Univerza *v Ljubljani*
Fakulteta *za matematiko in fiziko*

Matematično-fizikalni praktikum

Deveta naloga: *Spektralne metode*

Simon Bukovšek, 28211067

Mainz, 17. december 2023

Profesor: prof. dr. Borut Paul Kerševan

Naloga: Spektralne metode

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

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

  (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.

1 Uvod

Za reševanje začetnih problemov s parcialnimi diferencialnimienačbami (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 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:

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

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

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

kjer je $f_k = k/a$, torej

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

Od tod sledi evolucijska enačba za Fourierove koeficiente

$$\partial\widetilde{T}_k(t)/\partial t = D\,(-4\pi^2 f_k^2)\,\widetilde{T}_k(t)\,. \tag{1}$$

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

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

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 $\widetilde{T}_k(0)$ 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

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

Nekaj pozornosti zahteva tudi diskretizacija: za vsak k seveda velja $-f_{\mathrm{Nyquist}} < f_k < f_{\mathrm{Nyquist}}$ 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 $0 \le x \le a$ lahko aproksimiramo tudi z drugačno vrsto funkcij, na primer kubičnimi B-zlepki,

$$T(x,t) = \sum_{k=-1}^{N+1} c_k(t) B_k(x)\,, \tag{3}$$

kjer je $B_k(x)$ kubični zlepek s središčem okrog $x = x_k$. Lastnosti B-zlepkov 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 izvrednotimo rezultat pri $x = x_j$. (Interval $[0, a]$ diskretiziramo na N podintervalov širine Δx s točkami $x_j = j\Delta x$, kjer je $j = 0, 1, \ldots, N$. Za kolokacijo je smiselno izbrati enake točke kot za diskretno mrežo.) Tako dobimo

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

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

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

kjer je $j = 0, 1, \ldots, N$. 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

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

kjer je

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

in $\mathbf{c} = (c_1(t), c_2(t), \ldots c_{N-1}(t))^{\mathrm{T}}$. Začetni pogoj za PDE je $T(x_j, 0) = f(x_j)$, torej je začetni približek za kolokacijsko aproksimacijo

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

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

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

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

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

2 Fourierova metoda

Difuzijska enačba ima navidezno en parameter D, vendar se ga lahko znebimo s pomočjo uvedbe brezdimenzijskih spremenljivk. Naj bo $\tau = Dt/a^2$ in $\xi = x/a$. Difuzijska enačba se potem prepiše v

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

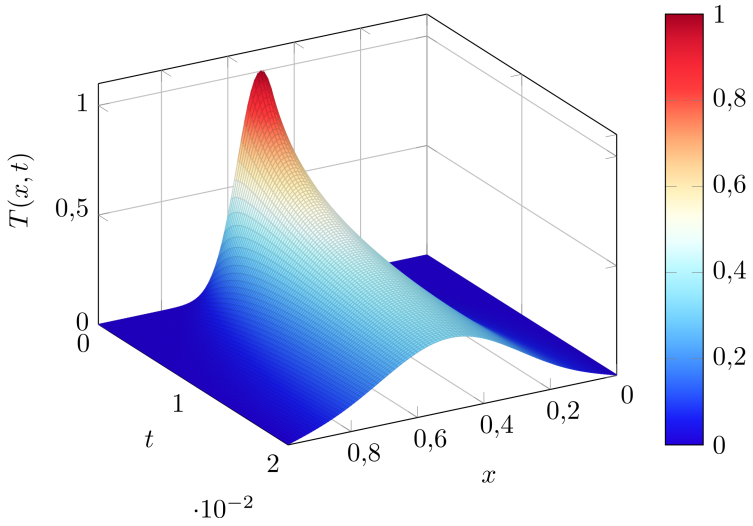
Te enote bomo vedno uporabljali v nadaljevanju.

Najprej si poglejmo primer homogenih robnih pogojev in začetnega pogoja v obliki Gaussove funkcije:

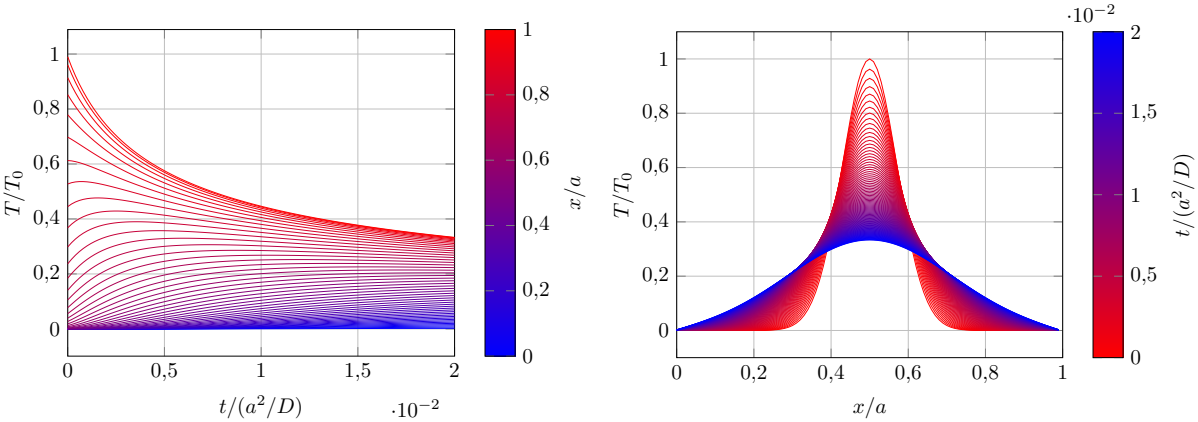
$$T(x, 0) = \mathrm{e}^{-(x - x_0)^2/\sigma^2} \,,$$

kjer je $\sigma = a/10$ in $x_0 = a/2$. Celoten razvoj je prikazan na Sliki 1. Posamezni preseki po konstantnem času in po konstantnem x pa so prikazani na Grafih 2b in 2a. Homogeni robni pogoji so bili doseženi s pomočjo razširitve intervala na $[-a, a]$ in začetnih pogojev kot lihe funkcije. Če si pogledamo Enačbo 4, smo s to razširitvijo poskrbeli, da je $A_0 = B_n = 0$. Ostanejo torej samo še sinusi, ki so po konstrukciji enaki nič na sredini in robu intervala.

Vidimo, da skozi čas temperaturni profil še vedno ostaja oblike Gaussove krivulje, je da je debelina vedno večja in višina vedno manjša. To je kvalitativno takšno obnašanje, kot ga napoveduje Enačba 5.



Slika 1: Rešitev difuzijske enačbe s homogenimi robnimi pogoji in gaussovim začetnim pogojem. Temperatura je v enotah T_0, čas v enotah a^2/D in x v enotah a. Začetna Gaussovka ima $\sigma = a/10$ in premik $x_0 = a/2$.



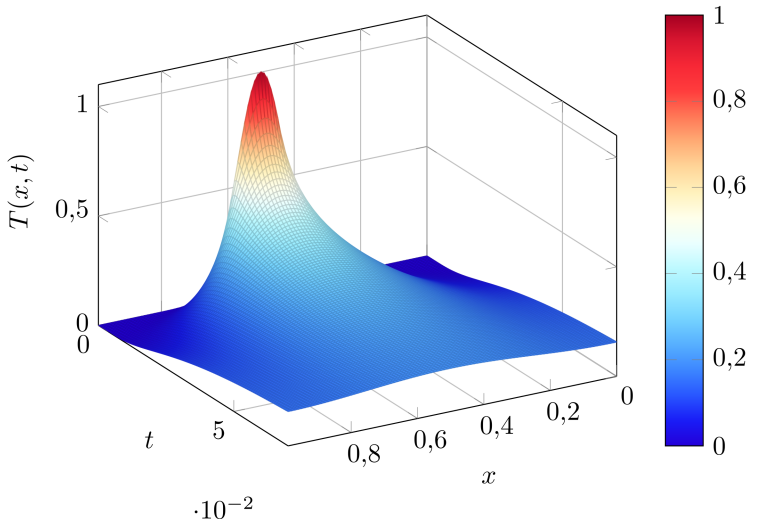
(a) Preseki pri konstantnem x. **(b)** Preseki pri konstantnem t.

Slika 2: Preseki rešitve difuzijske enačbe s homogenimi robnimi pogoji in gaussovim začetnim pogojem. Začetna Gaussovka ima $\sigma = a/10$ in premik $x_0 = a/2$.

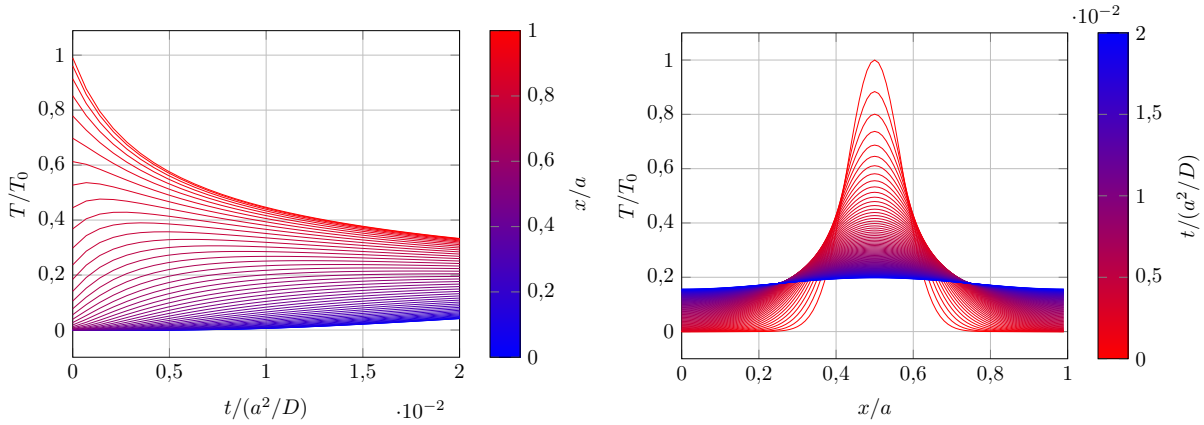
Sedaj si poglejmo še primer periodičnih robnih pogojev. Začetni pogoj je spet Gaussova funkcija z enakimi parametri kot prej. Rešitev je prikazana na Sliki 3. Posamezni preseki po konstantnem času in po konstantnem x pa so prikazani na Grafih 4b in 4a. Rešitev se tudi tokrat približuje konstanti, vendar končna vrednost temperature ni enaka 0.

Pri Eulerjevi metodi je pomembno vprašanje stabilnosti. Veljati mora

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



Slika 3: Rešitev difuzijske enačbe s periodičnimi robnimi pogoji in gaussovim začetnim pogojem. Temperatura je v enotah T_0, čas v enotah a^2/D in x v enotah a. Začetna Gaussovka ima $\sigma = a/10$ in premik $x_0 = a/2$.



(a) Preseki pri konstantnem x.

(b) Preseki pri konstantnem t.

Slika 4: Preseki rešitve difuzijske enačbe s periodičnimi robnimi pogoji in gaussovim začetnim pogojem. Začetna Gaussovka ima $\sigma = a/10$ in premik $x_0 = a/2$.

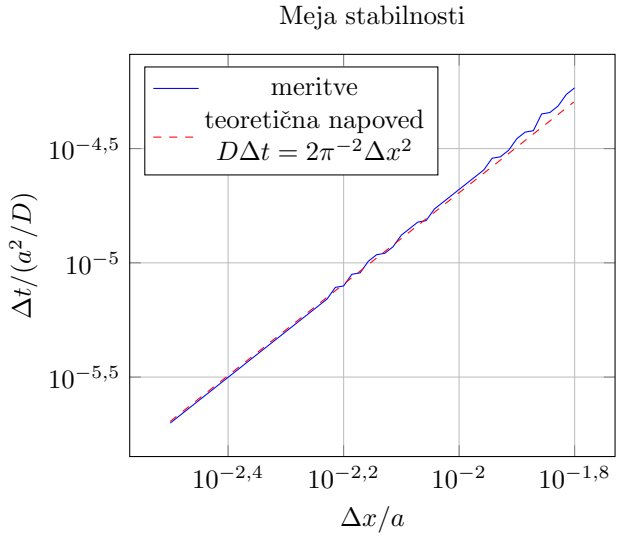
Na skrajni meji seveda velja enačaj. Drugače si to lahko razlagamo, kot da vrednost $4\pi^2 h D f_k^2$ ne sme preseči vrednosti 2. Največja vrendost f_k je pri $k = N/2$; takrat velja $f_{N/2} = N/(2a) = 1/(\Delta x)$. Če označimo še $h = \Delta t$, dobimo:

$$\Delta t = \frac{2D}{\pi^2}\Delta x.$$

Prepisano v brezidmenzijske enote:

$$(D\Delta t/a^2) = \frac{2}{\pi^2}(\Delta x/a)^2\,.$$

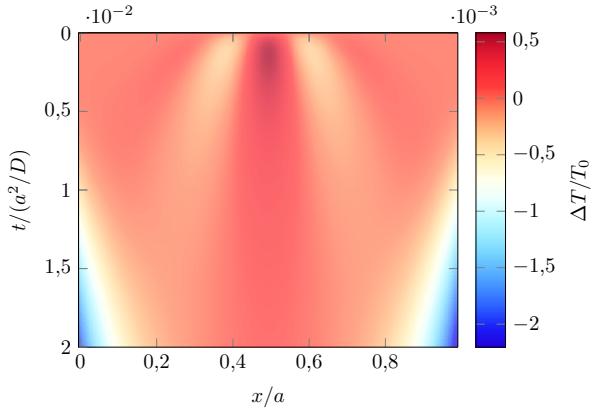
Ker zahtevana natančnost v času narašča s kvadratom natančnosti v prostoru, smo lahko zelo hvaležni, da obstaja analitična rešitev za časovni razvoj. Veljavnost te neenačbe sem tudi preveril. Za različne vrednosti Δx sem izračunal največjo vrednost Δt, pri kateri je metoda še stabilna. Rezultati so prikazani na Sliki 5. Vidimo, da je rezultat zelo blizu analitičnemu.



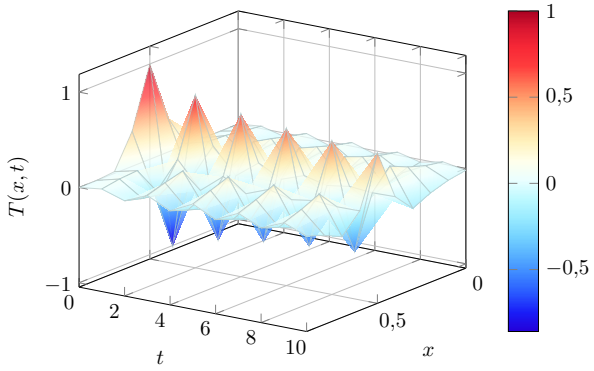
Slika 5: Maksimalna možna velikost časovnega koraka (Δt) v odvisnosti od velikosti krajevnega koraka (Δx), da je Fourierova metoda še stabilna. Analitično ta pogoj opisuje zveza $D\Delta t = 2(\Delta x/\pi)^2$ (črtkano).

3 Metoda končnih elementov

Sedaj si poglejmo še metodo končnih elementov. Rezultati so bili na pogled popolnoma enaki kot pri Fourierovi metodi, zato grafov ne bom še enkrat risal. Bolj zanimiva pa so bila različna odstopanja med metodama. Za metodo končnih elementov sem uporabil stabilnejši način časovnega razvoja, kot je opisan v uvodu: $\mathbf{c}^{n+1} = (A - \Delta t B/2)^{-1}(A + \Delta t B/2)\mathbf{c}^n$. Zelo sem se trudil, da bi našel pogoje, kjer metoda ne konvergira, vendar mi to ni uspelo. Lahko pa prikažem primer, ko dá metoda zelo nepravilne razultate (ampak je po dolgem času še vedno stabilna). Na Sliki 6b je prikazan en tak primer za $D\Delta t/a^2 = 1$ in $\Delta x/a = 0{,}1$. Pojavi se čudno oscilatorno obnašanje (podobno kot pri Eulerjevi metodi).



(a) Razlika med Fourierovo in kolokacijsko metodo pri istem gaussovem začetnem pogoju kot v prejšnih primerih, homogenih robnih pogojih in $D\Delta t/a^2 = 0{,}0002$ ter $\Delta x/a = 0{,}01$.



(b) Primer zelo nenatančne (a še vedno stabline) izbire velikosti korakov pri metodi končnih elementov: $D\Delta t/a^2 = 1$ in $\Delta x/a = 0{,}1$. Temperatura je v enotah T_0, čas v enotah a^2/D in x v enotah a. Začetna Gaussovka ima $\sigma = a/10$ in premik $x_0 = a/2$.

Slika 6: Primerjava Fourierove in kolokacijske metode.

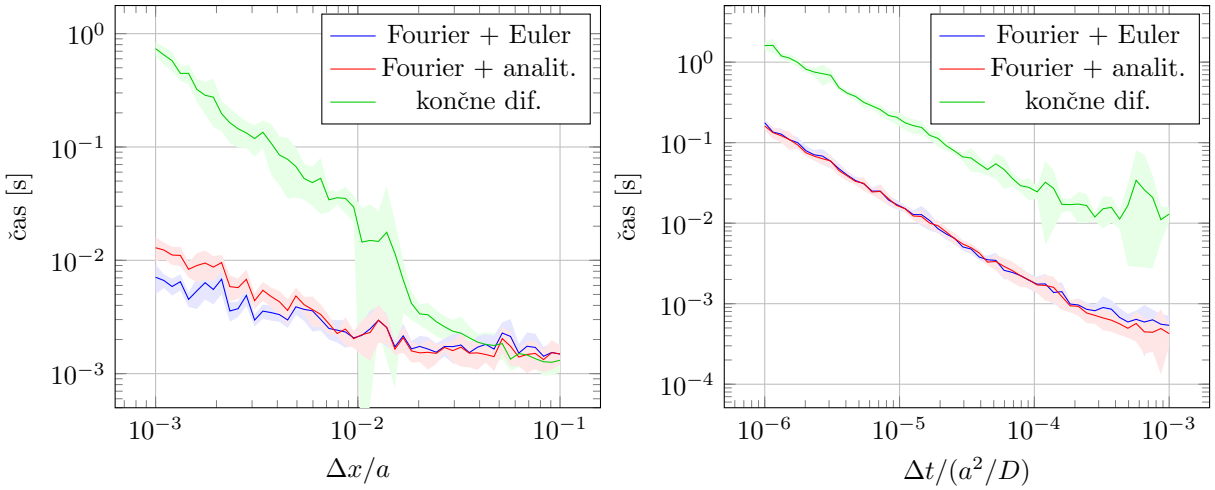
Na še eno zanimivost naletimo, če primerjamo vrednosti Fourierove metode in metode končnih elementov pri enakih vrednostih časovnih in krajevnih korakov. Na Sliki 6a je prikazana razlika med obema metodama za $D\Delta t/a^2 = 0{,}0002$ in $\Delta x/a = 0{,}01$. Vidimo, da je razlika majhna (še dobro!), največja je pri velikih časih in robnih položajih. To je nekoliko nenavadno, saj bi zaradi homogenega robnega pogoja

pričakoval največjo natančnost ravno ob robu.

4 Primerjava hitrosti

Preden se lotimo dodatnega dela, posvetimo nekaj časa še časovni zahtevnosti posameznih metod. Primerjal sem tri: Fourierovo z Eulerjevim časovnim razvojem, Fourierovo z analitičnim časovnim razvojem in končne elemente. Pri vseh sem uporabil iste začetne (Gauss) in robne (homogene) pogoje. Pri konstantnem časovnem koraku sem izračunal hitrost izvajanja v odvisnosti od velikosti krajevnega koraka. Rezultati so prikazani na Sliki 7a. Pri velikih korakih so vse tri metode primerljive, v kolikor pa Δx pade pod $0{,}01a$, pa postane metoda končnih diferenc bistveno počasnejša. Določen del počasnosti prispeva tudi moja slabo napisana koda, saj sem za obrat matrike A uporabil funkcijo `numpy.linalg.inv`, čeprav bi bila morda boljši Thomasov algoritem, saj je A tridiagonalna. Obe Fourierovi metodi sta primerljivo hitri, z ozirom na to, da Eulerjeva metoda pod mejo $\Delta x < 0{,}02a$ v tem primeru ne konvergira več.

Pri konstantnem krajevnem koraku sem izračunal hitrost izvajanja v odvisnosti od velikosti časovnega koraka. Rezultati so prikazani na Sliki 7b. Tokrat sta obe Fourierovi metodi še bolj izenačeni in na celotnem območju hitrejši od metode končnih elementov za približno faktor deset. Pričakovano pa vse metode naraščajo z enako hitrostjo. Tokrat Eulerjeva metoda divergira za vse $\Delta t > 2 \cdot 10^{-5}$.



(a) Hitrost izvajanja Fourierove in kolokacijske metode v odvisnosti od velikosti krajevnega koraka ($\Delta x/a$). Začetni pogoj je bil Gaussov, $D\Delta t/a^2 = 0{,}0001$. Izvajalo se je 100 časovnih korakov, torej do $t_{\max} = a^2/D$.

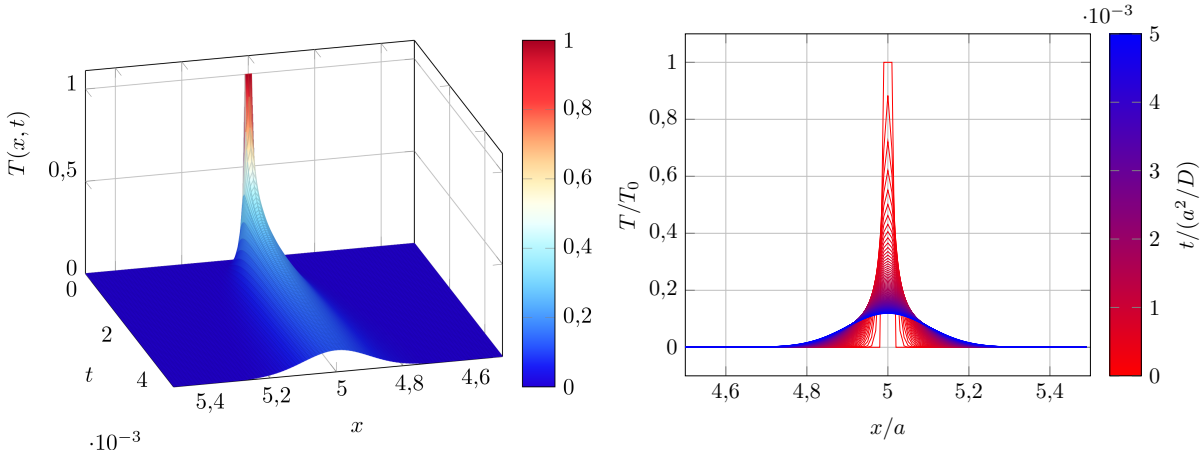
(b) Hitrost izvajanja Fourierove in kolokacijske metode v odvisnosti od velikosti časovnega koraka ($D\Delta t/a^2$). Začetni pogoj je bil Gaussov, $\Delta x/a = 0{,}01$. Časovni koraki so se izvajali do $t_{\max} = a^2/D$.

Slika 7: Hitrosti izvajanja različnih metod pri spreminjanju velikosti korakov. V modrem je Fourierova metoda z uporabo Eulerjeve metode pri časovnem razvoju, v rdečem je Fourierova metoda z uporabo analitične rešitve za časovni razvoj, v zelenem je kolokacijska metoda.

5 Razni začetni pogoji

Za dodatek si poglejmo še nekaj primerov odsekoma konstantnih začetnih pogojev. Najprej si poglejmo Diracovo δ-funkcijo. Rezultat je prikazan na Sliki 8. Temperatura se razvije kot Gaussova funkcija, ki se širi s časom. V tem primeru sem namenoma vzel bistveno večje območje, kot je prikazano na sliki, da bi bolje simuliral neskončno palico. Dobljeno rešitev sem poskusil primerjati z analitično (opisano v naslednjem poglavju) vendar ujemanje ni bilo najboljše. Najbrž je težava v tem, da je neskončne skoke težko simulirati z diskretno mrežo.

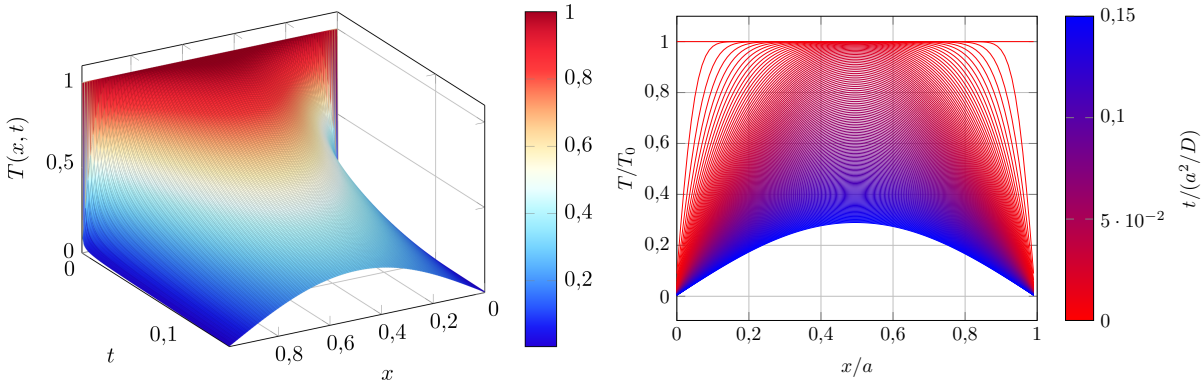
Naslednji ekspeiment je odgovor na vprašanje, kaj se zgodi, če toplo palico prislonimo med dve hladni steni. Rezultat je prikazan na Sliki 9 in je popolnoma smiseln. Roba se takoj ohladita na temperaturo stene, medtem ko srednja točka potrebuje nekaj časa, da se začne ohlajati. Po nekaj časa je temperaturni profil



(a) Tridimenzionalni prikaz. **(b)** Prerez pri konstantnem t.

Slika 8: Rešitev difuzijske enačbe s homogenimi robnimi pogoji in začetnim pogojem $\delta(x - a/2)$. Temperatura je v enotah T_0, čas v enotah a^2/D in x v enotah a. Homogeni robni pogoji so postavljeni pri $x = 0$ in $x = 10$, torej daleč izven prikazanega območja. V prikazanem času se torej funkcija razvija, kot da bi imela prosta robna pogoja.

enak eni grbi sinusne funkcije, saj je to tista komponenta, ki se najpočasneje ohlaja (najnižja frekvenca in zato najnižji faktor v eksponentu). Hkrati pa velja ta primer za demonstracijo, da ni nujno potrebno, da se robni in začetni pogoj v točki $T(0,0)$ ujemata.



(a) Tridimenzionalni prikaz. **(b)** Prerez pri konstantnem t.

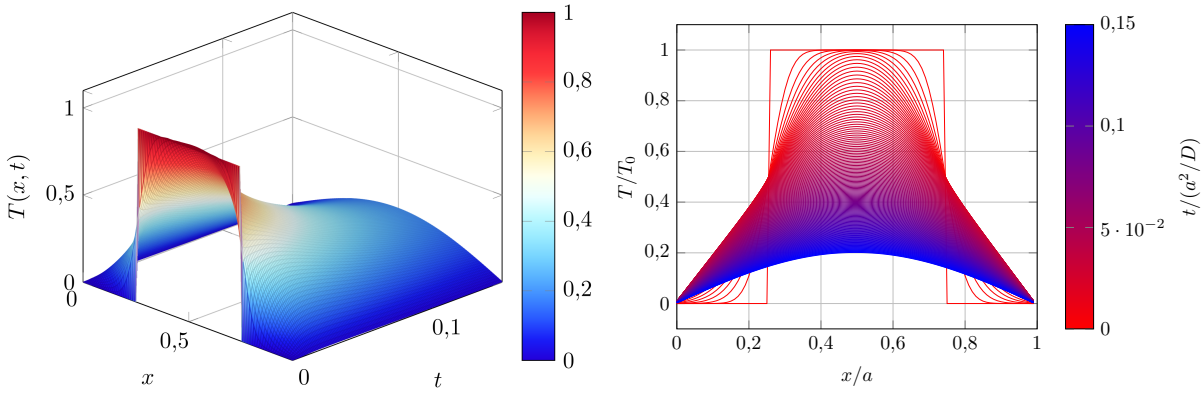
Slika 9: Rešitev difuzijske enačbe za enakomerno toplo palico, prislonjeno med dve hladni steni (homogen robni pogoj). Temperatura je v enotah T_0, čas v enotah a^2/D in x v enotah a.

Zadnji primer je palica, prislonjena med dve hladni steni, ki je na srednji polovici topla, drugod pa hladna (Slika 10).

6 Analitični pristop

Za konec si poglejmo še analitični pristop k reševanju difuzijske enačbe, ki nam lahko zelo zgovorno dopolni kvalitativna opažanja iz numerike. Robni pogoji lahko nastopijo v dveh različnih različicah; homogeni in periodični. V prvem primeru je robni pogoj $T(0,t) = T(a,t) = 0$, v drugem pa $T(0,t) = T(a,t)$ in $T'(0,t) = T'(a,t)$. V obeh primerih zapišemo $T(x,t)$ kot produkt dveh funkcij $X(x)$ in $\mathcal{T}(t)$:

$$T(x,t) = X(x)\mathcal{T}(t)\,.$$



(a) Tridimenzionalni prikaz. **(b)** Prerez pri konstantnem t.

Slika 10: Rešitev difuzijske enačbe za stopničast začetni in homogen robni pogoj. Temperatura je v enotah T_0, čas v enotah a^2/D in x v enotah a.

Vstavimo to v difuzijsko enačbo in dobimo

$$\frac{1}{X(x)}\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} = \frac{1}{\mathcal{T}(t)}\frac{\partial \mathcal{T}}{\partial t} = -\lambda^2 \,,$$

kjer je λ neka konstanta. Leva stran enačbe je odvisna samo od x, desna pa samo od t, tako da morata biti obe strani konstantni. Rešitev za $\mathcal{T}(t)$ je

$$\mathcal{T}(t) = \mathrm{e}^{-\lambda^2 t} \,.$$

Rešitev za $X(x)$ pa je odvisna od robnih pogojev. Za homogene robne pogoje je

$$X(x) = A\sin(\lambda x) + B\cos(\lambda x) \,,$$

kjer sta A in B konstanti, ki ju določimo iz robnih pogojev. Ker je $T(0,t) = 0$, mora biti $B = 0$, zaradi $T(a,t) = 0$ pa mora biti

$$A\sin(\lambda x) = 0 \quad \Longrightarrow \quad \lambda = \frac{n\pi}{a} \,, \qquad n \in \mathbb{N} \,.$$

Zaradi linearnosti začetne enačbe lahko rešitev zapišemo kot linearno kombinacijo vseh enostavnejših rešitev, torej

$$T(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \mathrm{e}^{-\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 t} \,.$$

Konstante A_n določimo iz začetnega pogoja. Veljati mora namreč

$$T(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \,.$$

Sedaj izkoristimo matematično dejstvo, da je $\sin(n\pi x/a)$ ortonormirana baza prostora funkcij, definiranih na intervalu $[0,a]$. To pomeni, da lahko koeficiente A_n izračunamo kot

$$A_n = \frac{2}{a}\int_0^a T(x,0)\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\,dx \,.$$

Najsplošnejša rešitev je

$$T(x,t) = \frac{2}{a}\sum_{n=1}^{\infty}\int_0^a T(x',0)\sin\left(\frac{n\pi x'}{a}\right)\,\mathrm{d}x' \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\mathrm{e}^{-\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 t} \,.$$

Nehomogene robne pogoje ($T(0,t) = T_1$ in $T(a,t) = T_2$) lahko preoblikujemo v homogene tako, da odštejemo funkcijo $T'(x) = T_1 + x(T_2 - T_1)/a$. Funkcija

$$\tilde{T}(x,t) = T(x,t) - T'(x)$$

ustreza homogenim robnim pogojem, zato jo lahko rešimo na že znan način.

Periodični robni pogoji so nekoliko bolj zapleteni, zato je izpeljava lahko vaja za bralca. Analitično se jih lažje reši na intervalu $[-a, a]$, kjer je rešitev:

$$T(x,t) = A_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(A_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) + B_n \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right) e^{-D(n\pi/a)^2 t}, \tag{4}$$

kjer so

$$A_0 = \frac{1}{2a}\int_{-a}^{a} T(x,0)\,\mathrm{d}x, \quad A_n = \frac{1}{a}\int_{-a}^{a} \sin(n\pi x/a)T(x,0)\,\mathrm{d}x, \quad B_n = \frac{1}{a}\int_{-a}^{a} \cos(n\pi x/a)T(x,0)\,\mathrm{d}x.$$

Opazimo, da pravzaprav razvijemo začetne pogoje v Fourierovo vrsto in naredimo časovni razvoj po frekvencah. To je tudi osnovna ideja Fourierove metode. Na podoben način lahko rešimo tudi neomejeno različico difuzne enačbe, kjer je $T(\infty,t) = T(-\infty,t) = 0$ in $T(x,0) \in L^1$. Takega problema se lotimo s Fourierovo transformacijo:

$$\mathcal{F}\{T_t\}(k,t) = D\mathcal{F}\{T_{xx}\}(k,t) = -Dk^2\mathcal{F}\{T\}(k,t)\,.$$

To lahko analitično rešimo kot:

$$\mathcal{F}\{T\}(k,t) = \mathcal{F}\{T\}(k,0)\mathrm{e}^{-Dk^2 t}\,.$$

Inverzna Fourierova transformacija nam da (spet vaja bralcu):

$$T(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}}\int_{-\infty}^{\infty} T(x,0)e^{-\frac{(x-y)^2}{4Dt}}\,\mathrm{d}y\,.$$

Če je začetni pogoj Gaussova funkcija

$$T(x,0) = Ae^{(x-x_0)^2/2\sigma^2}\,,$$

lahko integral izračunamo analitično in dobimo:

$$T(x,t) = \frac{A}{\sqrt{2\pi t/\sigma^2 + 1}} e^{-(x-x_0)/2(2\pi t + \sigma^2)}\,. \tag{5}$$

Če je začetni pogoj Diracova δ-funkcija v x_0 ($A\delta(x - x_0)$), je rešitev

$$T(x,t) = \frac{A}{\sqrt{4\pi D t}} e^{-(x-x_0)^2/4Dt}\,.$$

Še ena zanimiva rešitev pa pride, ko imamo za začetni pogoj Heavisideovo funkcijo $A\Theta(x - x_0)$:

$$T(x,t) = \frac{A}{2}\,\mathrm{erf}\left(\frac{x - x_0}{\sqrt{4Dt}}\right)\,,$$

kjer je erf nedoločen integral Gaussove funkcije:

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x e^{-t^2}\,\mathrm{d}t\,.$$

S seštevanjem takih funkcij, lahko rešimo poljuben odsekoma konstanten začetni pogoj. Recimo:

$$T(x,0) = \begin{cases} A & \text{za} \quad |x| < a/2 \\ 0 & \text{za} \quad |x| \geq a/2 \end{cases} = \frac{A}{2}(\Theta(x - a/2) - \Theta(x + a/2)).$$

Rešitev je potem

$$T(x,t) = \frac{A}{2}\left(\mathrm{erf}\left(\frac{x - a/2}{\sqrt{4Dt}}\right) - \mathrm{erf}\left(\frac{x + a/2}{\sqrt{4Dt}}\right)\right)\,.$$

Seveda pa lahko vsaki rešitvi dodamo člen oblike $A + Bx$, saj ne vpliva na difuzijsko enačbo.

7 Zaključek

V tokratni nalogi sem se spoznal z dvema metodama za reševanje difuzijske enačbe. Fourierova metoda je bistveno hitrejša od metode končnih elementov, vendar pa je pri njej potrebno paziti na stabilnost. Čeprav se je slednja na začetku zdela zelo nenavadna in celo morda po nepotrebnem zapletena, je bila v resnici enostavnejša za implementacijo. Vseeno pa je Fourierova metoda s svojim ekspresnim FFT algoritmom in ponujenim eksplcitnim razvojem v času, vsekakor boljša izbira. Da ne omenjam potencialne možnosti za razširitev na več dimenzij. Nekaj zanimivih ugotovitem pa mi je prineslo tudi poglabljanje v analitične rešitve enačbe.