

Matematično-fizikalni Praktikum

Spektralne metode za začetne probleme PDE

Tilen Šket, 28221057

Navodila:

- Reši difuzijsko enačbo v eni razsežnosti $x \in [0, a]$ z začetnima pogoje

$$T(x, 0) = T_0 e^{-(x-a/2)^2/\sigma^2} \quad \text{ali} \quad T(x, 0) = T_0 \sin(\pi x/a)$$

(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.

3. januar 2025

Kazalo

1	Uvod	3
1.1	Fourierova metoda	3
1.2	Metoda končnih elementov	4
2	Naloga	5
2.1	Fourierova metoda	6
2.2	Metoda končnih elementov	7
3	Zaključek	10

1 Uvod

Difuzijska enačba je ena izmed najpomembnejših parcialnih diferencialnih enačb v fiziki. Bolj znana primera le te sta Schrödingerjeva in toplotna enačba. Za neko splošno funkcijo u v eni dimenziji ima obliko

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

kjer je D difuzijska konstanta in Q količina, ki je sorazmerna z gostoto izvorov. Poleg same enačbe potrebujemo za reševanje še dva robna in en začetni pogoj, ki nam skupaj enolično določijo rešitev. Žal se takšnega problema pogosto ne da analitično rešiti, v takšnih primerih lahko za numerično reševanje uporabimo spektralne metode. Pri tej nalogi se bomo srečali z dvema, in sicer s Fourierovo metodo in z metodo končnih elementov.

1.1 Fourierova metoda

Oglejmo si primer reševanja brez izvirne toplotne enačbe

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}. \quad (1)$$

Za rešitev vzamemo nastavek

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

kjer je $f_k = \frac{k}{a}$. Torej za iskane funkcije $c_k(t)$ velja

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

To je navadna diferencialna enačba prvega reda, katere rešitev je

$$c_k(t) = H_k e^{-4\pi f_k^2 D t}.$$

Sledi, da lahko začetni pogoj zapišemo kot

$$T(x, t=0) = f(x) = \sum_{k=0}^{N-1} H_k e^{-2\pi i f_k x},$$

kar pa opazimo, da ima natanko obliko diskretne Fourierove transformacije (DFT), če dodamo še diskretno mrežo

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

Vrednosti H_k lahko potemtakem dobimo kar z uporabo FFT algoritma na začetnem pogoju. S pomočjo inverzne Fourierove transformacije na $c_k(t)$ nato dobimo rešitev T ob poljubnem času t .

Naravno vprašanje ob tej izpeljavi je, kako zadostimo robnim pogojem? Zaradi narave Fourierove transformacije, implicitno zadostimo periodičnim robnim pogojem. Dirichletove (Neumannove) pa upoštevamo z liho (sodo) razširitvijo začetnega pogoja.

1.2 Metoda končnih elementov

Za primer si tokrat oglejmo enačbo (1). Ponovno uporabimo mrežo $x_n = n\Delta x = n\frac{a}{N}$. Za nastavek tokrat vzemimo

$$T(x, t) = \sum_{k=1}^M c_k(t) B_k(x) ,$$

kjer je B_k kubični B-zlepki, centriran okoli x_k . B-zlepki imajo obliko

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

Robnim pogojem pa zadostijo v superpoziciji in ne nujno vsak posebej. Poleg robnih pogojev imamo pri tej metodi še tako imenovani *kolokacijski pogoji*. To je pogoj, da se zlepek z rešitvijo ujema v izbranih točkah. Tako dobimo

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

Po lastnostih B-zlepkov, dobimo

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

kar lahko zapišemo matrično kot

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

kjer je

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

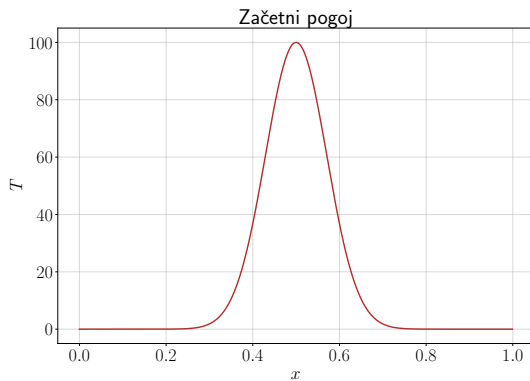
in $\mathbf{c} = (c_1(t), c_2(t), \dots, c_{N-1}(t))^T$. To nam sedaj podaja časovni razvoj rešitve, kar rešujemo recimo z implicitnim Eulerjem

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

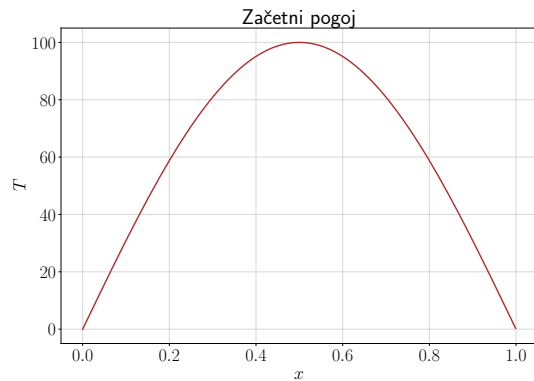
kjer je $\mathbf{A}\mathbf{c}^{(0)} = (f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_{N-1}))^T$.

2 Naloga

Za začetne pogoje vzamimo funkciji iz navodil, s konstantami $T_0 = 100$, $a = 1$, $\sigma = 0, 1$ in $D = 10^{-3}$. Začetna pogoja sta izrisana na sliki 1.



(a) Gaussovski.

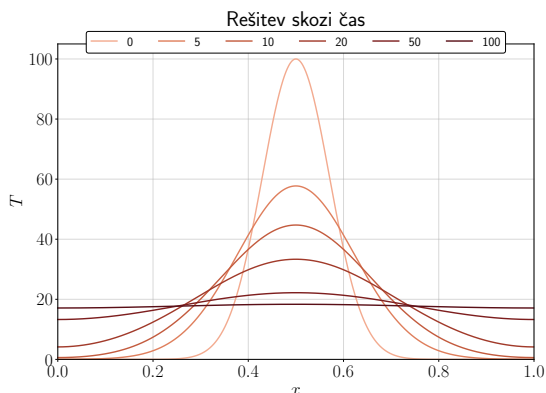


(b) Sinusni.

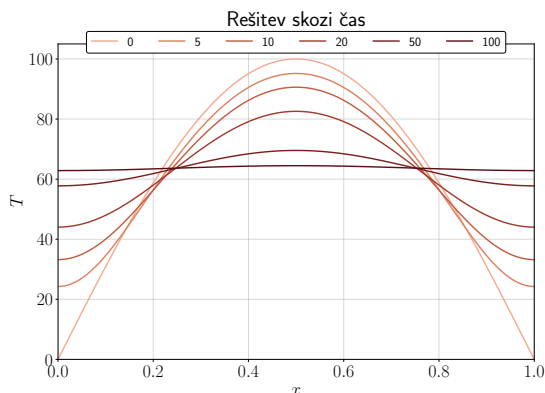
Slika 1: Začetna pogoja.

2.1 Fourierova metoda

Najprej se lotimo reševanja s Fourierovo metodo za periodične robne pogoje, saj le ti pridejo implicitno iz uporabe metode. Rešitve po različnem številu korakov so izrisane na sliki 2. Poročilu pa sta priloženi tudi animaciji rešitve skozi čas `periodicni_exp.gif` in `periodicni_sin.gif`.



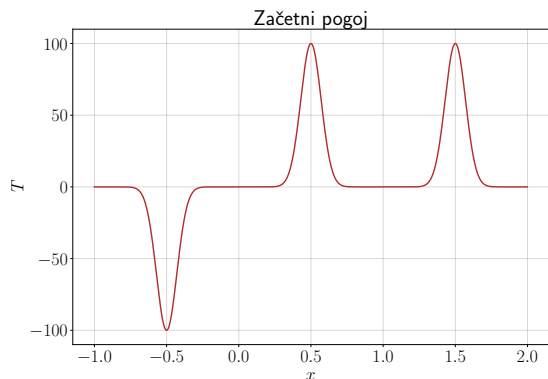
(a) Gaussovski začetni pogoj.



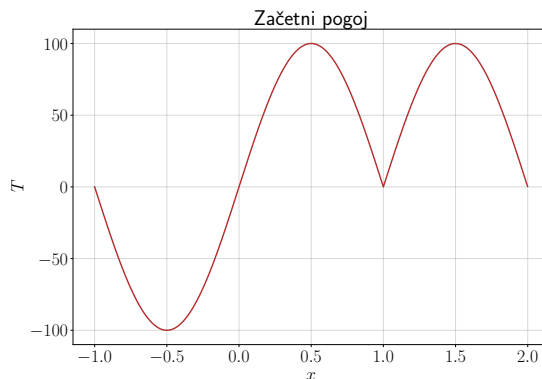
(b) Sinusni začetni pogoj.

Slika 2: Rešitve pri uporabi periodičnih robnih pogojev.

Za zadostitev Dirichletovega ali Neumannovega robnega pogoja, pa moramo začetne pogoje razširiti in zrcaliti. Poglejmo si primer, kjer imamo točki $x = 0$ Dirichletov in v točki $x = a$ Neumannov robni pogoj. Razširitev začetnega pogoja je za oba primera izrisana na sliki 3.



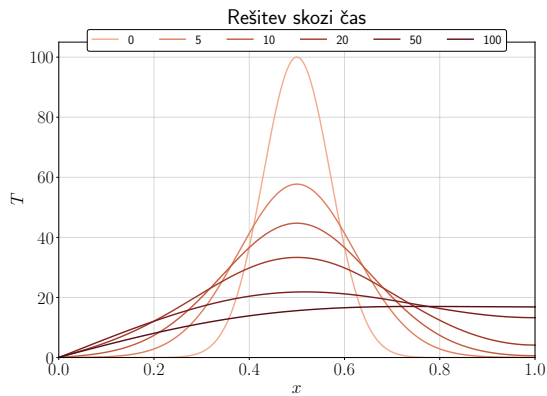
(a) Gaussovski začetni pogoj.



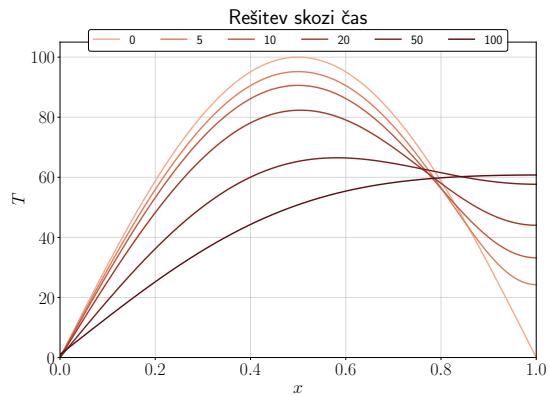
(b) Sinusni začetni pogoj.

Slika 3: Razširitev začetnih pogojev za Dirichletov in Neumannov robni pogoj.

Rešitev takšnih primerov po različnem številu korakov so izrisane na sliki 4. Seveda nas v rešitvi ponovno zanima le območje med 0 in a . Poročilu sta tudi priloženi animaciji rešitve `zrcaljeni_exp.gif` in `zrcaljeni_sin.gif`.



(a) Gaussovski začetni pogoj.



(b) Sinusni začetni pogoj.

Slika 4: Rešitve pri uporabi Dirichletovega in Neumannovega robnega pogoja.

2.2 Metoda končnih elementov

Matriki \mathbf{A} in \mathbf{B} sta $(N-1)$ -dimenzionalni. To je zato, ker imamo poleg notranjih kolokacijskih točk, še robni točki in robni pogoj B-zlepkov. Pri reševanju naloge, si za robni pogoj B-zlepkov izberemo *Natural Spline*, ki pravi

$$\begin{aligned} B_0''(0) &= 0, \\ B_N''(a) &= 0. \end{aligned}$$

To nam da enačbi

$$\begin{aligned} c_{-1} - 2c_0 + c_1 &= 0, \\ c_{N-1} - 2c_N + c_{N+1} &= 0. \end{aligned}$$

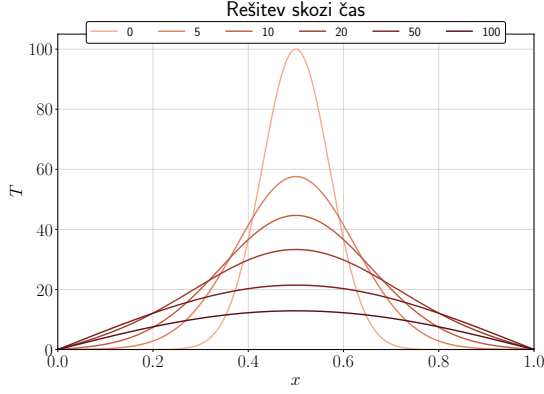
Tej dodajmo še Dirichletova robna pogoja $T(0) = T(a) = 0$, ki proizvedeta

$$\begin{aligned} c_{-1} + 4c_0 + c_1 &= 0, \\ c_{N-1} + 4c_N + c_{N+1} &= 0. \end{aligned}$$

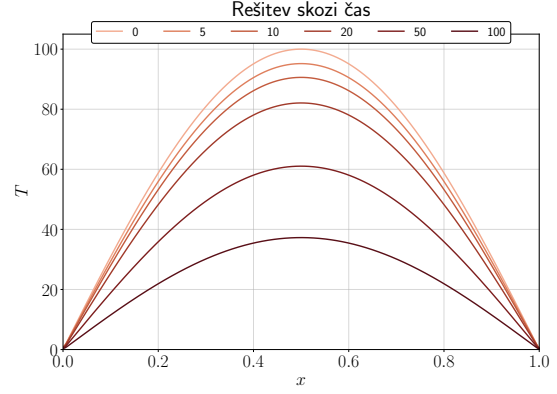
To nam da pogoje za robne točke

$$\begin{aligned} c_0(t) &= 0, & c_{-1}(t) &= -c_1(t), \\ c_N(t) &= 0, & c_{N-1}(t) &= -c_{N+1}(t). \end{aligned}$$

Koeficientom v \mathbf{c} dodamo te pogoje in dobimo rešitve na sliki 5.



(a) Gaussovski začetni pogoj.



(b) Sinusni začetni pogoj.

Slika 5: Rešitve z metodo končnih elementov.

Poglejmo si še Neumannove robne pogoje $T'(0) = T'(a) = 0$, ki nam skupaj z robnima pogojema za B-zlepke data pogoja

$$\begin{aligned} c_{-1}(t) &= c_0(t) = c_1(t) , \\ c_{N-1}(t) &= c_N(t) = c_{N+1}(t) . \end{aligned}$$

Vendar po uporabi teh pogojev opazimo, da se rešitev sistema ne spremeni in še vedno, izven manjše razlike v robnih točkah obnaša enako kot Dirichletova rešitev na sliki 5. Razlog za to je oblika matrik \mathbf{B} in \mathbf{A} . In sicer se za Neumannov robni pogoj, spremenita tudi dva notranja kolokacijska pogoja. Poglejmo si, kako

$$\dot{c}_{N-2}(t) + 4\dot{c}_{N-1}(t) + \dot{c}_N(t) = \frac{6D}{\Delta x^2} (c_{N-2}(t) - 2c_{N-1}(t) + c_N(t)) ,$$

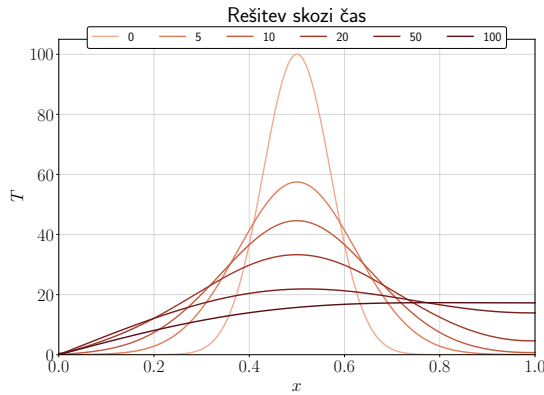
če upoštevamo še dejstvo, da sta $c_N = c_{N-1}$, dobimo

$$\dot{c}_{N-2}(t) + 5\dot{c}_{N-1}(t) = \frac{6D}{\Delta x^2} (c_{N-2}(t) - c_{N-1}(t)) ,$$

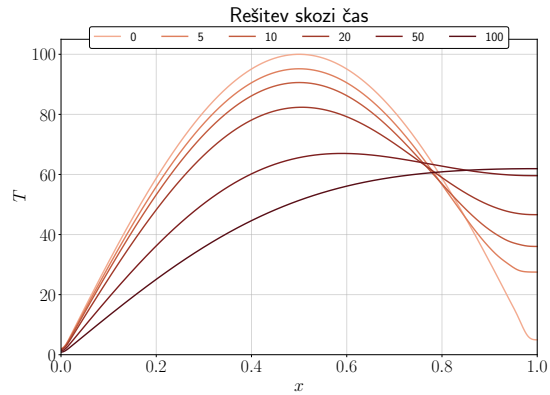
kar matriki spremeni v

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 4 & 1 & & & \\ 1 & 4 & 1 & & \\ & 1 & 4 & 1 & \\ & & \vdots & & \\ & & & 1 & 4 & 1 \\ & & & & 1 & 4 & 1 \\ & & & & & 1 & 5 \end{pmatrix} , \quad \mathbf{B} = \frac{6D}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & 1 & -2 & 1 & \\ & & \vdots & & \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & & 1 & -1 \end{pmatrix} .$$

Če sedaj poskusimo rešiti problem s tako modificiranimi matrikama, dobimo grafa, izrisana na sliki 6. Že od daleč opazimo, da v primeru sinusnega začetnega pogoja, v robovih rešitev ni najboljše. Rešitvi sta tudi animirani kot prilogi tega poročila, v datotekah `fem_neu.gif` in `fem_sin_neu.gif`. Pri animacijah vidimo še več numeričnih napak v obliki nihanja rešitev na robu.



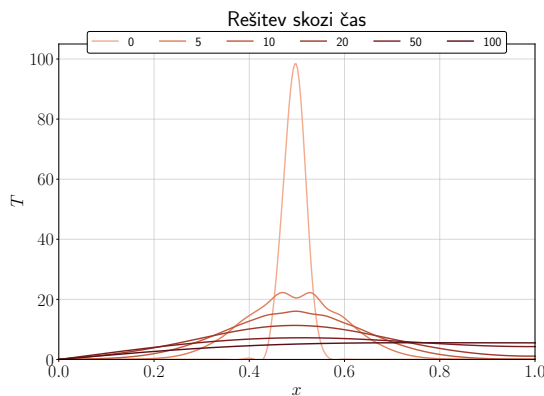
(a) Gaussovski začetni pogoj.



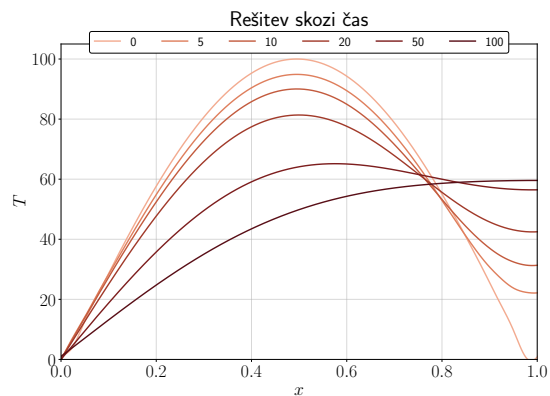
(b) Sinusni začetni pogoj.

Slika 6: Rešitve Dirichletovega in Neumannovega robnega pogoja z metodo končnih elementov.

Kaj pa uporaba razširitve začetnega pogoja in metoda končnih elementov, ali lahko tudi ta dva postopka souporabimo? Odgovor je ja, vendar zgleda metoda precej manj stabilna, saj imata rešitve še veliko več nihanj, ki jih ne pričakujemo (slika 7). Rezultata sta animirana v prilogi, v datotekah `fem_sin_neu_zrc.gif` in `fem_neu_zrc.gif`.



(a) Sinusni začetni pogoj.



(b) Gaussovski začetni pogoj.

Slika 7: Rešitve Dirichletovega in Neumannovega robnega pogoja z metodo končnih elementov in zrcaljenjem za zadostitev robnih pogojev.

3 Zaključek

Čeprav imam pri tej nalogi še kar nekaj idej, česar bi se še lahko lotil, kot na primer pogledal natančnost in stabilnost metod v odvisnosti od števila točk. Žal za izpeljavo le teh nimam več časa. Naloga je bila zelo zanimiva, Fourierova metoda presenetljivo lahka in učinkovita, metoda končnih elementov pa zelo bogata.

Po dobrih 9,5 urah dela za to poročilo ga oddajam le nekaj dni po novem letu, zato tudi srečno 2025!