N одинаково расположенных точек $x_n = nL/N, \ n = \overline{0,N-1}.$

Коэффициенты комплексного преобразования Фурье функции f(x) имеют вид

$$g_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} \omega^{kn} f_n, \quad \omega = e^{2\pi i/N}.$$

Обратное преобразование

$$f_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} \omega^{-nk} g_k$$

будет периодическим по x_n с периодом L. Поэтому, комплексное преобразование Фурье подходит для задач, которые удовлетворяют периодическим граничным условиям.

Если задача включает в себя граничные условия Дирихле, например, f(0) = f(L) = 0, то целесообразнее использовать синус-преобразование Фурье

$$f_n = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{k=1}^{N-1} sin\left(\frac{\pi nk}{N}\right) g_k.$$

Если задача включает в себя граничные условия Неймана, целесообразно использовать косинус-преобразование Фурье. На N+1 точках решение имеет вид

$$f_n = \frac{1}{\sqrt{2N}} [g_0 + (-1)^n g_N] + \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{k=1}^{N-1} \cos\left(\frac{\pi nk}{N}\right) g_k.$$

Обратим внимание на то, что косинус- и синус-преобразования — это не действительная и мнимая части сложного экспоненциального преобразования. Это связано с тем, что функции sin(x), cos(x) и e^x по отдельности образуют полные множества, хотя и с разными граничными условиями. Базовый фазовый коэффициент для синус- и косинус-преобразований равен π/N по сравнению с $2\pi/N$ для экспоненциального, т.к. для них требуется вдвое больше точек на сетке.

2.2 Уравнение Пуассона в 2D

Рассмотрим дискретную форму уравнения Пуассона

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\varphi(x,y) \simeq \frac{1}{h^2}[\varphi_{j+1,k} + \varphi_{j-1,k} + \varphi_{j,k+1} - 4\varphi_{j,k}] = -\rho_{j,k}$$

на сетке $N \times N$ в области $0 \le x,y \le 1$ с заданной плотностью заряда. Пусть точечный заряд находится в центре рассматриваемой области.

Для простоты, наложим периодические граничные условия, чтобы можно было использовать экспоненциальное FFT для решения.

Дискретное преобразование Фурье является линейной операцией, поэтому мы можем применять его отдельно в направлениях x и y, и не имеет значения, в каком порядке выполняются преобразования.

Коэффициенты FFT в 2D:

$$\tilde{\varphi}_{m,n} = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{k=0}^{N-1} \omega^{mj+nk} \varphi_{j,k},$$

$$\tilde{\rho}_{m,n} = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{k=0}^{N-1} \omega^{mj+nk} \rho_{j,k}.$$

Обратные преобразования:

$$\varphi_{j,k} = \frac{1}{N} \sum_{m=0}^{N-1} \sum_{n=0}^{N-1} \omega^{-jm-kn} \tilde{\varphi}_{j,k},$$

$$\rho_{j,k} = \frac{1}{N} \sum_{m=0}^{N-1} \sum_{n=0}^{N-1} \omega^{-jm-kn} \tilde{\rho}_{j,k}.$$

Подставляя эти выражения в дискретное уравнение и приравнивая коэффициенты ω^{-mj-nk} , получим

$$\frac{1}{h^2}[\omega^m + \omega^{-m} + \omega^n + \omega^{-n} - 4]\tilde{\varphi}_{m,n} = -\tilde{\rho}_{m,n},$$

что легко решается:

$$\tilde{\varphi}_{m,n} = \frac{h^2 \tilde{\rho}_{m,n}}{4 - \omega^m - \omega^{-m} - \omega^n - \omega^{-n}}.$$

Обратное преобразование Фурье дает искомый потенциал.

3 Реализация

Решение задачи реализовано на языке Python 3 с помощью библиотеки *NumPy* и было протестировано на следующих трех уравнениях:

$$\Delta u = 8\pi^2 \cos(4\pi y)(\cos(4\pi x) - \sin(4\pi x)) - 16\pi^2 (\sin(4\pi x)\cos^2(2\pi y) + \sin^2(2\pi x)\cos(4\pi y))$$
 (1)

$$\Delta u = 6xy(1-y) - 2x^3 \tag{2}$$

$$\Delta u = -2(2y^3 - 3y^2 + 1) + 6(1 - x^2)(2y - 1) \tag{3}$$

Соответствующие аналитические решения, на которых проверялась точность обозреваемого в данной работе метода:

$$u = \sin^{2}(2\pi x)\cos(4\pi y) + \sin(4\pi x)\cos^{2}(2\pi y)$$
$$u = y(1 - y)x^{3}$$
$$u = (1 - x^{2})(2y^{3} - 3y^{2} + 1)$$

Во всех уравнениях граничные условия одинаковы и имеют вид $0 \le x,y \le 1.$

4 Результаты

Рассматриваемая ошибка – среднее квадратичное (MSE) между значениями сетки на точном решении и полученном с помощью FFT.

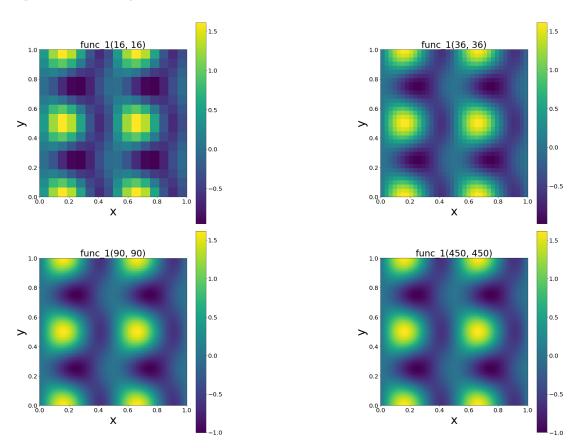


Рис. 2: График зависимости решения уравнения (1) от числа узлов в создаваемой сетке.

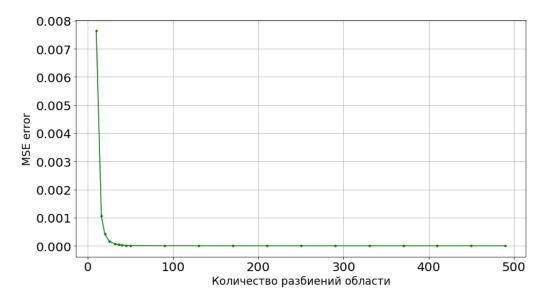


Рис. 3: График зависимости ошибки от количества разбиений области для уравнения (1).

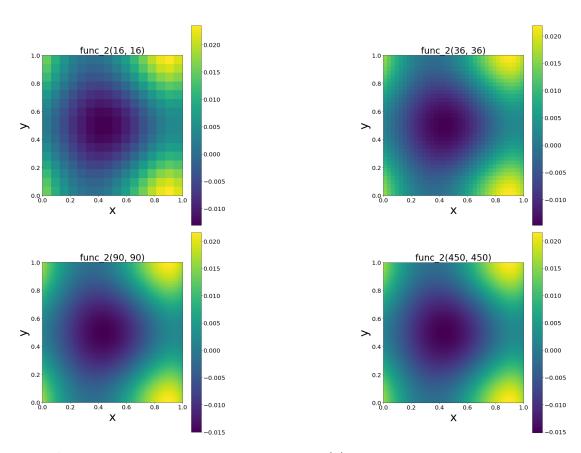


Рис. 4: График зависимости решения уравнения (2) от числа узлов в создаваемой сетке.

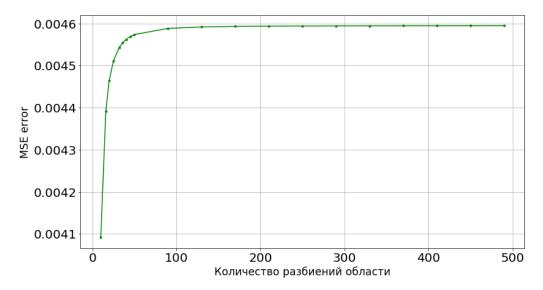


Рис. 5: График зависимости ошибки от количества разбиений области для уравнения (2).

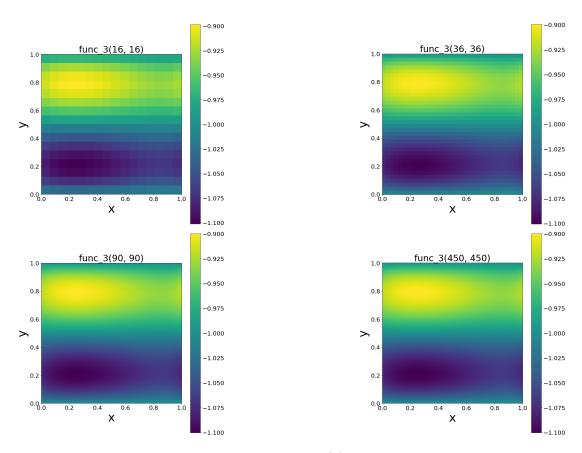


Рис. 6: График зависимости решения уравнения (3) от числа узлов в создаваемой сетке.

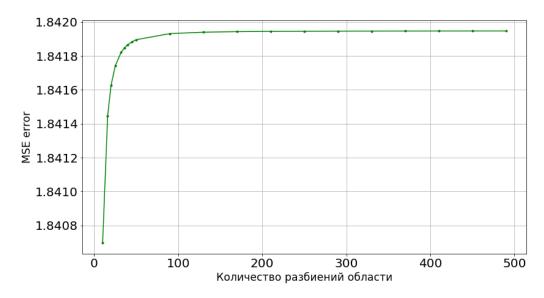


Рис. 7: График зависимости ошибки от количества разбиений области для уравнения (3).

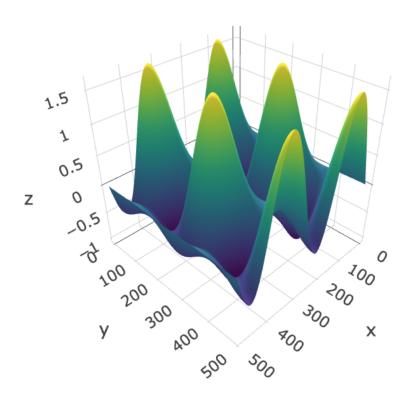


Рис. 8: Иллюстрация решения уравнения (1) в 3D.

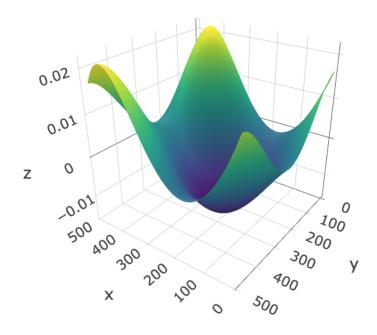


Рис. 9: Иллюстрация решения уравнения (2) в 3D.

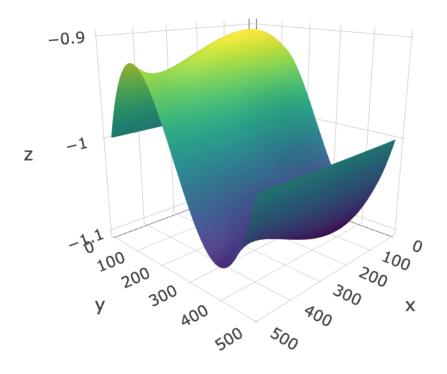


Рис. 10: Иллюстрация решения уравнения (3) в 3D.

5 Заключение

В данной работе нами был рассмотрен способ решения двумерного уравнения Пуассона методом быстрого преобразования Фурье. Анализ ошибки говорит о том, что данный метод крайне точно решает поставленную задачу. При увеличении количества разбиений на сетке ошибка мало менялась.

Список литературы

- [1] Thomas Cormen, Charles E.Leiserson, Ronald L.Rivest, Clifford Stein N. Introduction to Algorithms // MIT, 3rd edition, 2013, Pp.952-962.
- [2] Kasper Ornstein Mecklenburg N.Creating Visual Effects by Solving Partial Differential Equations in Real-Time // Bachelor's thesis, 2014
- [3] Dr. Richard J. Gonsalves N. Solving Poisson's Equation using the FFT // SUNY Buffalo State College, 2009