University of Ljubljana
Faculty of Mathematics and Physics

9. naloga
Spektralne metode za IVP PDE

Ma-Fi praktikum 2021/22

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…).
  - Konkretneje si bomo pogledali kategorijo **spektralnih metod** na zgledu 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…

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

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

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

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

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

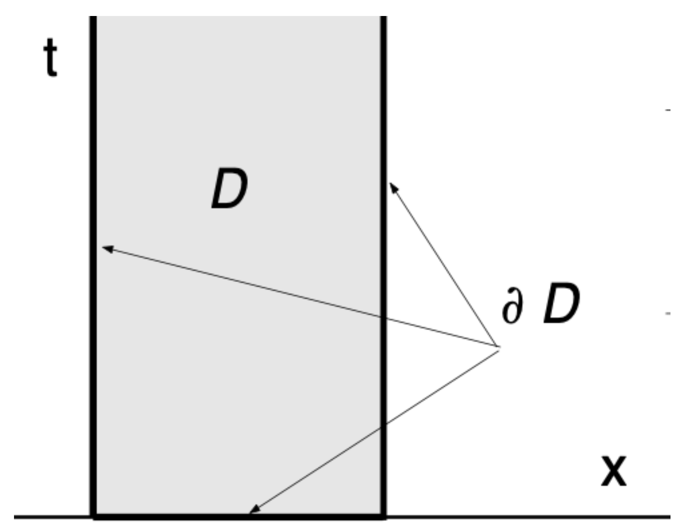
$$\begin{aligned} u(x, t=0) &= f(x) \\ u(x=0, t) &= g_0(t) \\ u(x=a, t) &= g_1(t) \end{aligned}$$

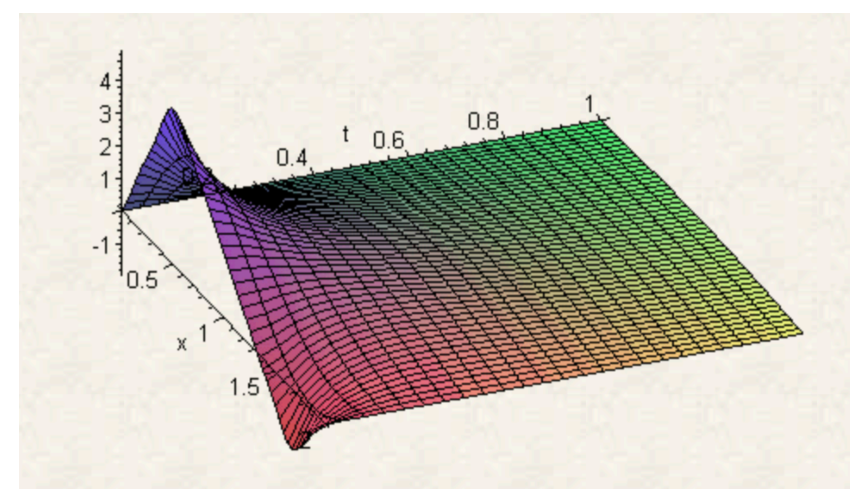
Difuzijska enačba

- 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) ….
  - **Ustrezajo 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):

$$T(x,t) = \sum_{k=0}^{N-1} c_k(t) e^{-2\pi i f_k x}, \qquad f_k = \frac{k}{a} \longleftarrow$$

izbor sicer ne upošteva r.p. …

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

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

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…):

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

Uporaba spektralne metode

- Očitno smo (namenoma) dobili DFT!

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

- Koeficiente H_k očitno dobimo kar z DFT (uporabi FFT!) začetnega pogoja! v DN Gauss ….
  - 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 najelegantnejša 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. Neuman pa soda…
      - Po potrebi uvedemo še premik funkcije za konstanto (preveri konsistenco med r.p. in z.p. !)

Uporaba spektralne metode

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

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

- 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. !

$$\sum_{k=1}^{M} c_k \left(\varphi_k''(x_j) + Q(x_j)\varphi_k(x_j)\right) = R(x_j), \qquad j = 1, \ldots, M$$

- To lahko zapišemo tudi **vektorsko**:

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

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

$$r_j = R(x_j)$$

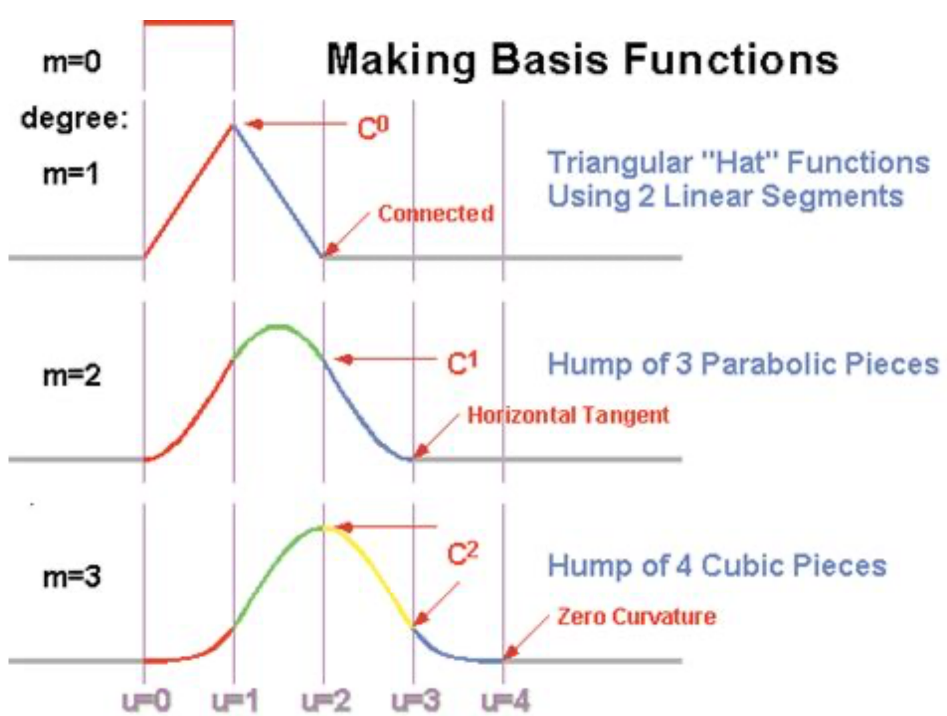
Metoda končnih elementov

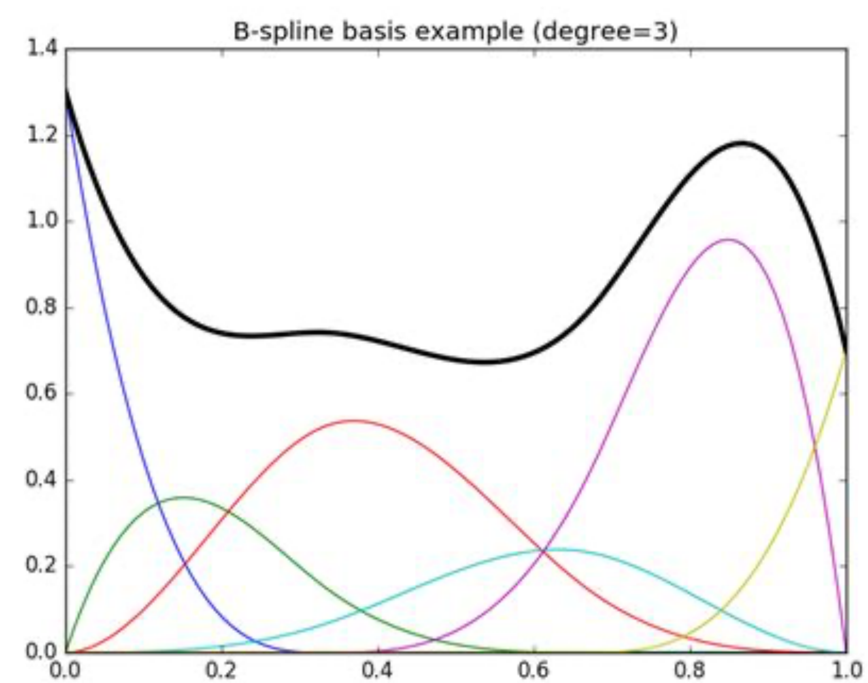
$$A\vec{c} = \vec{r}$$

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

$$r_j = R(x_j)$$

- 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’):

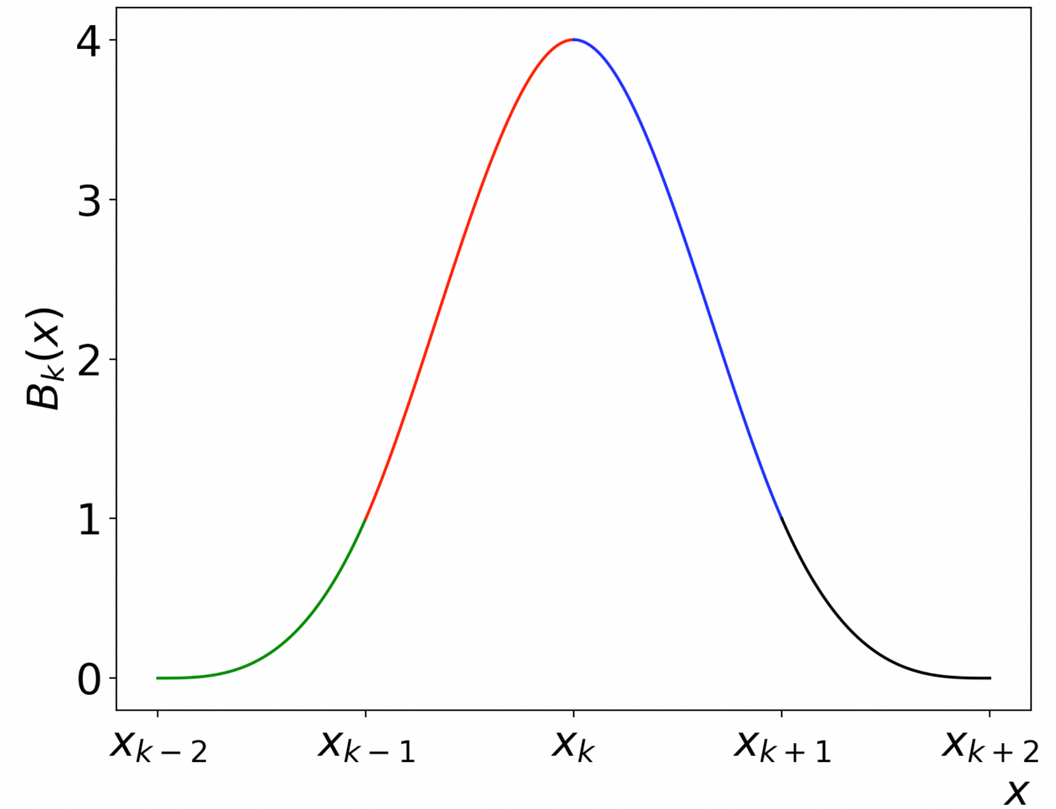




B-splines

- Obstaja več oblik parametrizacije kubičnega B-zlepka:

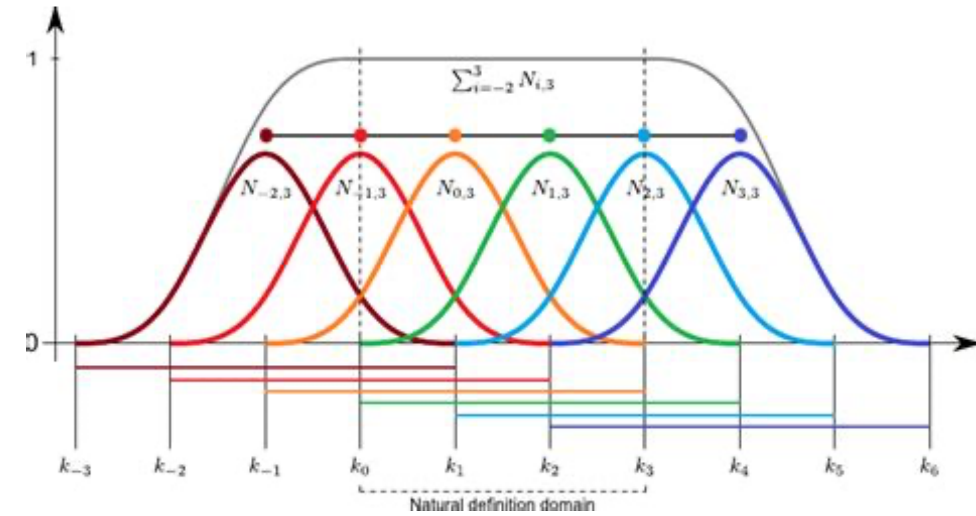
$$B_k(x) = \begin{cases} 0 & \text{če} \quad x \le x_{k-2} \\ \frac{1}{\Delta x^3}(x - x_{k-2})^3 & \text{če} \quad x_{k-2} \le x \le x_{k-1} \\ +\frac{1}{\Delta x^3}(x - x_{k-2})^3 - \frac{4}{\Delta x^3}(x - x_{k-1})^3 & \text{če} \quad x_{k-1} \le x \le x_k \\ +\frac{1}{\Delta x^3}(x_{k+2} - x)^3 -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



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

Vse oblike so ekvivalentne (do konstante…)!

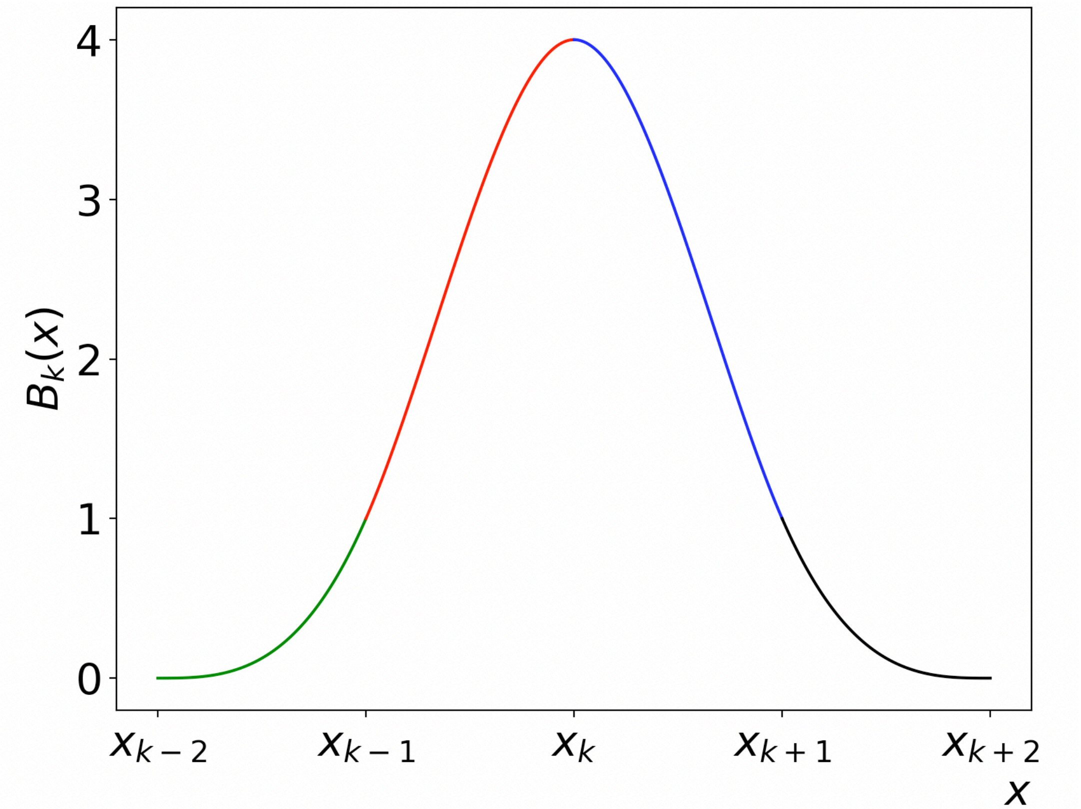
$$B_{3,i}(x) = \frac{1}{6h^3}\begin{cases} (x - x_i)^3, & x \in [x_i, x_{i+1}], \\ h^3 + 3h^2(x - x_{i+1}) + 3h(x - x_{i+1})^2 - 3(x - x_{i+1})^3, & x \in [x_{i+1}, x_{i+2}], \\ h^3 + 3h^2(x_{i+3} - x) + 3h(x_{i+3} - x)^2 - 3(x_{i+3} - x)^3, & x \in [x_{i+2}, x_{i+3}], \\ (x_{i+4} - x)^3, & x \in [x_{i+3},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



B-splines

- Obstaja več oblik parametrizacije kubičnega B-zlepka:

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

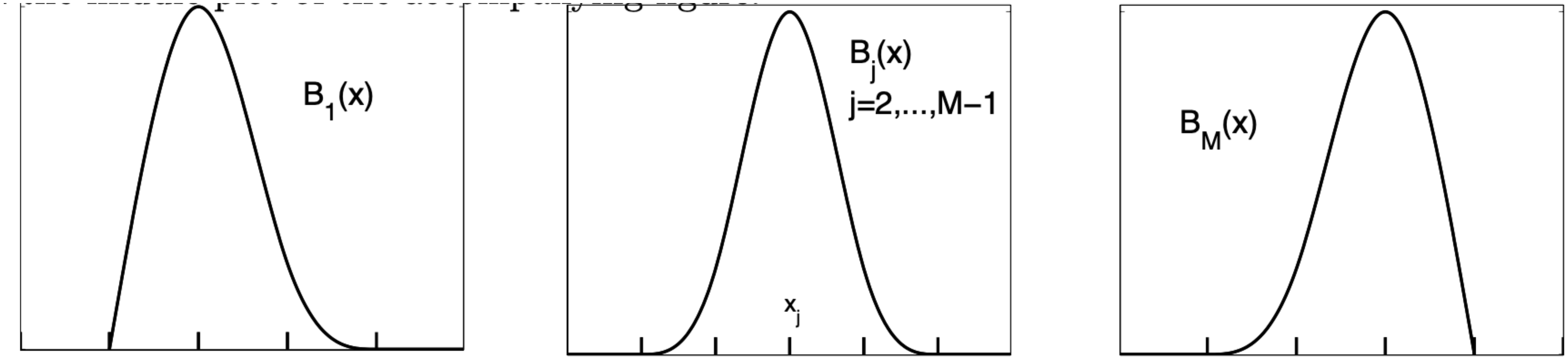


- Zapišimo vrednosti in odvode v posameznih točkah:

	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



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

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

End Slope Spline $s_0'(x_0) = y_0'$ and $s_{m-1}'(x_m) = y_m'$

Periodic Spline $s_0'(x_0) = s_{m-1}'(x_m)$ and $s_0''(x_0) = s_{m-1}''(x_m)$

Not-a-Knot Spline $s_0'''(x_1) = s_1'''(x_1)$ 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.

C. Führer: FMN081-2005

100

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:

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

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

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

- 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:

$$c_{-1}(t)\boxed{-2c_0(t)}+c_{+1}(t)=0$$
$$c_{N-1}(t)-\boxed{2c_N(t)}+c_{N+1}(t)=0$$

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

- Iz prejšnje enačbe:

$$c_{-1}(t)\boxed{+4c_0(t)}+c_{+1}(t)=0$$
$$c_{N-1}(t)+\boxed{4c_N(t)}+c_{N+1}(t)=0$$

- takoj vidimo, da velja:

$$c_0(t)=0 \qquad c_{-1}(t)=-c_1(t)$$
$$c_N(t)=0 \qquad c_{N+1}(t)=-c_{N-1}(t)$$

- S čemer smo naš sistem ustrezno 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…)

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

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

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

B-splines v PDE

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

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

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

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

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

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

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

  (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.