

UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
ODDELEK ZA FIZIKO

MATEMATIČNO-FIZIKALNI PRAKTIKUM

9. naloga: Spektralne metode za začetne probleme PDE

Žiga Šinigoj, 28191058

Ljubljana, december 2021

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 diferenčami. 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 iz vrednotimo 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 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

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

2 Naloga

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

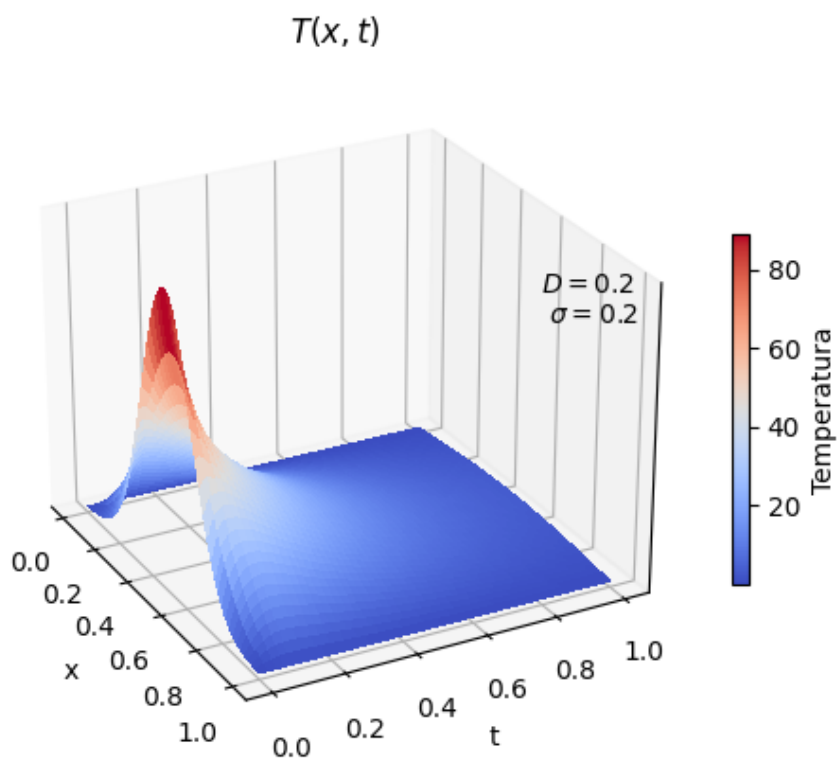
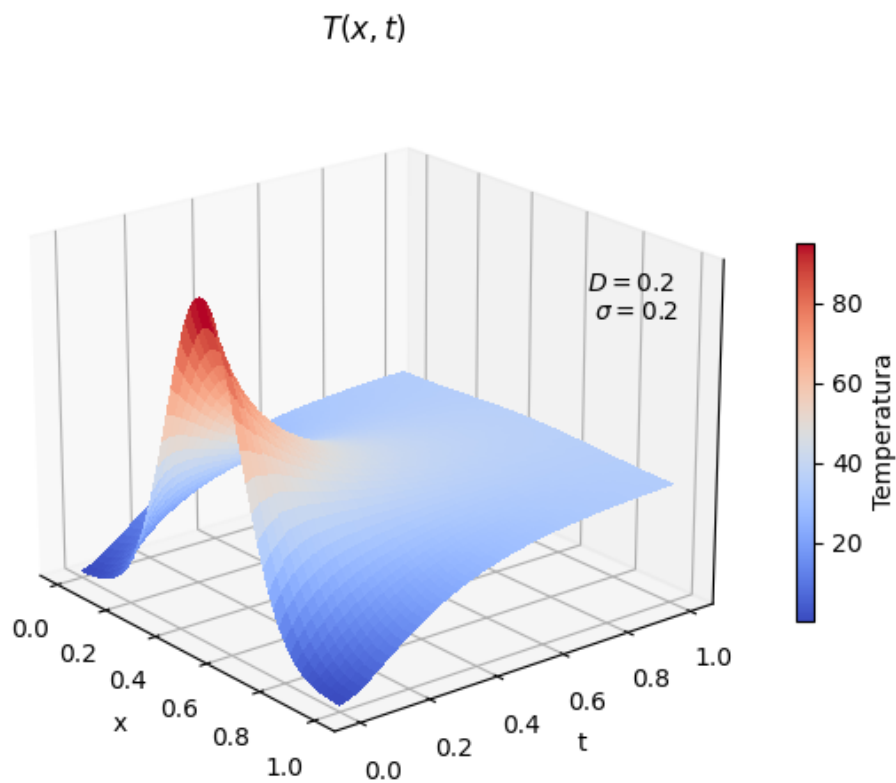
Kubični B -zlepki imajo obliko

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

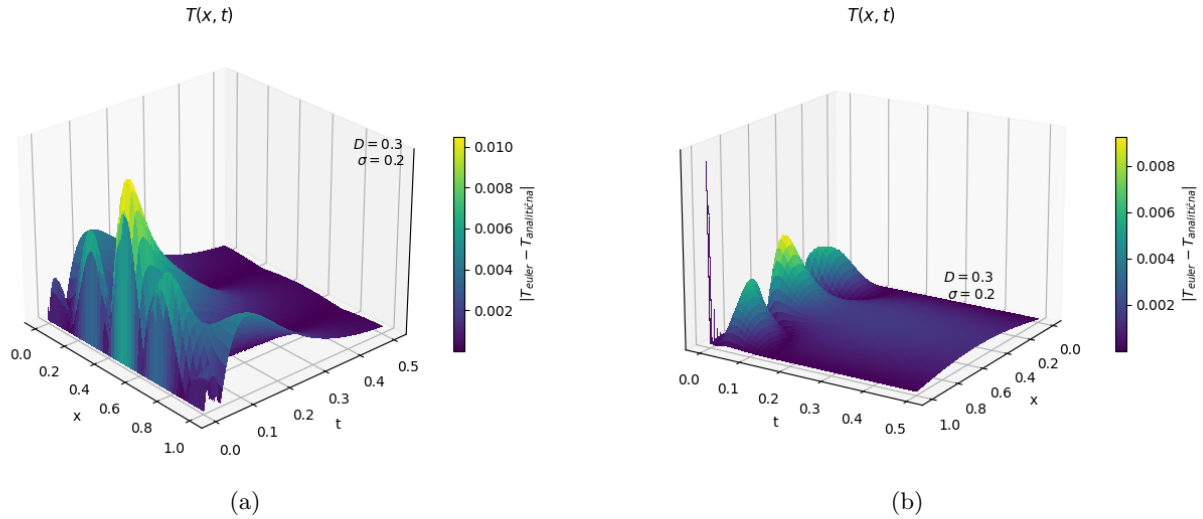
3 Rezultati

3.1 Fourierova metoda

Metodo sem implementiral z uporabo FFT. Začetni pogoj sem najprej transformiral v frekvenčni spekter, tako sem dobil koeficiente T_k . Časovni razvoj koeficientov lahko dobimo analitično ali z npr. Eulerjevo metodo. V našem primeru so T_k krajevne točke v frekvenčnem spektru, katere razvijemo v času. Dano matriko nato po krajevnih vektorjih transformiramo nazaj z obratno FFT. Rešitvi difuzijske enačbe pri danem robnem pogoju prikazujeta sliki 1a in 1b. Za analitično rešitev sem izbral FFT rešitev z analitično rešeno enačbo 2. Za velikost mreže pri analitični rešitvi sem vzel $N_x \times N_t = 5000 \times 5000$ točk. Razlike v rešitvah pri periodičnih pogojih prikazuje slika 2a. Pri periodičnem pogoju sta robni vrednosti temperature enaki, kar pomeni, da temperatura ne uhaja izven našega območja, zato se bo Gaussovsko porazdeljen začetni profil razlezel do neke končne neničelne vrednosti (slika 1a). Pri Dirichletovih pogojih velja, da je temperatura na obeh robovih enaka 0°C , kar pomeni, da toplota odteka iz našega območja, da se robna pogoja ohranjata. V tem primeru bo končna temperatura palice enaka 0° .

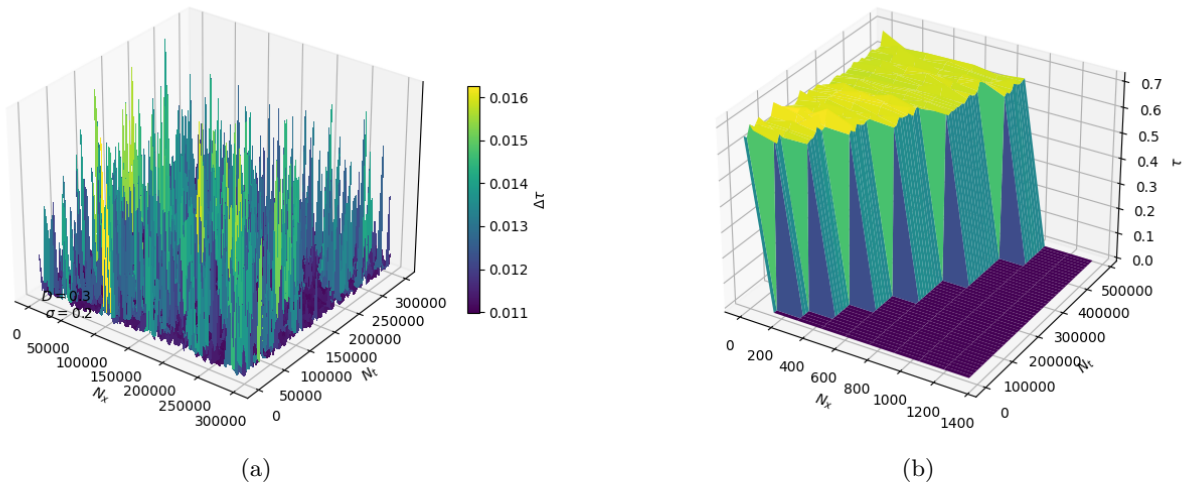


Slika 1: (a) Analitična rešitev difuzijske enačbe na mreži $N_x \times N_t = 1000 \times 1000$, pri periodičnih pogojih. (b) Analitična rešitev difuzijske enačbe na mreži $N_x \times N_t = 1000 \times 1000$, pri Dirichletovih pogojih.



Slika 2: (a) Razlika med analitično rešitvijo in rešitvijo, kjer so koeficienti izračunani z Eulerjevo metodo na mreži $N_x \times N_t = 100 \times 10000$, pri periodičnih pogojih. (b) Razlika med analitično rešitvijo in rešitvijo, kjer so koeficienti izračunani z Eulerjevo metodo na mreži $N_x \times N_t = 100 \times 15000$, pri Dirichletovih pogojih. Mreža ni kvadratna, saj sem moral izpolniti pogoj o stabilnosti Eulerjeve metode.

Če želimo izračunati koeficiente z Eulerjevo metodo je potrebno paziti na območje, kjer je metoda nestabilna. Iz enačbe za stabilnost sledi, da mora biti časovni interval veliko manjši kot dana frekvenca f_k , ki raste kvadratično. Časovno odvisnost analitične rešitve pri periodičnih pogojih, rešitve z Eulerjevo metodo in območje stabilnosti prikazuje slika 3. Iz slike lahko vidim, da je pričakovano z Eulerjevo metodo iskanje rešitve počasnejše. Odvisnosti od števila korakov v času in kraju pa izgleda precej konstantna v obeh primerih, kar je malce presenetljivo, zato sem pogledal vajo Enačba hoda, kjer sem izračunal časovno odvisnost. Tudi tam sem dobil približno konstantno vrednost časovne odvisnosti Eulerjeve metode.

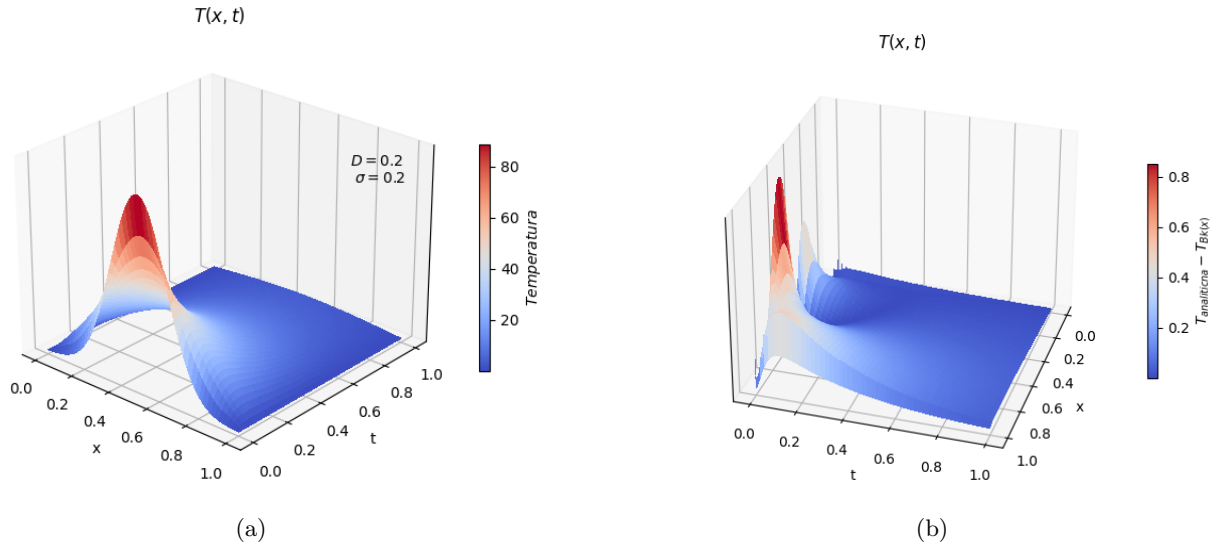


Slika 3: (a) Časovna odvisnost Fourierove metode z analitičnimi koeficienti v odvisnosti od števila korakov v času in kraju. (b) Območje stabilnosti in časovna odvisnost Fourierove metode s koeficienti izračunanimi z Eulerjevo metodo v odvisnosti od števila korakov v času in kraju.

3.2 Kolokacijska metoda

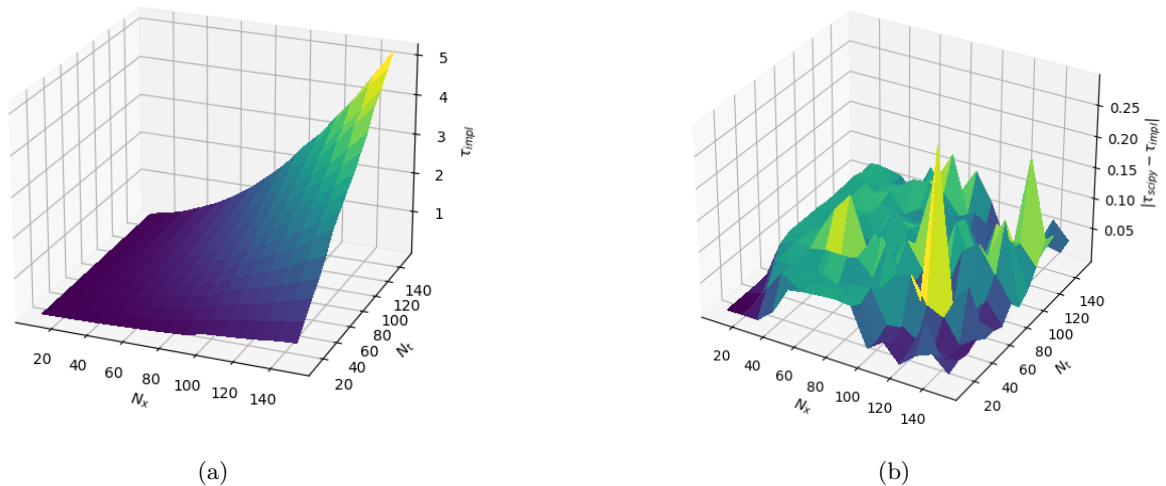
Pri metodi skonstruiral A in B matriko in iz reševanja začetnega trikotnrga sistema dobil začetni vektor. Vsak naslednji vekotr (naslednja rešitev ob času $t + dt$) sem dobil tako, da sem vsakič reševal tridiagonalen sistem, ki nam da pomožno rešitev ob naslednjem času. Za reševanje sistema sem uporabil LU razcep in metodo *solve*, ki sem jo dobil v eni od pomožnih zgledov iz prejšnjih nalog. Za primerjavo sem uporabil še

funkciji iz paketa SciPy in sicer funkcijo za inverz $\text{linalg.inv}()$ in funkcijo za reševanje trikotnega sistema $\text{solve.triangular}()$. Da dobimo rešitev $T(x,t)$ je potrebno izračunati vsoto 3, s katero sem imel nekaj težav. Na koncu sem vzel večjo matriko ničel in v njej izračunal, z reševanjem sistema, vektorje in potem izračunal vsoto, kjer pomnožimo element matrike z zlepkom in seštevamo po krajevni koordinati. Metodo sem uporabil za Dirichletova robna pogoja, saj se v tem primeru precej poenostavi. Rešitev difuzijske enačbe in razlika z analitično rešitvijo Fourierove metode prikazuje slika 4a in b.



Slika 4: (a) Rešitev difuzijske enačbe na mreži $N_x \times N_t = 500 \times 500$, pri Dirichletovih pogojih. (b) Razlika med analitično rešitvijo Fourierove metode in Kolokacijske metode

Pogledal sem še časovne zahtevnosti implementirane metode in metode z uporabo SciPy funkcij (slika 5). Metode so precej počasne za veliko število točk in pričakovano narašča čas z dimenzijo. Tudi z uporabo vgrajenih funkcij ne pridobimo veliko na času.



Slika 5: (a) Časovna zahtevnost implementirane metode v odvisnosti od velikosti mreže. (b) Razlika med časovno zahtevnostjo implementirane metode in metode, kjer so uporabljene vgrajene funkcije iz paketa SciPy.

3.3 Dodatna naloga

Rešeni difuzijski enačbi pri Dirichletovih robnih pogojih in periodičnih robnih pogojih z Fourierovo metodo na mreži 5000×5000 . (slikivpriponki)

4 Zaključek

Pri reševanju PDE se lahko poslužimo obeh metod. Fourierova metoda je po mojem mnenju natančnejša, saj lahko vzamemo veliko točk in ni tako časovno zahtevna. Če ne poznamo analitične rešitve pri koeficientih je potrebno reševati diferencialno enačbo kar povzroči dodatno časovno zakasnitev. Fourierova metoda je nekoliko hitrejša od Kolokacijske, sploh če v slednji vzamemo veliko matriko. Kolokacijska metoda nam da rešitev že ob sorazmerno majhni matriki, medtem ko za Fourierovo potrebujemo večjo matriko če želimo uporabiti FFT. Če uporabimo DFT se metoda upočasni.