

Modern numerikus módszerek

A hővezetés egyenletének megoldása pszeudospektrális
kollokációval fizikai térben

Németh Róbert

1. Bevezetés

Ebben a munkában a 2 dimenziós hővezetés feladatán keresztül foglalkozok a "pszeudospektrális kollokáció" néven ismert spektrális parciális differenciálegyenlet megoldó módszerrel.

Először összefoglalom a módszer elméleti alapjait. Ezután ejtek pár szót az implementálásáról, amely befolyásolta az időléptető módszer kiválasztását, mivel egy cél volt a számítás GPU-n való futtatása. Majd közlöm egy konkrét hővezetési feladat megoldását.

Ezenkívül egy egyszerű esetben összehasonlítom az ismert analitikus megoldást a numerikus megoldással. Végül pedig megpróbálom összefoglalni, a munka milyen érdekes vizsgálati kérdéseket vetett fel.

2. Elméleti bevezető

2.1. A hővezetés egyenlete

A hővezetés egyenlete 2 dimenzióban (ha a hővezetés irányfüggetlen):

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right)$$

ahol T a hőmérséklet, $\alpha = \kappa/(\rho c)$ az anyagra jellemző fizikai állandókból (hővezetési együttható, hőkapacitás, sűrűség) képzett mennyiség, amelyet termális diffúzitásnak is neveznek. Értéke pl. alumíniumra: $\alpha_{Al} = 84.18 mm^2/s$. Én ezt a mennyiséget konstansnak és irányfüggetlennek veszem. A továbbiakban a numerikus stabilitás megőrzése érdekében $\alpha = 1$ -el számolok. Ha a következő számolásokat konkrét oldalhosszal rendelkező, konkrét anyagból álló négyzetes lemezre szeretnénk alkalmazni, akkor α gondos megválasztásával teremtünk kapcsolatot a szimuláció és a valóság között (az idő és a hossz skálázódik).

2.2. Pszeudospektrális kollokáció

A következőkben a Numerical Recipes [1] "Spektrális módszerek" fejezete alapján röviden összefoglalom a pszeudospektrális kollokációs módszer mögötti fő gondolatokat. A kulcslépések közötti levelezések az előbb hivatkozott [1] irodalomban, illetve részletesebben [2]-ben találhatóak.

- **Spektrális módszerek**

Lényeges különbség a spektrális és véges differencia módszerek között, hogy míg a véges differencia módszerek a megoldandó parciális differenciálegyenlet közelítik diszkretizációval, addig a spektrális módszerek az egyenlet megoldását közelítik, a bázisfüggvények szerinti végtelen sort véges sorral közelítik:

$$f(x) \simeq f_N(x) = \sum_{n=0}^N a_n \phi_n(x)$$

- **Bázisfüggvények választása**

Azt, hogy egy-egy probléma megoldásához milyen bázisfüggvényrendszert választunk, a határfeltételek határozzák meg. Ideális esetben minden bázisfüggvény kielégíti a probléma határfeltételeit. Például a Fourier bázis a periodikus határfeltételeket elégíti ki. Dirichlet határfeltételek esetén Chebyshev polinomokat használhatunk.

Megemlíteném, hogy a Fourier kifejtés gyors konvergenciájához mind a periodikus határfeltételek mind a kifejtendő függvény simasága szükséges.

Viszont a Chebyshev és Legendre polinomok szerinti kifejtés egy lényeges tulajdonsága, hogy a sor konvergenciája csak a kifejtendő függvény simaságától függ, és nem függ a határfeltételektől. Ez a tulajdonság fogja biztosítani a pszeudospektrális módszer nagy pontosságát.

- **A kifejtési együtthatók számolása: A pszeudospektrális kollokáció definíciója**

Különböző spektrális módszerek alakultak ki aszerint, milyen elvek alapján számoljuk az együtthatókat. A három legegyszerűbb módszere a "Tau", a "Galerkin" és a "Kollokációs" (más néven "Pszeudospektrális" vagy "Pszeudospektrális kollokáció") módszer.

A kollokációs módszerben megköveteljük a határfeltételek kielégítését, valamint azt, hogy speciálisan választott, ún. "kollokációs pontokban" a véges kifejtés egzaktul kielégítse a vizsgált parciális-differenciálegyenletet.

A pszeudospektrális módszerre tehát egy interpolációs módszerként tekinthetünk, amely a kollokációs pontokban egzaktul felveszi a megoldás értékét, ezen pontok között pedig jól közelíti a megoldást.

- **A Gauss-kvadratura és az interpoláló polinom együtthatóinak a kapcsolata**

A Gauss-kvadratura egy integrálási módszer, amellyel az $g(x) = y(x)w(x)$ alakban felírható függvények integrálása végezhető el egy meghatározott intervallumon. Itt $w(x)$ egy ún. "súlyfüggvény", és $y(x)$ egy polinomokkal jól közelíthető, sima függvény. A $w(x)$ -et úgy választhatjuk meg, hogy ki-ejtsük az integrálható szingulartásokat az integrálból a választott intervallumon. A Gauss-kvadratura az integrál értékét jól megválasztott pontokban felvett függvényértékek súlyozott összegével, ún. "kvadraturájával" közelíti:

$$\int_a^b y(x)w(x)dx \approx \sum_{i=0}^N w_i y(x_i)$$

A Gauss-kvadraturák levezetésénél kulcsfogalmat jelentenek a ϕ_n , ún. "ortogonális polinomok". Ezen polinomok ortogonalitását definiálja a következő, integrállal értelmezett skalárszorzat, ahol $w(x)$ egy súlyfüggvény:

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle \equiv \int_a^b \phi_n(x) \phi_m(x) w(x) dx = \delta_{mn}$$

A Gauss-kvadraturánál használt $N + 1$ db. w_i súly és $N + 1$ db. x_i kvadratura pont úgy van megválasztva, hogy amíg $y(x)$ $(2N + 1)$ -edrendű polinomként írható, addig a kvadratura egzaktul megadja az integrál értékét. A kvadraturák levezetésénél épp ez az, amit megkövetelünk.

A különböző $w(x)$ súlyfüggvényekhez különböző ortogonális polinomrendszereket konstruálunk úgy, hogy az egyes polinomok a fenti skalárszorzat értelemben egymásra ortogonálisak legyenek, és egy $j + 1$ -edrendű polinom j -edrendű polinomok lineárkombinációjaként áll elő.

Az előbbi egzaktsági követelmény, itt nem részletezetten, ahhoz vezet, hogy a $\phi_{N+1}(x)$ polinom gyökei lesznek az x_i kvadratura pontok, ez a **Gauss-kvadraturák fundamentális tétele**.

Aa w_i súlyok pedig a

$$w_i = \frac{\langle p_N | p_N \rangle}{p_N(x_i) p'_{N+1}(x_i)}$$

formulával számolhatóak.

Két függvény skaláris szorzatát a következő, "Gauss-kvadratura" értelemben is definiálhatjuk:

$$\langle f | g \rangle_G \equiv \sum_{i=0}^N w_i f(x_i) g(x_i)$$

A kifejtésre használt polinomokra a következő, ún. **"diszkrét ortogonalitási reláció"** lesz igaz, amely az alábbiakban következő állítások bizonyításainál fontos:

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle_G = \delta_{ij}; \quad m + n \leq 2N + 1$$

A megoldást most ne fejtjük végtelen sorba, hanem közelítsük a következő, "pszeudospektrális" interpoláló függvénnyel:

$$P_N(x) = \sum_{n=0}^N \bar{a}_n \phi_n(x)$$

az interpolációs pontoknak válasszuk a Gauss-kvadrátúra pontokat:

$$P_N(x_i) = y(x_i); \quad i = 0, 1, \dots, N$$

A Lagrange-interpoláció szerint az $N + 1$ ponton átmenő interpolációs polinom egy N -edrendű polinom. A ϕ_N -ig tartó ortogonális polinomrendszeren az N -edrendű polinomok kifejezhetők, így ez megtehető. A kifejtési együtthatók pedig éppen a Gauss-kvadrátúrával számíthatók:

$$\bar{a}_n = \langle y | \phi_n \rangle_G$$

Ez az $n + 1$ számú, ún. pszeudospektrális együttható az interpolált polinomot tehát egzaktul kifejti a használt bázisfüggvényen.

Az $y(x)$ megoldás függvény valódi spektrális kifejtése a következő alakú:

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \phi_n(x)$$

ahol az a_n együtthatók a következők:

$$a_n = \langle y | \phi_n \rangle = \int_a^b y(x) \phi_n(x) w(x) dx$$

Belátható, hogy a $\bar{a}_n$ és a_n között érvényes a következő összefüggés:

$$\bar{a}_n = \langle y | \phi_n \rangle_G = a_n + \sum_{m>N} a_m \langle \phi_m | \phi_n \rangle_G$$

Mivel nagy N -ekre az egzakt spektrális kifejtés hibája N -el exponencionálisan csökken, ha $y(x)$ sima függvény, a pszeudospektrális kifejtés is "exponencionálisan jól" közelíti $y(x)$ -et. Ez a nagy pontosság jelenti a pszeudospektrális módszerek erejét.

2.3. Spektrális és kardinális függvény reprezentáció

- **Kardinális függvények**

Egy $f(x)$ függvény polinomiális interpoláló formulája a következő alakban írható:

$$P_N(x) = \sum_{i=0}^N f(x_i) C_i(x)$$

ahol a $C_i(x)$ függvényeket kardinális függvényeknek nevezzük. A kardinális függvények N -edrendű polinomok a következő tulajdonsággal:

$$C_i(x_j) = \delta_{ij}$$

Ez az általunk használt, kollokációs pontok szerinti interpolációnál azt jelenti, hogy minden kollokációs ponthoz tartozik egy kardinális függvény, amely a kiszemelt kollokációs pontban az 1 értéket, és minden más kollokációs pontban a 0 értéket veszi fel.

Ortogonalis polinomok szerinti kifejtés esetén a kardinális függvények a kifejtő ϕ_n polinomokkal a következőképpen írhatóak fel:

$$C_i(x) = \frac{\phi_{N+1}(x)}{(x - x_i)\phi'_{N+1}(x_i)}$$

Tehát minden bázisfüggvény-rendszerhez tartoznak kollokációs pontok és kardinális függvények.

• **Kapcsolat a spektrális és rács reprezentáció között**

A parciális differenciálegyenletünket írjuk fel a következő alakban

$$\mathcal{L}y = f$$

ahol $\mathcal{L}$ egy lineáris differenciál operátor. Ez egy peremérték feladat (nincs időfejlődés). A következők érvényesek a spektrális és fizikai terekben:

Spektrális tér

Fizikai tér

$$y(x) = \sum_{n=0}^N a_n \phi_n(x)$$

$$y(x) = \sum_{j=0}^N y_j C_j(x)$$

$$\sum_{n=0}^N a_n \mathcal{L} \phi_n(x) \approx f(x)$$

$$\sum_{j=0}^N y_j \mathcal{L} C_j(x) \approx f(x)$$

A kollokációs pontokban az interpolációs megoldás egzaktul kielégíti a diff. egyenletet:

$$\sum_{n=0}^N a_n \underbrace{\mathcal{L} \phi_n(x_j)}_{\mathbf{L}_{jn}} = f(x_j)$$

$$\sum_{j=0}^N y_j \underbrace{\mathcal{L} C_j(x_i)}_{\mathbf{L}_{ij}^{(c)}} f(x_i)$$

Mátrix-vektor szorzás alakban:

Mátrix-vektor szorzás alakban:

$$\mathbf{L}\mathbf{a} = \mathbf{f}$$

$$\mathbf{L}^{(c)}\mathbf{y} = \mathbf{f}$$

A két reprezentáció között mátrix szorzás létesíti az átjárást. Például a rácsponok értékeiből a spektrális együtthatók úgy számíthatóak, hogy a kifejtendő $y(x)$ függvényt a spektrális bázisokra vetítjük a fentiekben említett skalárszorítás értelemben, és az integrált Gauss-kvadraturával számoljuk (ami esetben egzaktul megadja az integrál értékét).

$$a_i = \langle \phi_i | y \rangle = \sum_j \underbrace{w_j \phi_i(x_j)}_{\mathbf{M}_{ij}} y_j$$

$$\mathbf{a} = \mathbf{M}\mathbf{y}$$

A spektrális együtthatókból a rácsponbeli értékeket (a kardinális függvények együtthatóit) az $\mathbf{M}^{-1}$ -zel szorozva kapjuk meg:

$$\mathbf{y} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{a}$$

Fourier vagy Chebhysev bázist használva FFT-vel gyorsítható az átjárás nagy rácsponszám esetén. A két tér közötti folyamatos átjárásnak csak komplexebb, például változó együtthatós parciális d.e.-ek esetén van jelentősége [2].

Látható, hogy a számításokat mind a rácspontokon, mind a spektrális együttthatókon végezhetjük. Mivel fizikai térben könnyebb a Dirichlet és Neumann határfeltételek kielégítése, én a fizikai teret választottam, és a továbbiakban részletesebben csak a fizikai térrel foglalkozom.

2.4. Differenciáló mátrixok

Mint ahogy az előbbi összefoglalóban láttuk, a lineáris operátorok hatását a fizikai vagy spektrális térben mátrix-vektor szorzással írhatjuk le. Itt a vektor spektrális esetben a spektrális bázisfüggvények együttthatóit, fizikai térben a kollokációs pontokon felvett értéket (a kardinális függvények együttthatóit) tartalmazza. A mátrix fizikai térben:

$$\mathbf{L}_{ij}^C = \mathcal{L}C_j(x_i)$$

Tehát például a megoldás ∂_x differenciálját úgy kapjuk, hogy a megoldást (tehát fizikai térben a függvényértékek vektorát) megszorozzuk a következő mátrixszal:

$$D_{ij}^{(1)} = \partial_x C_j(x_i)$$

Láthatóan a mátrix konkrét alakjához szükségünk van a $C_j(x)$ függvények derivált értékeire az x_i kollokációs pontokban. Ezek kiszámolhatóak, és a gyakrabban használt bázisokhoz tartozó differenciális mátrixok fellelhetők az irodalomban. Bizonyos bázisokhoz kétfajta rács is tartozhat, és a mátrix alakját természetesen a rácsválasztás is befolyásolja. Például a Chebyshev bázishoz választhatjuk a Gauss-kvadrátúra pontokat, de a Gauss-Lobatto pontokat is, amelyek a végpontokat is magukba foglalják, így könnyebbé válik a peremfeltételek kielégítése a végpontokon. A Gauss-Lobatto rácsról részletesebben lásd [2].

Megjegyzés: Chebyshev polinomoknál a spektrális térben a térbeli deriváltat nem csak mátrixszorzással, hanem kisebb műveletigénnyel, rekurziós relációkat használva is számolhatjuk. Fourier-bázison spektrális együttthatókat ik -val szorozva, majd inverz FFT-va kiértékelhetjük a térbeli deriváltakat. [1]).

2.5. A feladathoz illeszkedő fogalmak: Chebyshev polinomok, kardinális függvények és a Gauss-Lobatto kollokációs pontok

A hővezetés problémáját egy négyzet alakú, zárt tartományon oldom meg Dirichlet vagy Neumann határfeltételek mellett. Az ilyen geometriához a Chebyshev polinomok illeszkednek leginkább. A következőkben ezért a Chebyshev polinomokhoz kapcsolódó, az előzőekben megismert, matematikai fogalmak konkrét kifejezéseit sorolom fel (forrás:[2]). A probléma megoldásának implementálásához a rácspontokra és a második derivált differenciáló mátrix alakjára volt szükségem.

Chebyshev-polinomok

$$T_0 \equiv 1$$

$$T_1(x) \equiv x$$

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x) \quad n \geq 1$$

Érvényes:

$$T_n(\cos(t)) = \cos(nt)$$

Gauss-Lobatto rács:

$$x_i = \cos\left(\frac{\pi i}{N}\right) \quad i = 0, \dots, N-1$$

Kardinális függvények:

$$\begin{aligned} C_i(x) &\equiv (-1)^{i+1} \frac{(1-x^2)}{c_i N^2 (x-x_i)} \frac{dT_N(x)}{dx} = \\ &= \frac{2}{N p_i} \sum_{m=0}^N \frac{1}{p_m} T_m(x_i) T_m(x) \end{aligned}$$

$$c_i = \begin{cases} 1 & |i| < N \\ 2 & i = \pm N \end{cases} \quad p_i = \begin{cases} 2 & i = 0 \text{ vagy } N \\ 1 & i = 1, \dots, N-1 \end{cases}$$

Differenciáló mátrix, első derivált:

$$(D_{x;N})_{ij} = \begin{cases} \frac{c_i(-1)^{i+j}}{c_j(x_i-x_j)} & i \neq j \\ \frac{-x_j}{2(1-x_j^2)} & 1 \leq i = j \leq N-1 \\ \frac{2N^2+1}{6} & i = j = 1 \\ -\frac{2N^2+1}{6} & i = j = N \end{cases}$$

$$c_i = \begin{cases} 2 & i = 1 \text{ vagy } N \\ 1 & \text{egyébként} \end{cases}$$

Differenciáló mátrix, második derivált: Mátrixszorzással állítható elő az első derivált mátrixból:

$$D_{xx;N} = D_{x;N}^2$$

2.6. Általánosítás 2 dimenzióra

- 2 dimenzióban dolgozhatunk az 1 dimenziós bázisfüggvény-rendszer szorzatbázisán. Ezen a bázison a **bázisfüggvények** a következő alakúak:

$$\Phi_{m,n}(x, y) \equiv \phi_m(x)\phi_n(y) \quad m = 1, \dots, N_x; \quad n = 1, \dots, N_y$$

- A **2 dimenziós rács** az 1 dimenziós rácsok szorzata:

$$\vec{r} = (x_i, y_j) \quad i = 1, \dots, N_x; \quad j = 1, \dots, N_y$$

- Ugyanúgy a **kardinalis függvények** is szorzatalakban állnak elő:

$$C_{m,n}(x, y) \equiv C_m(x)C_n(y) \quad m = 1, \dots, N_x; \quad n = 1, \dots, N_y$$

- A **megoldás alakja** ekkor:

$$f(x, y) \approx \sum_{i=0, j=0}^N f(x_i, y_j) C_i(x) C_j(y)$$

- A deriváltak előállítás:

A ∂_x operátor a jobboldalra a következőképpen hat:

$$\partial_x f(x, y) \approx \sum_{i=0, j=0}^N f(x_i, y_j) C_j(y) \partial_x C_i(x)$$

A kollokációs pontokban:

$$\partial_x f(x_m, y_n) = \sum_{i=0, j=0}^N f(x_i, y_j) C_j(y_n) \partial_x C_i(x_m)$$

Emlékezzünk vissza, hogy a kollokációs pontokban csak a kollokációs ponthoz tartozó kardinális függvény vesz fel nem 0 értéket (ő az 1 értéket veszi fel). Azaz:

$$f(x_i, y_j)C_j(y_n) = \delta_{jn}f(x_i, y_j)$$

Így könnyen elvégezhetjük a j -re való összegzést:

$$\partial_x f(x_m, y_n) = \sum_{i=0}^N f(x_i, y_n) \underbrace{\partial_x C_i(x_n)}_{\mathbf{D}_{ni}}$$

Ismét egy mátrix-vektor szorzáshoz jutottunk, ahol a vektort a megoldás mátrix n -edik sora képezi, és ahol $\mathbf{D}_{ni}$ elemek pontosan a már 1 dimenzióban megismert $\mathbf{D}$ mátrix elemei. Összefoglalva:

$$\partial_x f(x_m, y_n) = \sum_{i=0}^N \mathbf{D}_{ni} f(x_i, y_n)$$

Hasonlóképpen $\partial_y f(x_m, y_n)$ -et is előállíthatjuk a $\mathbf{D}$ mátrix segítségével (ha négyzetes a tartományunk, és mindkét irányban ugyanolyan a felosztás):

$$\partial_y f(x_m, y_n) = \sum_{j=0}^N f(x_m, y_j) \mathbf{D}_{mj} = \sum_{j=0}^N f(x_m, y_j) \mathbf{D}_{jm}^T$$

2.7. Időfüggő parciális diff. egyenletek explicit időléptetése

Az időt nem fejtettem ki spektrálisan, mert ebben a munkában még csak ismerkedtem a spektrális módszerekkel. Az időt léptettem, és az időléptetéshez az ún. "Method of Lines" módszert használtam, negyedrendű Runge-Kutta léptetéssel.

$$\begin{aligned} u^{(1)} &= u^m \\ u^{(2)} &= u^m + \frac{1}{2} \Delta t \mathcal{L} u^{(1)} \\ u^{(3)} &= u^m + \frac{1}{2} \Delta t \mathcal{L} u^{(2)} \\ u^{(4)} &= u^m + \Delta t \mathcal{L} u^{(3)} \\ u^{(m+1)} &= u^m + \frac{\Delta t}{6} \left(\mathcal{L} u^{(1)} + 2\mathcal{L} u^{(2)} + 2\mathcal{L} u^{(3)} + \mathcal{L} u^{(4)} \right) \end{aligned}$$

Megjegyzés: spektrális térben dolgozva a spektrális együtthatókat léptetjük időben.

2.8. Határfeltételek kielégítése PSD-nél explicit időléptetéssel

A pszeudospektrális kollokációnak megvannak a módszerei arra, hogy peremérték feladatok esetében kielégüljenek a határfeltételek akkoris, ha a bázisfüggvények maguk nem elégítik ki a határfeltételeket. Ilyen módszer például a "**Boundary-Bordering**", ahol a peremfeltétel feladatnál kapott lineáris egyenlet-rendszerhez további egyenleteket adunk, amelyek szerepe a határfeltételek kielégítése. Egy másik ilyen módszer a "**bázis rekombináció**". Ez a módszer transzformációt végez a peremfeltétel feladat parciális differenciálegyenletének alakján, így a transzformált parciális differenciálegyenlet peremfeltételeit homogénné teszi. Ezután az eredeti bázisok olyan lineárkombinációját képezi, amely lineárkombinált bázisok eleget tesznek a homogén határfeltételnek. A homogén határfeltételekkel rendelkező parciális differenciálegyenlet megoldható a lineárkombinált bázisokkal, majd a megoldás visszatranszformálható az eredetileg keresett megoldásra. Részletesen lásd erről [2].

De ha a hővezetés egyenletét időléptetéssel oldjuk meg (tehát az időt nem spektrálisan kezeljük), nem tekinthető peremérték feladatnak, hanem ez esetben egy kezdetiérték feladat.

Implicit időléptetésnél megvan a lehetőségünk arra, hogy mindenegybes lépésben peremértékfeladatot oldjunk meg, tehát kirójuk a határfeltételeket. Ekkor ugyanis eleve minden lépésben egyenlerendszert kell megoldanunk. A határfeltételek kielégítését ez esetben a "bázis-rekombinációs" és "boundary-bordering" algoritmussal is megtehetjük.

Explicit időléptetésnél viszont nem tudjuk használni az előző módszereket a határfeltételek kielégítésére, mivel nem oldunk meg minden lépésben lineáris egyenletrendszert. Máshogyan kell biztosítanunk, hogy az időléptetés ne rontsa el a határfeltételeket.

Mivel ezen munkám egyik célja volt a számolás párhuzamosítása grafikus processzoron, és mivel a lineáris egyenletrendszer megoldást nehéz párhuzamosítani, emiatt a határfeltételek lekezelésének nehézségeinek ellenére mégis az explicit időléptetést választottam.

Mivel az explicit időléptetésnek rengeteg előnyös oldala van, a pszeudospektrális kollokáció irodalma foglalkozik azzal, hogyan lehet explicit időléptetés esetén kielégíteni a határfeltételeket. A következőkben a [3] és [4] cikkekre támaszkodom. A [3] cikkben kifejezetten a fizikai térben lévő léptetés esetén írják le az általam is használt módszereket. [4].ben ezen módszerek létjogosultságát támasztják alá. A következőkben csak arra az esetre szorítkozom, amikor a fizikai téren léptetünk (a kardinális függvénybázist használjuk).

• Dirichlet-határfeltételek

Amikor egy rácspontban fix függvényértéket szabunk ki, az megfelel annak, hogy a rácspontokhoz tartozó kardinális függvény együtthatóját rögzítjük (hiszen az előbbieket szerint a függvényérték a kardinális függvény együtthatója).

Explicit léptetés esetén ezen kiszemelt rácspontbeli függvényértéket is léptetjük, így nem marad fix értéken. Ezt úgy orvosolhatjuk, hogy minden léptetés után visszaírjuk a rácspontokhoz tartozó fix függvényértéket. Ezzel bár a többi rácspontban nem változtatjuk meg a függvényértékeket, mégis kis hibát ejtünk, mivel a kiszemelt rácspontokhoz tartozó kardinális függvény az összes többi rácspontban lévő térkoordináta szerinti deriváltban szerepet játszik. Ez a változtatás viszont csak a határ közelében okoz jelentős hatást, ahol kiróttuk a határfeltételt. Ennek oka az, hogy azon kardinális függvény, amelynek megváltoztattuk az együtthatóját, a szélről távoli rácspontokban nagyon kis deriváltértékeket vesz fel.

Így ha például az (x_0, y_i) pontokban Dirichlet határfeltétel került kitűzésre, minden lépés után az ezen pontokhoz tartozó függvényértéket visszaírom a kívánt értékre:

$$f(x_0, y_i) = \alpha_i$$

Megjegyzés: Ez egyébként megfelel annak, mintha ezen pontokat kihagynám az időléptetésből.

Például ha csakis Dirichlet határfeltételeket használunk 2 dimenzióban, akkor $(N-2) \times (N-2)$ -es megoldás mátrixszal (levágtuk a mátrix széleit) is dolgozhatunk az időléptetésnél, és ekkor a határfeltételek automatikusan kielégülnek. Lásd pl. [1]. Én ezt a technikát nem használtam, mivel vegyes határfeltételekkel kellett dolgoznom.

• Neumann-határfeltételek

A [4] cikk alapján megintcsak azon pontokban változtatom meg a függvényértékeket minden időlépésben, amelyekben Neumann-feltétel van érvényben. A cikk azt mutatja meg (a Chebhysev együtthatókat és nem a kardinális függvény együtthatókat elemezve, de ez az eredményen nem változtat), hogy ezzel a módszerrel kis hibát vétünk. Ennek oka egyrészt az, hogy a kiszemelt rácspontokhoz tartozó kardinális függvénynek van a kiszemelt rácspontban a legnagyobb deriváltja. Másrészt ugyanúgy mint a Dirichlet esetben, elmondható, hogy a szélről távol kis hatást jelent ezen kardinális függvény együtthatójának megváltoztatása.

Így ha például az (x_0, y_i) pontokban (a bal oldalon) Neumann határfeltétel kerül kitűzésre, minden lépés után az ezen pontokhoz tartozó függvényértéket változtatom meg. Kiszámolom a $\mathbf{D}$ mátrix segítségével a bal oldalon a léptetés utáni deriváltat. Majd képezem a kívánt deriváltértékek (β_i) és

ezen léptetés utáni (γ_i) deriváltértékek különbségét, és úgy változtatom meg a függvényértékeket a szélén, hogy a derivált ismét kielégítse a szélén a Neumann-feltételt:

$$f(x_0, y_i) = f(x_0, y_i) + (\beta_i - \gamma_i) \left(\frac{dC_0}{dx}(x_0) \right)^{-1}$$

ahol

$$\gamma_i = \partial_x f(x_0, y_i) = \sum_{l=0}^N D_{il} f(x_l, y_i)$$

Megjegyzés: Egyébként fizikai intuíciónkat nem sérti, hogy mindenképp ott változtatjuk meg a függvényt minden időlépés között, ahol a határfeltételt ki kell elégítenünk.

2.9. Stabilitási kritérium

Az időléptetés stabilitási kritériumának vizsgálata spektrális módszereknél eltér a véges differencia módszereknél használatos módszerektől.

A spektrális stabilitás részletes elemzése túlmutat ezen munka keretein. Ennek elvégzéséről láss többet [5]-ben. Itt csak [5] alapján kvalitatívan próbálom megmagyarázni az empirikusan talált maximális stabil lépközt. Spektrális módszereknél ismeretes a következő ökölszabály:

Ökölszabály: A "method of lines" időléptetés stabil, ha a térbeli operátor sajátértékei Δt -vel skálázva az időléptető operátor stabilitási régiójába esnek.

Ha [?, Stability]Időléptetés és Stabilitási régiók" fejezetében leírtak alapján elvégeznénk a stabilitási elemzést erre a differenciálegyenletre, a következő lehangoló eredményre jutnánk-

$$\Delta t \leq cN^{-4}$$

ahol N^2 a rácspontok száma, c pedig egy konstans, amelyet a léptetési módszer, a differenciálegyenlet alakja, és a D^2 térbeli operátor legnagyobb sajátértéke határoz meg.

Ennek a lehangoló eredménynek két fő oka van. Az egyik fő ok az, hogy Chebyshev-bázis használatánál D^2 legnagyobb sajátértéke az eredeti Gauss-Lobatto rácson $\sim N^4$ -el skálázódik. A másik fő ok, hogy a hővezetés egyenletében időben csak első, míg térben második deriváltat veszünk. D^2 sajátértékeinek csökkentésére léteznek módszerek az irodalomban, amelyek a rács módosításával érik el, hogy D^2 sajátértékei alacsonyabb hatvány szerint skálázódjanak, és így nagyobb időbeli lépközők legyenek használhatóak [3].

A számolásokban α -t 1-nek választottam. A számolást a $(-1, 1) \times (-1, 1)$ tartományon végeztem, 32×32 rácspontból álló rácson (ezt a tartományt a Gauss-Lobatto rács jelölte ki).

Empirikus módon meghatározva a maximális stabil lépköz értéke 32×32 -es rácson: $3 \cdot 10^{-5}$

Összehasonlításként véges differencia módszereknél közelítőleg a Courant-Friedrichs-Lewy stabilitási kritérium erre a problémára (a rács hossza legyen 2, mivel a spektrális esetben is ennyi, és $\alpha \equiv 1$):

$$\frac{\Delta t}{\Delta x^2} = \frac{\Delta t}{4/N^2} \leq 0.5$$

$$\Delta t \leq 2N^{-2}$$

Ezek láttán bár így elsőre egy életre elmegy a kedvünk a spektrális módszerektől, fontos megemlíteni, hogy a valóságban ennyire nem borús a helyzet, és elég szerencsétlenek voltunk, hogy épp belefutottunk ebbe a problémába.

Egyrészt ezen problémára mint említettem, vannak megoldások, amelyekkel a hővezetés egyenletének esetében is elérhető $\Delta t \sum N^{-2}$ skálázódása, másrészt implicit időléptetés esetében a spektrális módszereknél is sokkal nagyobbak a maximális stabil lépközők. [2] például a spektrális módszerek egy előnyeként emeli ki, hogy általában stabilabbak ugyanolyan lépköz mellett a véges differencia módszereknél.

3. Implementálás

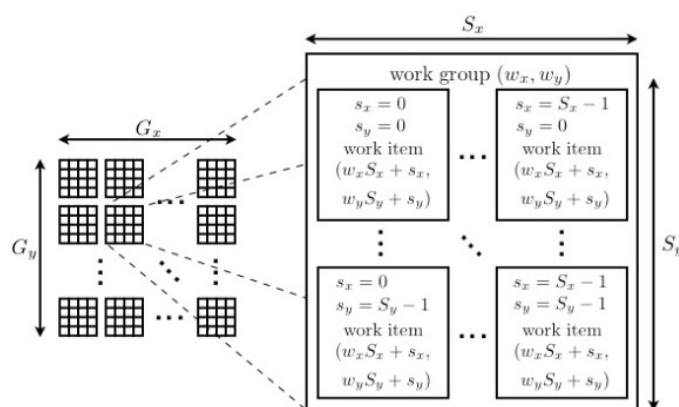
A szimulációt C++ nyelven írtam, mivel ez egy gépközel nyelv, és a CPU, GPU teljesítményösszehasonlítás is egy nemtitkolt cél volt. A GPU kernelek C++-ban íródtak, az OpenCL könyvtárat használva.

A felhasználást tekintve a programkönyvtárak szokásai követtem. A szimulációt egy template osztály valósítja meg. Ezen osztályt példányosítva, majd publikus tagfüggvényeit meghívva állíthatjuk be a szimuláció paramétereit, és futtathatjuk le a szimulációt.

Ezen szimulációs osztály egy általam írt, kis lineáris algebra template könyvtárra épít, így a lineáris algebrai műveletek a kódban jól átláthatóak.

A szimulációs osztály lehetőséget ad a Dirichlet és Neumann határfeltételek, a kezdeti feltétel, a lépésköz és időhossz tetszőleges állítására, valamint meghatározhatjuk, hogy a számolás CPU-n párhuzamosíthatatlanul, vagy GPU-n párhuzamosítva fusson-e. Az eredményt egy kényelmi függvénnyel sktruktúráltan file-ba nyomtathatjuk.

3.1. GPU tapasztalatok



1. ábra. Az OpenCL hierrarchia-struktúra

A pontos implementálási részletekkel nem fárasztanám az olvasót, inkább csak kiemelnék pár lényegesebb pontot:

- Minden Runge-Kutta lépéshez külön kernel tartozik. Erre amiatt volt szükség, mivel a kernel indítások között szinkronizálódik a globális memória, amelyben a Runge-Kutta léptetés átmeneti adat-tömbjei és eredménye található.
- A lokális memória kicsi, ezért hogy nagy rácsra is számolni tudjunk, úgy kellett megírni a kerneleket, hogy a lokális memóriába ne olvassunk be mátrixot a globális memóriából.
- Lokális memória kerítés használatával tudom a szálakat egymással szinkronizálni. Így érem el azt is, hogy kritikus lépések előtt a lokális memória tartalma határozott legyen.
- Egy külön kernel rakja rendbe a határfeltételeket a léptetett megoldáson minden léptetés végeztével. Ennek a kernelnek körülményes volt az implementálása, de ha minden lépés után a host-oldalon rakjuk rendbe a határfeltételeket, akkor a GPU teljesítményelőnye szinte teljesen megszűnik. A megoldás nagy bufferének olvasása és írása sokkal több időt vesz igénybe egy kernel indításánál
- Annak érdekében, hogy ne kelljen feleslegesen másolnom bufferek között, lépésenként váltogatom, hogy melyik bufferben van a régi eredmény, és melyikbe kerüljön az új
- A CPU-s és GPU-s számolások pontosan ugyanazokat az eredményeket adják, mert pontosan ugyanazok a dupla pontosságú lebegőpontos műveletek hajtódnak végre a GPU-n mint a CPU-n. Csak az adatmozgatás jellege különbözik.

- Az, hogy mennyire jön ki a párhuzamosítás ereje, attól függ, hogy mekkora a rács, mivel a rács méretével nő annak az időnek a relatív hányada, amelyet a GPU ténylegesen a számolással tölt. Attól, hogy hányat léptettünk, egy minimális küszöbérték fölött gyakorlatilag nem függ a CPU és GPU futtatási idejei között lévő szorzó. Egy bizonyos rácsméret felett a két futtatási idő között beáll egy konstans szorzó.

Mindent összevetve elmondható, hogy nagy rácsoknál a CPU és GPU futtatási idejei között lévő szorzó egy ~ 15 -ös faktor a GPU javára a saját laptopomon.

Az összehasonlítás akkor lenne teljesen igazságos a CPU és GPU között, ha a processzoron is párhuzamosítottam volna a mátrixszorzást, de ezt nem tettem meg. A processzoros számolások így a magok számától függően szintén töredék idő alatt futhattak volna le, de a GPU-kban az architektúra miatt több mag van, ezért a GPU nagy rácsnál általában győzni fog.

3.2. A kiadott feladat megoldása

A kiadott feladat:

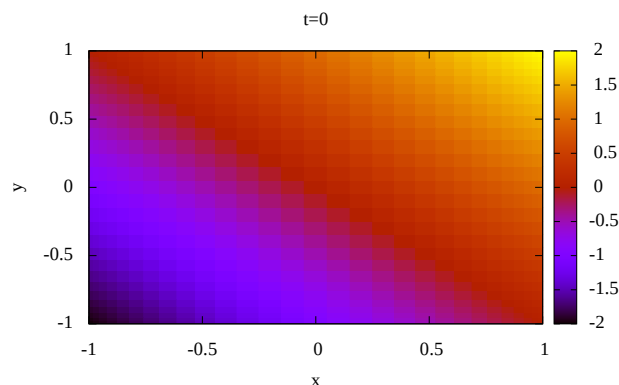
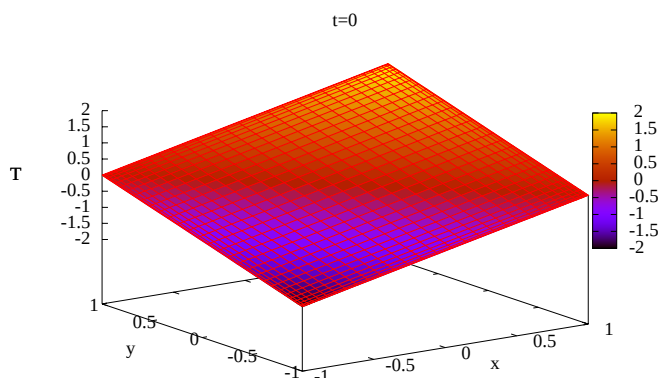
Oldja meg az időfüggő hővezetés egyenletet negyszögletes síklemezre a következő határfeltételekkel:

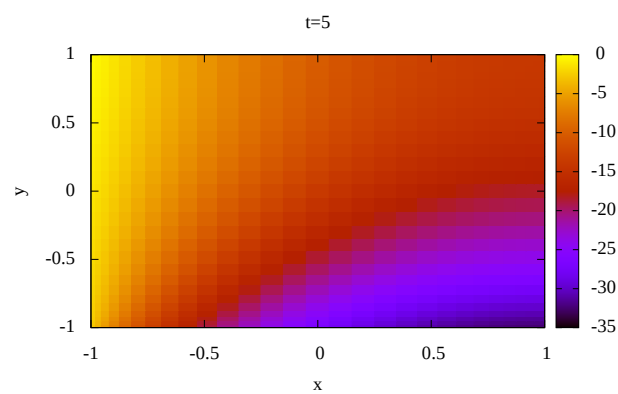
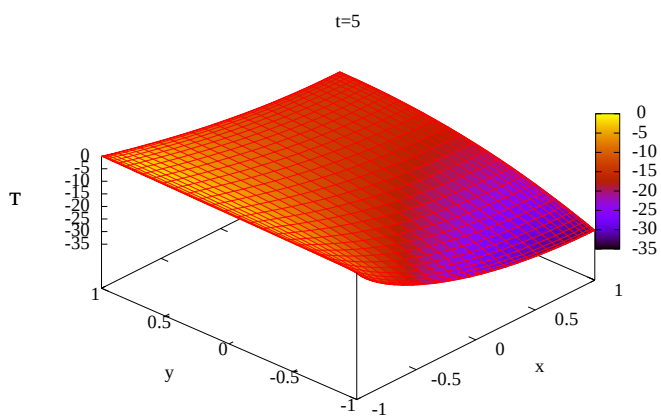
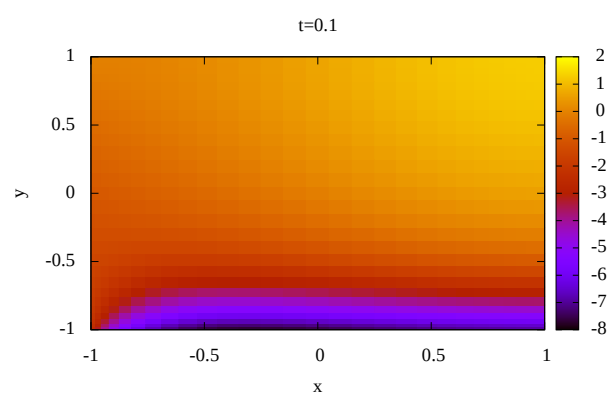
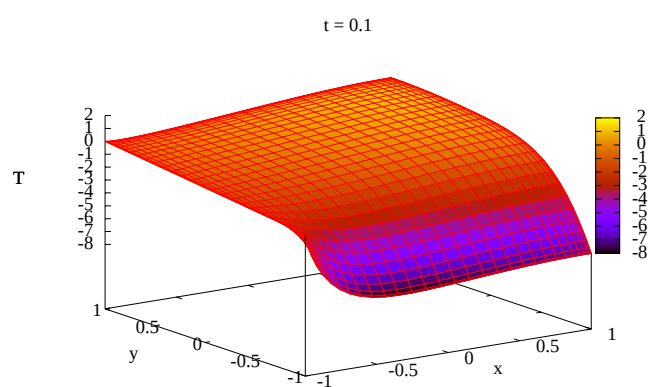
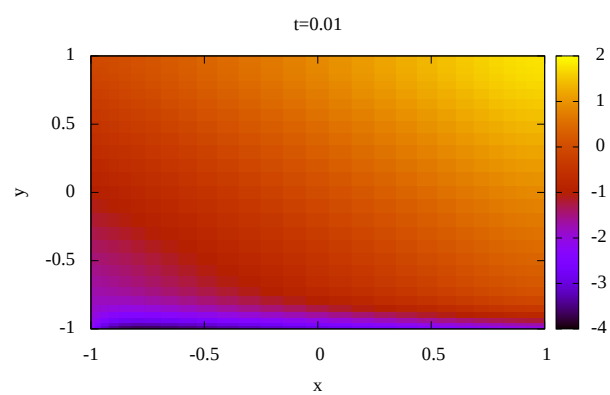
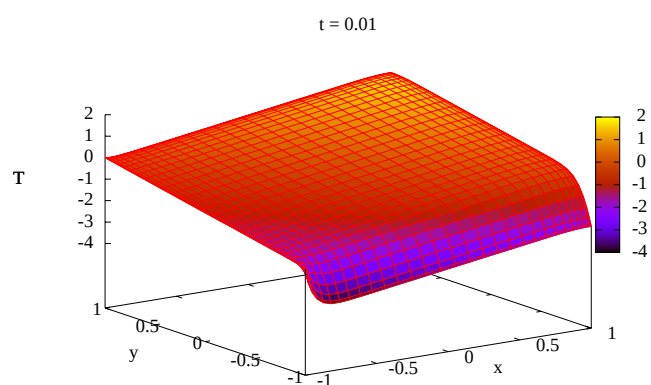
- baloldalt adott a hőmérséklet, az él mentén lineáris a hőmérsékletprofil
- alul adott konstans a hőáram
- a másik két él mentén tökéletes a hőszigetelés.

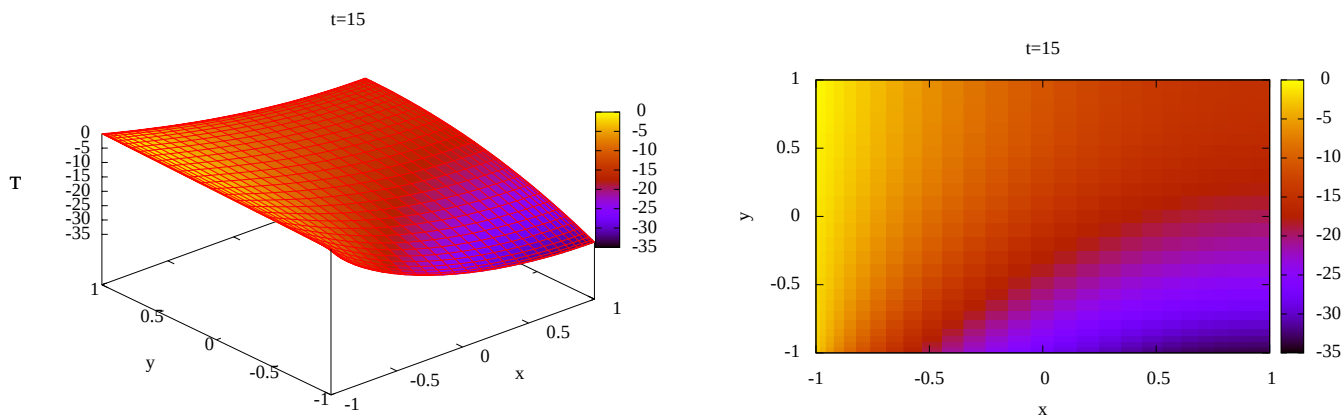
A kezdeti feltétel a lap mentén mindkét derékszögű koordinátában lineáris, ami egyben a baloldali él mentén a határfeltételnek is eleget tesz.

A határfeltételeket és a kezdeti feltételeket a leírás alapján a következőképpen választottam:

- kezdeti feltétel: $f_{t=0}(x, y) = x + y$
- baloldalt ennek a kezdeti feltételnek megfelelően lineáris a hőmérsékletprofil: $f(-1, y) = -1 + y$
- alul Neumann-feltétel. Az alsó szél mentén $\partial_y f(x, -1) = 20$ konstans fluxus van jelen
- felül és jobboldalt Neumann-feltétel, 0 a fluxus: $\partial_y f(x, 1) = 0$, $\partial_x f(1, y) = 0$







7. ábra. A hőmérséklet időbeli fejlődése a lapon 3D-ós és hőmérséklettérkép grafikonokkal szemlélítve

A numerikus megoldás összhangban van fizikai elvárásainkkal. Az alul lévő Neumann-feltétel hűti a lapot, de a közvetlen szomszédos Dirichlet-feltétel miatt asszimptotikusan kialakul egy egyensúly. Láthatóan a megoldás keveset változik $t = 5$ és $t = 15$ között, ezért ezek a megoldások valószínűleg a probléma időben asszimptotikus megoldásai.

3.3. Az analitikus és numerikus megoldások összehasonlítása egyszerű esetben

Kíváncsi dolog a numerikus szimuláció megoldásának összevetése ismert analitikus megoldással, hiszen így képet kaphatunk a numerikus módszerünk pontosságáról.

A hővezetés egyenlete esetében az analitikus megoldás tetszőleges kezdő- és határfeltételek esetén általában végtelen Fourier sor alakjában áll elő. Nemperiodikus határfeltételek esetén a sor lassan konvergál, és relatíve sok tagra felösszegezve is egyes helyeken erősen oscillál, így általában nehéz az analitikus megoldás kiértékelése.

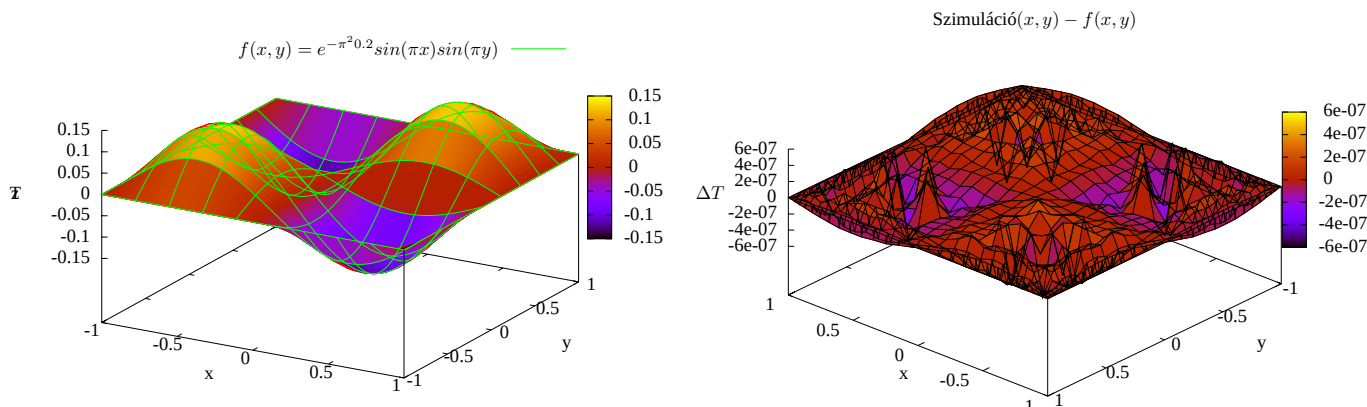
Emiatt én egy olyan esetet vettem, amikor az analitikus megoldás egyszerű alakú. Ilyen egyszerű eset az, amikor az összes szélén rögzített, $T = 0$, a hőmérséklet, és a kezdeti feltétel:

$$T(x, y, t = 0) = \sin(\pi x) \sin(\pi y)$$

Ekkor a megoldás a következő alakú (lecseng):

$$T(x, y, t) = e^{(-2\pi^2 t)} \sin(\pi x) \sin(\pi y)$$

A következő szimuláció $\Delta t = 10^{-6}$ -os időléptetéssel futott $t = 0.1$ -ig. Az alábbi két ábra a numerikus és analitikus megoldást hasonlítja össze.



(a) A szimulált megoldáson szuperponálva az analitikus megoldás, $t = 0.1$

(b) A szimulált és az analitikus megoldás különbsége, $t = 0.1$

3.4. További vizsgálati lehetőségek

Sikerült a pszeudospektrális módszer segítségével egy elég általános hővezetési feladatot megoldanom, de a pszeudospektrális módszerben tett felfedező utam nemvárt meglepetéseket hozott. A módszer optimalisabb kihasználása érdekében a következő kérdések vizsgálatát tartanám érdekesnek:

- **Az időléptetés stabilitásának részletes vizsgálata**
A stabilitáselemzés elvégzése. Módosított rács használata hogyan hat a maximális lépésköze?
- **implicit időléptetés vizsgálata**
Az implicit időléptetés nehezebben párhuzamosítható, így érdekes kérdés, hogy ha adott idő alatt adott pontossággal akarunk megoldani egy problémát, akkor az explicit vagy implicit időléptetést válasszuk-e.
- **Jelent-e különbséget, hogy a spektrális vagy a fizikai térben léptetjük a megoldást?**
- **Mekkora előnyt jelentene, ha a térbeli deriváltak nem mátrixszorzással, hanem a spektrális együtthatók segítségével rekurziós relációkkal értékelnék ki?**
- **A numerikus és analitikus megoldások összevetése egyéb esetekben**
- **További elemzése annak, hogy a GPU-s számolás mekkora teljesítménynövekedést okoz?**
Egy adott architektúrán el lehet dönteni, mekkora rácsméretnél érdemes a számolást GPU-n végrehajtani?

Hivatkozások

- [1] Numerical Recipes-The Art of Scientific Computing - Third Edition(2007), C++,Cambridge.Press
- [2] John P. Boyd: Chebyshev and Fourier Spectral Methods, Second Edition
<http://perso.uclouvain.be/alphonse.magnus/num1a/boyd01.pdf>
- [3] Keaton J. Burns: Chebyshev Spectral Methods with applications to Astrophysical Fluid Dynamics
http://kburns.bitbucket.org/docs/chebyshev_essay.pdf
- [4] Jian-Ping Wang, Yoshiaki Nakamura, Michiru Yasuhara: Global Coefficient Adjustment Method for Neumann Condition in Explicit Chebyshev Collocation Method and Its Application to Compressible Navier-Stokes Equations
- [5] Trefethen L.N., Spectral Methods in MATLAB