9. naloga: Spektralne metode za začetne probleme PDE

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 obravnavamno *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 kolokacijski metodi 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 L brez izvorov toplote:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D\,\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\,, \qquad 0 \le x \le L\,, \qquad D = \frac{\lambda}{\rho c}\,.$$

Temperaturo v poljubni točki x ob času t izrazimo s Fourierovo vrsto

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

kjer je $f_k = k/L$, torej

$$\sum_k \frac{\partial \widetilde{T}_k(t)}{\partial t}\,\mathrm{e}^{-2\pi \mathrm{i} f_k x} = D \sum_k (-4\pi^2 f_k^2)\,\widetilde{T}_k(t)\,\mathrm{e}^{-2\pi \mathrm{i} f_k x}\,.$$

Od tod sledi evolucijska enačba za Fourierove koeficiente

$$\frac{\partial \widetilde{T}_k(t)}{\partial t} = D\,(-4\pi^2 f_k^2)\,\widetilde{T}_k(t)\,.$$

Pogosto uporabimo spektralno reprezentacijo za krajevni odvod, medtem ko časovni korak naredimo z neko eksplicitno integracijsko shemo, na primer kar po Eulerju

$$\widetilde{T}_k(t+h) = \widetilde{T}_k(t) + hD(-4\pi^2 f_k^2)\widetilde{T}_k(t)\,. \tag{1}$$

Reprezentacijo $T(x,t)$ v običajnem prostoru nato dobimo z obratno Fourierovo transformacijo.

Naloga: Reši difuzijsko enačbo v eni razsežnosti $x \in [0,L]$ z začetnim pogojem po plasti gaussovsko porazdeljene temperature

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

(izberi razumne vrednosti za D, L in σ) in periodičnim robnim pogojem $T(0,t) = T(L,t)$ po Fourierovi metodi, pri kateri časovni korak izvedeš po Eulerju: najprej izračunaj Fourierovo reprezentacijo $\widetilde{T}_k(0)$ 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

$$\left| \frac{\widetilde{T}_k(t+h)}{\widetilde{T}_k(t)} \right| = \left| 1 + hD(-4\pi^2 f_k^2) \right| < 1 \, .$$

Nekaj pozornosti zahteva tudi diskretizacija: za vsak k mora biti $0 < f_k < f_{\mathrm{Nyquist}}$. (Kaj je že to in kakšno zvezo ima s stabilnostjo?) Če izbereš veliko število točk, je smiselno uporabiti kar algoritem FFT. Temperaturni profil $T_j(t) \equiv T(x,t)$ ob poljubnem času nato dobiš z inverzno FFT.

Dodatna naloga: Pri razvoju $T(x,t)$ nismo omejeni na trigonometrične funkcije. Rešitev PDE na $0 \leq x \leq L$ lahko aproksimiramo tudi z drugačno vrsto funkcij, na primer kubičnimi B-zlepki,

$$T(x,t) = \sum_{k=-1}^{N+1} a_k(t) B_k(x) \, , \tag{2}$$

kjer je $B_k(x)$ kubični zlepek s središčem okrog $x = x_k$. Lastnosti B-zlepkov so navedene v dodatku. Tako zasnujemo *kolokacijsko metodo*. Podobno kot pri Fourierovi metodi tudi pri tej metodi zahtevamo, da razvoj (2) zadošča osnovni PDE in robnim pogojem. Razvoj (2) vstavimo v PDE in izvrednotimo rezultat pri $x = x_j$. (Interval $[0, L]$ diskretiziramo na N podintervalov širine Δx s točkami $x_j = j\Delta x$, kjer je $j = 0, 1, \ldots, N$. Za kolokacijo je smiselno izbrati enake točke kot za diskretno mrežo.) Tako dobimo

$$\sum_{k=-1}^{N+1} a_k'(t) B_k(x_j) = D \sum_{k=-1}^{N+1} a_k(t) B_k''(x_j) \, , \quad j = 0, 1, \ldots, N \, .$$

Upoštevamo lastnosti B-zlepkov in dobimo sistem diferencialnih enačb za koeficiente $a_j(t)$:

$$a_{j-1}'(t) + 4a_j'(t) + a_{j+1}'(t) = \frac{6D}{\Delta x^2} \left(a_{j-1}(t) - 2a_j(t) + a_{j+1}(t) \right) \, ,$$

kjer je $j = 0, 1, \ldots, N$. Iz robnega pogoja pri $x = 0$ ugotovimo $a_{-1} = -4a_0 - a_1$. Ko v zgornjo enačbo vstavimo $j = 0$, sledi še $a_0 = 0$ in $a_{-1} = -a_1$. Podobno pri $x = L$ dobimo $a_N = 0$ in $a_{N+1} = -a_{N-1}$. Reševanje enačbe (2) smo torej prevedli na reševanje matričnega sistema

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{a}' = \boldsymbol{B}\boldsymbol{a} \, ,$$

kjer je

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

in $\boldsymbol{a} = (a_1(t), a_2(t), \ldots a_{N-1}(t))^{\mathrm{T}}$. Začetni pogoj za PDE je $T(x_j, 0) = g(x_j)$, torej je začetni približek za kolokacijsko aproksimacijo

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{a}^0 = 6\boldsymbol{g}\ ,$$

kjer je $\boldsymbol{g} = (g(x_1), g(x_2), \ldots, g(x_{N-1}))^{\mathrm{T}}$. To zdaj rešujemo s kako metodo, ki jo poznamo iz prejšnjih nalog, recimo z eksplicitno Eulerjevo metodo: ob zaporednih časih $n\Delta t$ dobimo

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

Ob poljubnem času nato dobimo temperaturni profil tako, da znova izračunamo vsoto (2). 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

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

Kolokacijsko metodo uporabi ob začetnem pogoju

$$T(x, 0) = g(x) = \sin(\pi x/L)$$

in homogenih Dirichletovih robnih pogojih $T(0, t) = T(L, t) = 0$.

Dodatek: kubični B-zlepki

Kubični B-zlepki imajo obliko

$$B_k(x) = \begin{cases} 0 & \text{če} \quad x \le x_{k-2} \\ \dfrac{1}{6\Delta x^3}(x - x_{k-2})^3 & \text{če} \quad x_{k-2} \le x \le x_{k-1} \\ \dfrac{1}{6} + \dfrac{1}{2\Delta x}(x - x_{k-1}) + \dfrac{1}{2\Delta x^2}(x - x_{k-1})^2 - \dfrac{1}{2\Delta x^3}(x - x_{k-1})^3 & \text{če} \quad x_{k-1} \le x \le x_k \\ \dfrac{1}{6} - \dfrac{1}{2\Delta x}(x - x_{k+1}) + \dfrac{1}{2\Delta x^2}(x - x_{k+1})^2 + \dfrac{1}{2\Delta x^3}(x - x_{k+1})^3 & \text{če} \quad x_k \le x \le x_{k+1} \\ -\dfrac{1}{6\Delta x^3}(x - x_{k+2})^3 & \text{če} \quad x_{k+1} \le x \le x_{k+2} \\ 0 & \text{če} \quad x_{k+2} \le x \end{cases}$$