

9. naloga: Spektralne metode za začetne probleme PDE

Samo Krejan, 28231092

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 algebrajskih 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 izvorov 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 eksplisitno 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

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

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

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

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 eksplicitno 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

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

1 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.

Pri obeh delih naloge (in kasneje pri dodatni nalogi), sem si izbral konstante: $D = 0.5$, $a = 1$ in $\sigma = a/10$. Kasneje sem dobil tudi idejo, da bi se vsega skupaj lotil z brezdimenzijskimi spremenljivkami; $\tau = Dt/a^2$ in $\xi = x/a$, ki bi difuzijsko enačbo spremenili v:

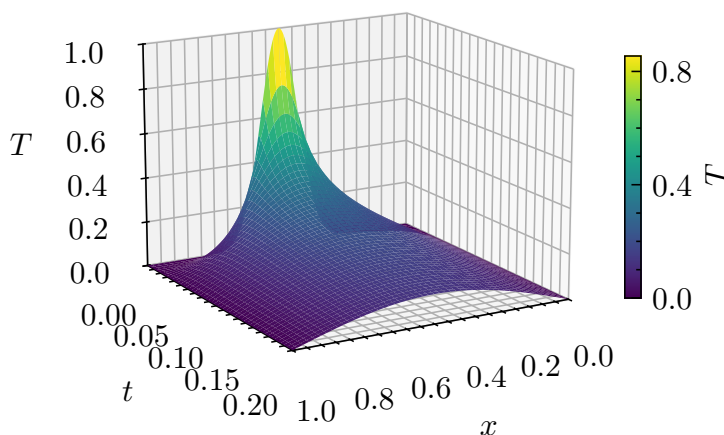
$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2}$$

Tega sem se na žalost spomnil prepozno, a z dobro definiranimi konstantami, to ni bil problem.

1.1 Fourierova metoda

Najprej sem pobrskal po spominu in Python datotekah iz preteklosti, da sem se spomnil, kako se dela z diskretno Fourierovo transformacijo. Nato sem, da sem zadostil robnim pogojem, uporabil dejstvo, da gre liha funkcija lahko simetrično skozi izhodišče in naredl liho razširitev začetnega pogoja. To sem nato uporabil v implementaciji Fourierjeve metode, ki mi je za homogene robne pogoje podala naslednji rezultat 1

Homogeni robni pogoji, Fourierova metoda

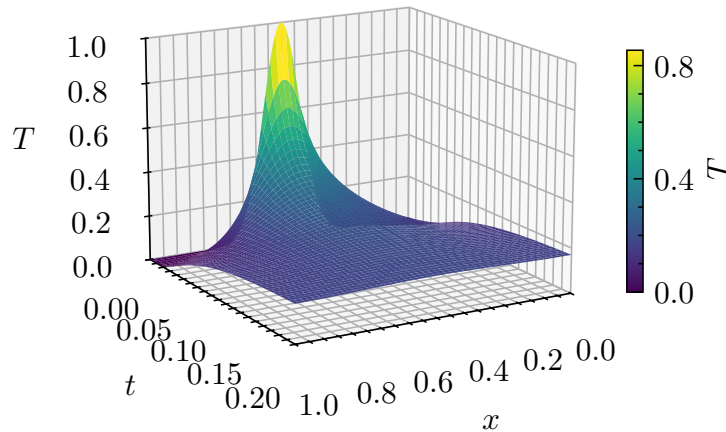


Slika 1: Evolucija temperature skozi čas za homogene robne pogoje - izračunano s Fourierovo metodo

Implementacija Fourierove metode s periodičnimi pogoji je bila še lažja, in definitivno tudi lepše izvedena, vsaj kar se optimizacije tiče (ko sem jo potiskal proti ekstremom je propadla pri kasnejših

N-jih), saj se pravzaprav ni bilo treba ukvarjati z njimi, pač pa so bili avtomatično izpolnjeni. Tako sem za ta primer dobil slednji rezultat 2

Periodični robni pogoji, Fourierova metoda



Slika 2: Evolucija temperature skozi čas za periodične robne pogoje - izračunano s Fourierovo metodo

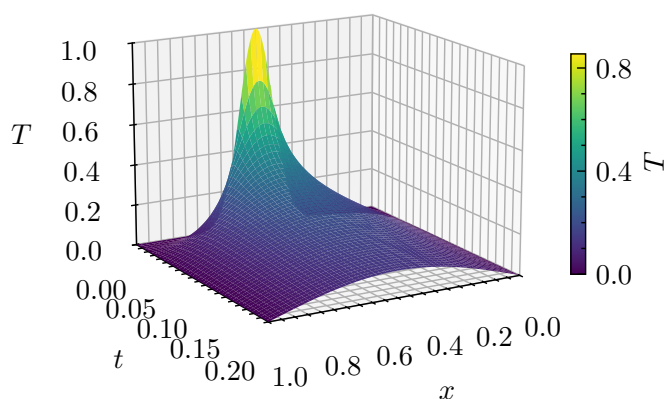
Kvalitativno sta grafa predvsem ob majhnih časih zelo podobna, veliko razliko pa opazimo proti koncu, ko homogeni robni pogoji očino stremijo proti ničli, medtem ko periodični stremijo proti neki "povprečni" vrednosti. To lahko pojasnimo s fizikalno interpretacijo. Namreč, primer s homogenimi robnimi pogoji je očitno lahko interpretiran kot palica med dvema toplotnima rezervarjoma s konstantno temperaturo 0, kamor lahko palica izvrže poljubno količino toplote. Na drugi strani, pa imamo periodične robne pogoje, ki zagotovijo "da ne steče nič toplote iz palice, torej je ekvivalentno temu, da palico vpnemo z idealnim izolatorjem. Očitno se torej palica zgolj termalizira.

1.2 Kolokacijska metoda

Za Fourierovo sem implementiral še kolokacijsko metodo. Implementacija le te je bila preprostejša od Fourierjeve, čepraj je potrebovala več pisanja. Pravzaprav sem preprosto sledil receptu. Morda je sicer razlog za dejstvom, da se mi je kolokacijska implementacija zdela lažja, tudi ta, da sem videl sošolčevo implementacijo, tako da sem imel precej dobro idejo o tem, kaj je treba narediti še predno sem se lotil dela sam.

Kakorkoli že, s kolokacijsko metodo sem dobil slednje rezultate 3

Homogen robni pogoj, Metoda končnih elementov

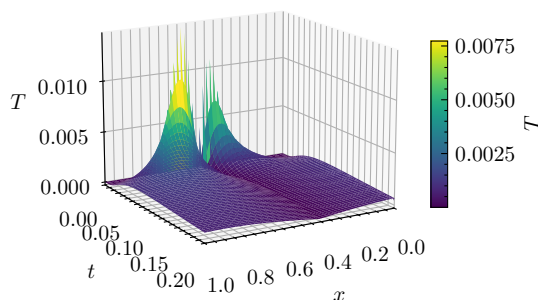


Slika 3: Evolucija temperature skozi čas za homogene robne pogoje - izračunano s kolokacijsko metodo

1.3 Primerjava metod

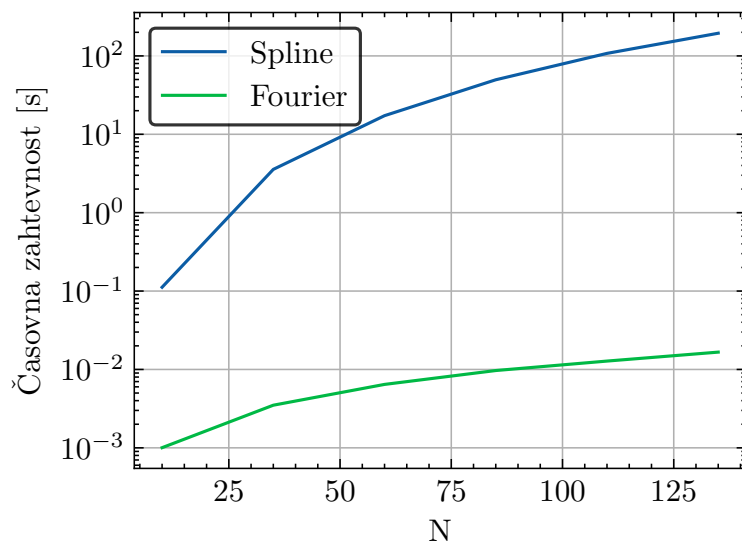
Na prvi pogled sta rezultata obeh metod zelo podobna, če ne celo identična, a podrobna analiza pokaže, da temu ni tako. Če na enak način kot smo narisali potek časovnega profila skozi čas, narišemo tudi razliko med rezultatoma obeh metod, dobimo slednji rezultat 4

Abs. razlika med Fourierovo metodo in metodo končnih elementov

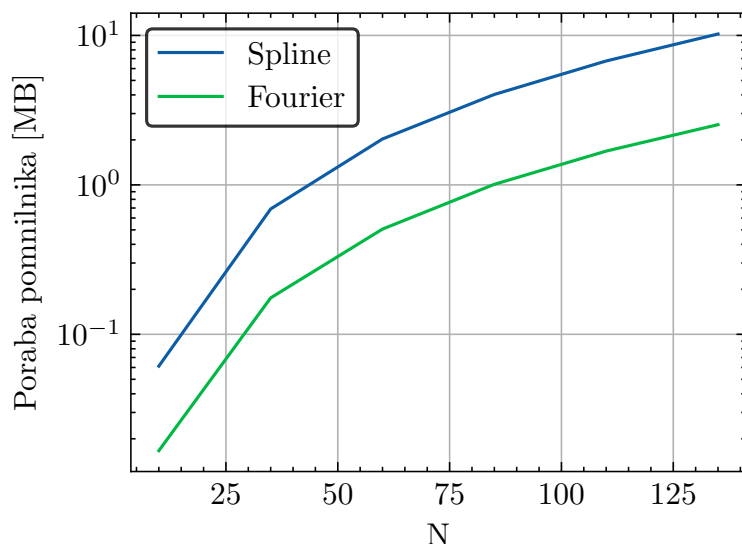


Slika 4: Razlika temperaturnega profila skozi čas med Fourierovo in kolokacijsko metodo

Vidimo, da se razlikujeta za največ 0.01 pri $N = 100$, kar je relativno vredno. Občutljive razlike med metodama opazimo šele ko merimo porabljen čas in spomin, ki ga vsaka izmed metod rabi pri določenem N . Rezultata teh meritev sem prikazal na grafih 5 in 6.



Slika 5: Primerjava potrebnega časa v odvisnosti od N za obe metodi



Slika 6: Primerjava potrebnega spomina v odvisnosti od N za obe metodi

Vidimo, da čeprav imata metodi enako časovno in spominsko asimptomatsko zahtevnost, je Fourierova občutno boljša, sploh kar se tiče potrebnega časa. Tu je seveda potrebno poudariti, da to dejstvo velja specifično samo za mojo implementacijo, ki je po vsej verjetnosti sub-optimalna. Kolokacijska metoda uporabi tudi več nativnega Pythona, kar verjetno že samo po sebi precej upočasni zadevo. Poleg tega moram poudariti tudi, da je to moja prva izkušnja z merjenjem porabe pomnilnika, za kar sem uporabil v Python vgrajeno orodje 'tracemalloc', ki naj bi merilo le spomin dodeljen objektom, ki jih med komando 'start' in 'stop' ustvari Python. Ker nisem dovolj več nisem popolnoma prepričan, da je to pravilna metoda, za dano situacijo, a od tu naprej predpostavljam, da je.

2 Dodatna naloga

Izberi si še kakšen primer začetnih pogojev, recimo:

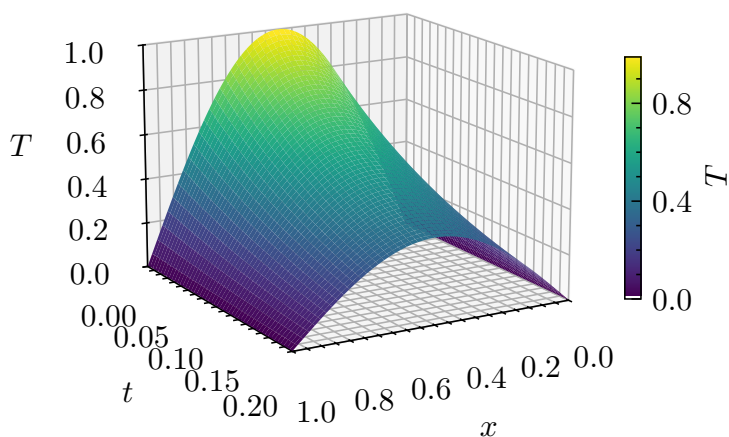
$$T(x, 0) = f(x) = \sin(\pi x/a)$$

in preizkusi obe metodi.

2.1 Fourierova metoda

Ker sem imel metodo že implementirano, ni ostalo veliko dela, le zamenjati je bilo potrebno začetne pogoje, in tako sem dobil slednji rezultat 7

Homogeni robni pogoji, Fourierova metoda



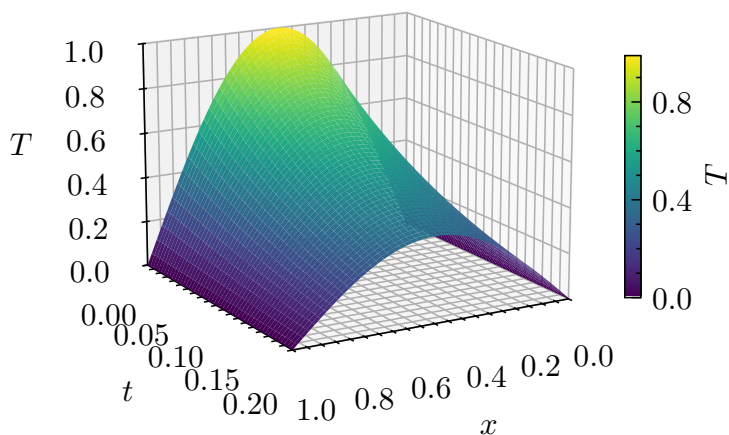
Slika 7: Evolucija temperature skozi čas za homogene robne pogoje - izračunano s Fourierovo metodo

Rezultat je kvalitativno približno točno to, kar bi pričakovali. Edini detajl, ki se mi je zdel nekoliko neintuitiven je ta, da vidimo nekako le nižanje temperature, ne pa tudi širjenja nje v stran, kot smo to opazili pri Gaussovem začetnem pogoju.

2.2 Kolokacijska metoda

Tudi s kolokacijsko metodo nisem imel preveč dela, saj je bilo spet potrebno le spremeniti začetne pogoje.

Homogeni robni pogoji, Fourierova metoda



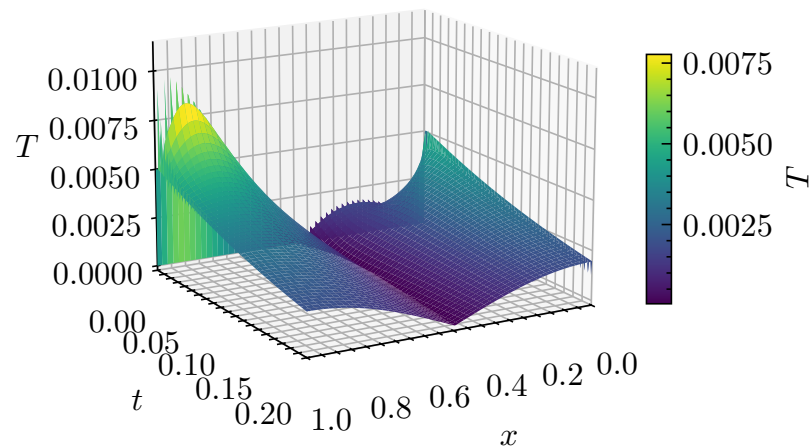
Slika 8: Evolucija temperature skozi čas za periodične robne pogoje - izračunano s Fourierovo metodo

Na ta način sem dobil rezultat, ki je seveda kvalitativno identičen rezultatu s Fourierovo metodo 8.

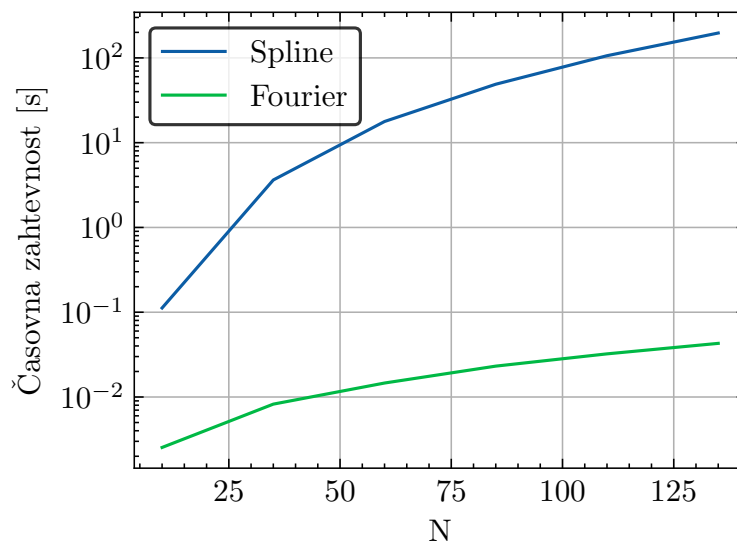
2.3 Primerjava metod

Tako kot pri prvem delu naloge, sem tudi tokrat primerjal metodi skozi tri metrike: natančnost 9, čas 10 in spomin 11. O rezultatih, bi lahko napisal točno iste besede kot sem jih že v prvem delu naloge, za to se na tej točki raje ne bom ponavljal.

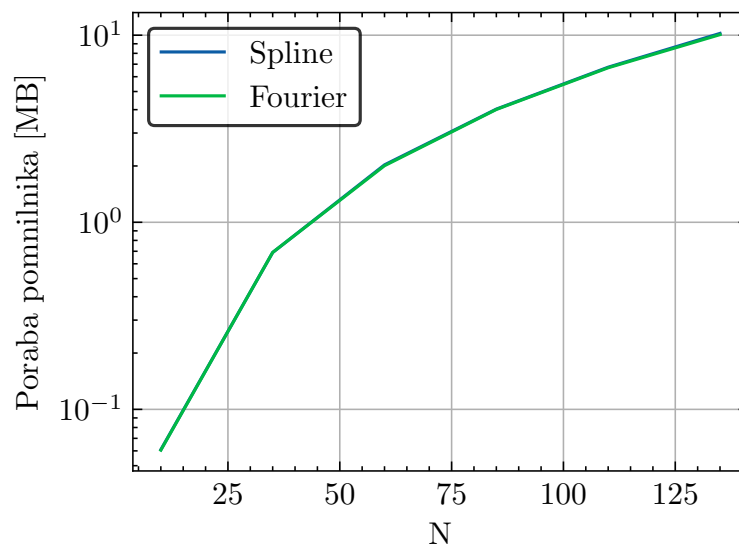
Abs. razlika med Fourierovo metodo in metodo končnih elementov



Slika 9: Razlika temperaturnega profila skozi čas med Fourierovo in kolokacijsko metodo



Slika 10: Primerjava potrebnega časa v odvisnosti od N za obe metodi



Slika 11: Primerjava potrebnega spomina v odvisnosti od N za obe metodi

3 Zaključek

Naloga mi je bila všeč, sploh Kolokacijska metoda se mi je zdela zelo elegantna, za to mi je bilo kar nekoliko žal, ko jo je premagala Fourierova. Saj mi je tudi Fourierova zelo všeč, samo zdi se mi nekoliko preveč uporabljena. Mogoče bi bolj užival v njej, če ne bi hodil k Mafiji.

Nalogo sem izkoristil tudi, da sem se naučil nekaj novih zadev, med drugim tudi nekaj o merjenju porabe spomina. Ko sem se izobraževal o tem, kako je spomin zapisan v računalniku, sem se spet navdušil nad "low-level" programskimi jeziki, tako da se bom v prihodnosti morda spet poslužil kakšnega takega jezika. Bomo kmalu videli, ali bom odločitev obžaloval :)