

9. naloga: Spektralne metode za začetne probleme PDE

Gregor Žunič

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 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 -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

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

kjer je

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

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

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

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 eksplisitno Eulerjevo metodo: ob zaporednih časih $n\Delta t$ dobimo

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

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.

Dodatna naloga: Izberi si še kakšen primer začetnih pogojev, recimo:

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

in preizkusi obe metodi.

Dodatek: kubični B -zlepki

Kubični B -zlepki imajo obliko

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

1 Reševanje

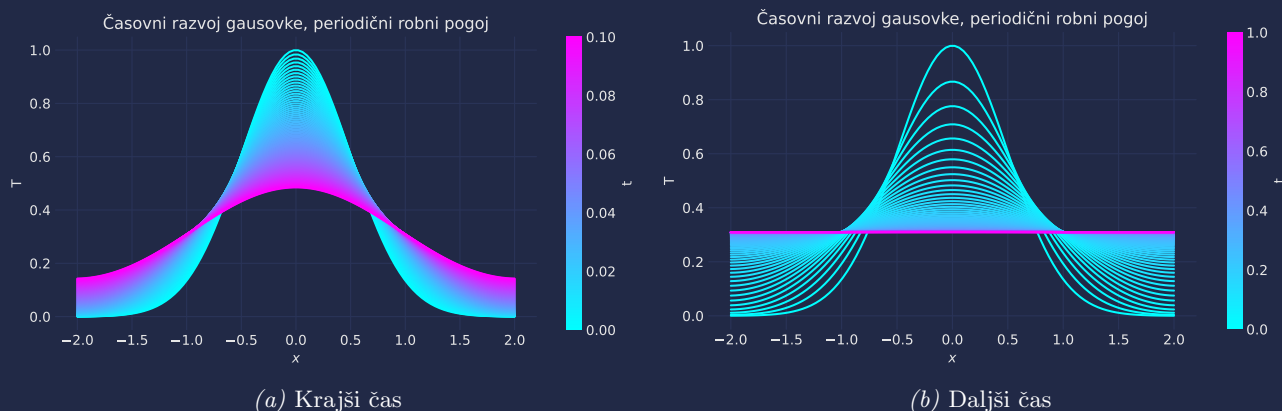
Najprej bom posebej obdelal Fourierovo nato pa še kolokacijsko metodo.

1.1 Fourierova metoda

Za rešitev Fourierove metode je več načinov. Najbolj splošen je seveda, da funkcijo prezrealimo liho ali sodo potem pa naredimo Fourierovo transformacijo in se poskušamo znebiti aliasinga. To nam zna precej zmešati štreme. Po nekaj poskusov implementacije z FFT sem ugotovil, da je čisto isto, če vzamemo za Periodične pogoje diskretno kosinusno transformacijo (fft.DCT) za homogene Dirichletove pogoje pa zgolj naredimo sinusno transformacijo (fft.DST), ki nam prisili, da bo robni pogoj enak 0. Tako je koda za obe metode praktično enaka, zgolj zamenjamo vrstico kode. Vredno je poudariti še, da se je integracija bolj smiselna z ODEINT kot z Eulerjevo metodo.

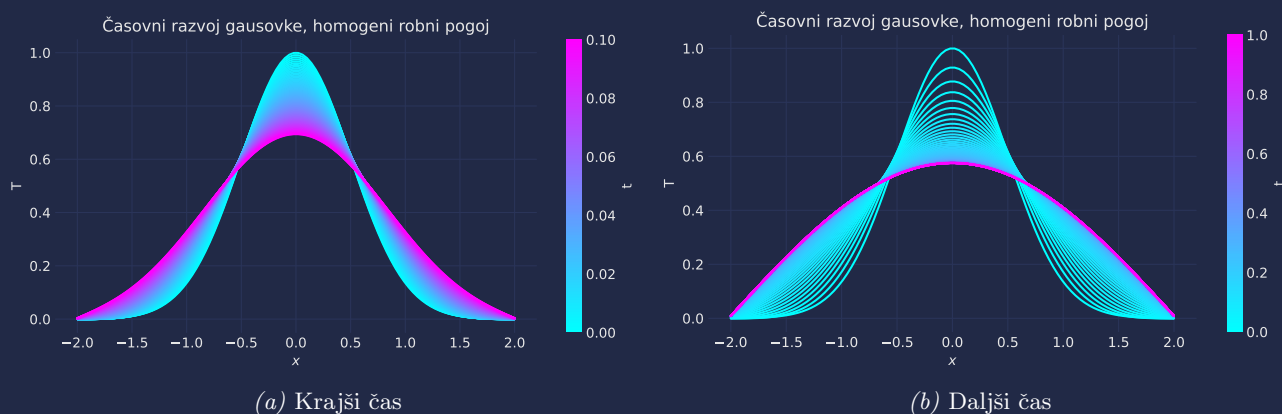
1.1.1 Periodični robni pogoji

Treba je še poiskati neke primerne brezdimenzijske parametre. Naš cilj je zgolj ugotoviti kakšno je obnašanje, zato poiščem parametre, da bodo grafi zgledni. Recimo, da je kar $D = 1$ ter območje od -2 do 2. Da bo gausovka v takem območju primerna lahko vzamemo $\sigma = 0.5$.



Graf. 1: Razvoj gausovke s periodičnimi robnimi pogoji. Narisana sta dva, da še bolj povdarim potek. Opazimo lahko, da se pri sinusnih robnih pogojih postavi enakomerna temperatura.

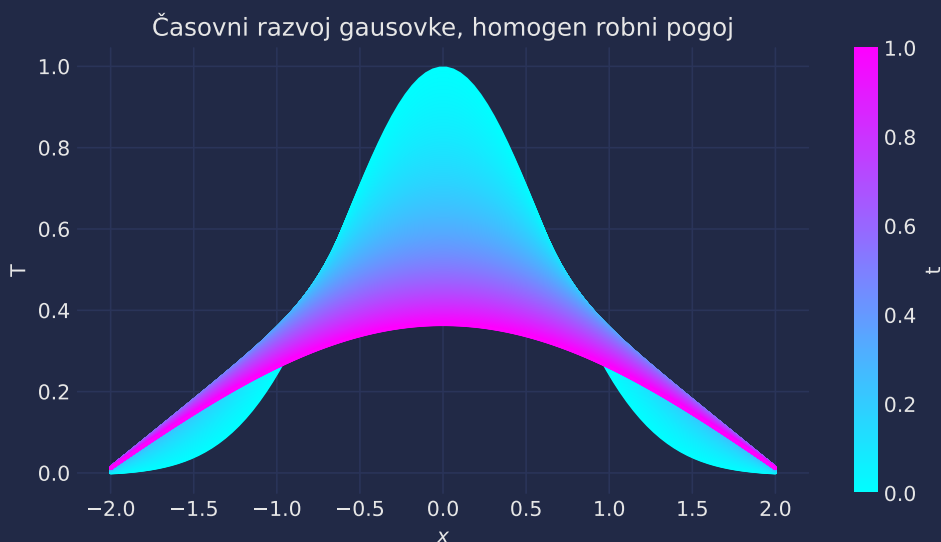
1.1.2 Neperiodični robni pogoji



Graf. 2: Razvoj gausovke s homogenimi robnimi pogoji. Narisana sta dva, da še bolj povdarim potek. Opazimo da dobimo sinus nakoncu.

1.2 Kolokacijska metoda

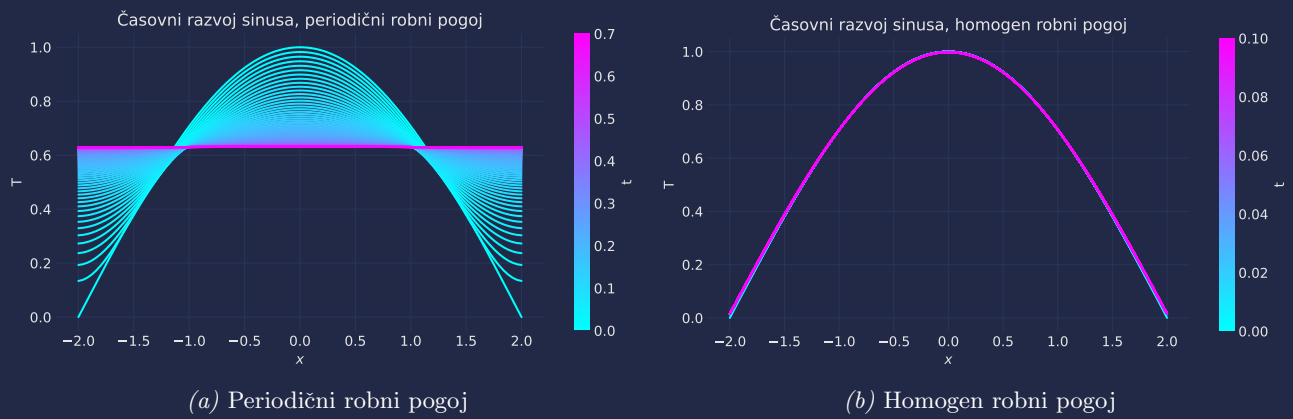
Kolokacijska metoda je v teoriji precej časovno precej zahtevnejša kot Fourierova, ker moramo izračunati inverz matrike. Res pa je, da moramo to storiti samo enkrat, kar v bistvu nakoncu koncov nima zares veze. Moramo pa tudi paziti, da imamo množenje matrik, kar zna biti bolj zahtevno. Ko izračunamo inverz matrike A in pomnožimo z B lahko rezultat propagiramo ter dobimo naslednji graf, ki je popolnoma enak kot pri Fourierovi metodi.



Graf. 3: Kolokacijska metoda izračuna homogenih robnih pogojev. Graf konvergira enako kot pri Fourierovi metodi.

2 Dodatna - sinusni začetni pogoji

Razvoj sinusnega robnega pogoja je precej trivialen proces, posebej ko imamo že narejene funkcije. Tako samo namesto gausovke izračunamo sinus in izračunamo časovni razvoj.



Graf. 4: Razvoj sinusa s homogenimi robnimi pogoji. Obnašanje je enako kot prit Gausovski.

3 Komentar in zaključek

Vsi grafi se ujemajo pri metodah in še fizikalno ima seveda smisel, ker nimamo nobenih izvorov. Seveda je to zgolj teoretično, ker toploto ne moremo zadržati v palici (naprimer). Pri nalogi sem se malce predolgo ukvarjal s tem, da sem sprogramiral B-zlepke, da bi si jih narisal, kasneje pa ugotovil, da jih zares na potrebujem :)