Lietuvos matematikos rinkinys
Lietuvos matematikų draugijos darbai, ser. B
53 t., 2012, 7–12

ISSN 0132-2818
www.mii.lt/LMR/

Pagrindinių komponenčių išskyrimo metodo taikymas kai kuriems parabolinio tipo uždaviniams

Gerda Jankevičiūtė, Teresė Leonavičienė, Raimondas Čiegis

Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Fundamentinių mokslų fakulteto
Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius

E. paštas: gerda.jankeviciute@vgtu.lt, terese.leonaviciene@vgtu.lt,

E. paštas: raimondas.ciegis@vgtu.lt

Santrauka. Šiame straipsnyje pagrindinių komponenčių išskyrimo metodas taikytas vienmačiams parabolinio tipo uždaviniams spręsti. Pirmiausia trumpai aptarta šio metodo taikymo vienmačio parabolinio uždavinio sprendimui schema, o po to nagrinėtas metodo jautrumas difuzijos koeficiento ir šaltinio funkcijos atžvilgiu. Gauti skaitiniai rezultatai pateikiami grafikais ir lentelėmis.

Raktiniai žodžiai: parabolinio tipo lygtys, skaitiniai metodai, pagrindinių komponenčių išskyrimo metodas.

1 Įvadas

Parabolinio tipo lygtys sutinkamos nagrinėjant įvairius fizikinius procesus. Difuzija yra stebima įvairių cheminių reakcijų metu, ji svarbi opcijonų dinamikos modeliuose ekonomikoje, analizuojant Brauno judesius tikimybių teorijoje ir technologiniuose taikymuose. Tokiems uždaviniams spręsti plačiai taikomi skaitiniai metodai: įvairios išreikštinės ir neišreikštinės baigtinių skirtumų schemos, baigtinių tūrių, Galiorkino ar spektriniai metodai.

Nagrinėjant realius fizikinius procesus, pavyzdžiui ličio jonų koncentracijos kitimą ličio jonų baterijoje [4] ar skysčių dinamikos uždavinius [1, 2, 3], susiduriame su labai didelės dimensijos uždaviniais. Tokių uždavinių sprendimas net ir specializuotais, lygiagrečiaisiais skaitiniais metodais tampa ganėtinai ilgas.

Natūraliai atsiranda poreikis ieškoti būdų, leidžiančių sumažinti nagrinėjamo uždavinio dimensiją ir paspartinti skaičiavimus, neprarandant pagrindinės informacijos apie procesą ir labai nepadidinant skaičiavimo paklaidų. Vienas iš tokių metodų yra pagrindinių komponenčių išskyrimo metodas (PKIM), kuris dar vadinamas Karhunen–Loeve dekompozicija arba ortogonaliosios dekompozicijos metodu [2, 6]. Šiuo metodu naudojant ortogonaliąsias funkcijas sumažinama uždavinio dimensija ir ieškoma naujo uždavinio sprendinių. Naudojant nesudėtingas transformacijas gaunamos ir pradinio uždavinio sprendinių aproksimacijos.

2 Uždavinio formulavimas ir diskretizacija

Nagrinėjame vienmatį parabolinį uždavinį su pradinėmis ir kraštinėmis sąlygomis:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(k(x)\dfrac{\partial u}{\partial x}\right) + f(x,t), & 0 < t \leqslant T,\ 0 < x < 1, \\ u(0,t) = 0, \qquad u(1,t) = 0 & 0 \leqslant t \leqslant T, \\ u(x,0) = \psi(x). \end{cases} \tag{1}$$

Nagrinėjamoje srityje apibrėžiame diskretųjį tinklelį diskretizuodami erdvinę ir laiko koordinates $\bar{\omega}_{h\tau} = \bar{\omega}_h \times \bar{\omega}_\tau$, čia $\bar{\omega}_h = \omega_h \cup \{x_0, x_N\}$, $\bar{\omega}_\tau = \omega_\tau \cup \{t_0\}$, $h = 1/N$,

$$\omega_h = \{x_i = ih,\ i = 1, 2, \ldots, N-1\}, \qquad \omega_\tau = \{t_j = j\tau,\ j = 1, 2, \ldots, K,\ t_K = T\}.$$

Išvestines aproksimuojame taip:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_i - u_{i-1}}{h}, \qquad \frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\tau},$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(k(x)\frac{\partial u}{\partial x}\right) \approx AU = \frac{1}{h^2}\big(k_{i+0,5}u_{i+1} - (k_{i+0,5} + k_{i-0,5})u_i + k_{i-0,5}u_{i-1}\big),$$

čia $k_i = k(x_i)$, $u_i^j = u(x_i, t_j)$, $u_i^0 = \psi(x_i)$, $u_0^j = 0$, $u_N^j = 0$.

Diskretųjį uždavinį sprendžiame naudodami Kranko–Nikolsono schemą [5], kurios aproksimacijos paklaida yra $\mathcal{O}(\tau^2 + h^2)$ eilės, t. y. sprendinio naujame laiko sluoksnyje ieškome taip:

$$U^{j+1} = U^j + \frac{\tau}{2}AU^j + \frac{\tau}{2}AU^{j+1} + \tau F^j. \tag{2}$$

(1) uždavinys – tai bendresnė parabolinio tipo lygtis nei nagrinėtoji [6] straipsnyje. Imdami lygtį su kintamu difuzijos koeficientu ir įtraukdami šaltinio funkciją siekiame apibendrinti [6] darbe taikytą metodiką ir gautus rezultatus, atsakyti į klausimą, ar PKIM metodas gali būti taikomas bendresniems parabolinio tipo uždaviniams spręsti tais atvejais, kai nepritaikomas standartinis Furjė metodas.

3 PKIM taikymas paraboliniam uždaviniui

Pagrindinis PKIM metodo tikslas yra neprarandant svarbiausios informacijos apie sprendinį sumažinti pradinio uždavinio dimensiją. Ieškome tokios ortogonalių bazinių funkcijų sistemos $\{\phi_j^l\}$, kuri yra optimizavimo uždavinio

$$\max_{1 \leqslant l \leqslant s} \sum_{i=1}^{M} \left| \sum_{j=1}^{N} u_j^i \phi_j^l \right|^2$$

sprendinys, tenkinantis normavimo sąlygą $(\phi^l, \phi^l) = 1$.

Naudodamiesi PKIM idėjomis, kurios plačiau aprašytos [2, 6], aptarsime vienmačio parabolinio tipo uždavinio sprendimo schemą:

- Kranko–Nikolsono metodu (2) sprendžiame (1) uždavinį ir fiksuojame sprendinius M laiko sluoksniuose, t. y. sudarome matricas

$$U = \begin{pmatrix} u_1^1 & u_1^2 & \dots & u_1^M \\ u_2^1 & u_2^2 & \dots & u_2^M \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_N^1 & u_N^2 & \dots & u_N^M \end{pmatrix} \quad \text{ir} \quad B = \frac{1}{M} U U^T.$$

- Randame matricos B SVD (singular value decomposition) skaidinį:

$$B = SDV^T,$$

čia D – įstrižaininė $(N \times N)$ eilės matrica, kurios pagrindinės įstrižainės elementų reikšmės lygios $\frac{\lambda_i^2}{M}$ (λ_i – matricos U singuliariosios reikšmės). Reikšmes λ_i išdėstome nedidėjančia tvarka.

- Pasirenkame minimalų s tikrinių vektorių skaičių, leidžiantį išsaugoti apie 99% pradinės informacijos, t. y.

$$\sum_{i=1}^{s} \lambda_i \geqslant 0.99 \sum_{i=1}^{N} \lambda_i.$$

Pasirinktieji vektoriai sudaro ortonormuotą erdvės R^s bazę ir vadinami pagrindinėmis komponentėmis. Pagrindinės komponentės leidžia (2) uždavinio sprendinį užrašyti kaip tiesinį dėstinį:

$$U^j = \Phi Y^j, \tag{3}$$

čia U^j yra N-matis vektorius kiekviename laiko sluoksnyje, Φ – pagrindinių komponenčių $(N \times s)$ matrica, o Y^j – dėstinio koeficientų s-matis vektorius.

- Įrašę (3) išraišką į (2) diskretųjį uždavinį, turime

$$\Phi Y^{j+1} = \Phi Y^j + \frac{\tau}{2} A \Phi Y^j + \frac{\tau}{2} A \Phi Y^{j+1} + \tau F^j.$$

Kadangi $\Phi^T \Phi = I$, tai PKIM sudarome mažesnės dimensijos uždavinį:

$$Y^{j+1} = Y^j + \frac{\tau}{2} \Phi^T A \Phi Y^j + \frac{\tau}{2} \Phi^T A \Phi Y^{j+1} + \tau \Phi^T F^j$$

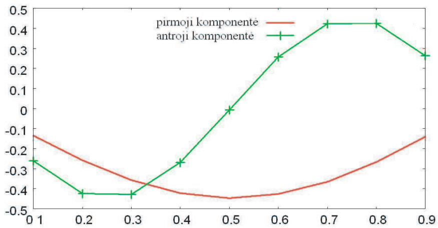
(2) uždavinio matricos dimensija buvo $N \times N$, o išskyrus pagrindines komponentes ji sumažėja iki $s \times s$.

- Išsprendę mažesnės dimensijos uždavinį, naudodamiesi (3) išraiška surandame pradinio uždavinio diskretųjį sprendinį.

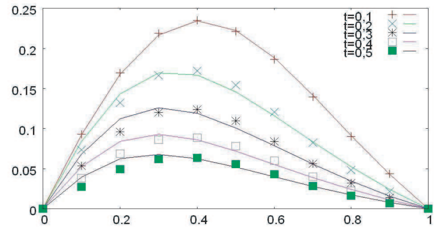
PKIM surastojo sprendinio (jį pažymėkime U_{PK}^j) paklaidą įvertiname taip:

$$\left| u(x_i, t_j) - U_{PK}^j \right| \leqslant \left| u(x_i, t_j) - U^j \right| + \left| U^j - U_{PK}^j \right|.$$

Čia $|u(x_i, t_j) - U^j|$ yra $\mathcal{O}(\tau^2 + h^2)$ eilės Kranko–Nikolsono metodo paklaida, o $|U^j - U_{PK}^j|$ gaunama vertinant skirtumą tarp $N \times N$ ir $s \times s$ dimensijos uždavinių sprendinių M laiko sluoksniuose ir yra $\mathcal{O}(\max\{\lambda_{s+1} \exp(\frac{K}{M}), \tau^2, h^2\})$ eilės dydis [6].



1 pav. Parabolinio uždavinio dvi pagrindinės komponentės.



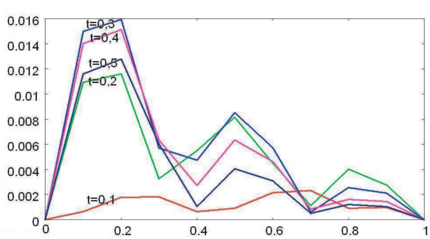
2 pav. Pradinio ir redukuotojo uždavinių sprendiniai.

4 Įvairių vienmačių parabolinių uždavinių sprendimas PKIM

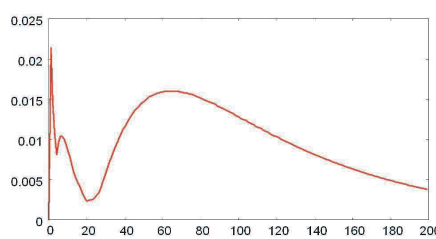
Pirmiausia nagrinėjame vienmatį parabolinį uždavinį (1), kai $k(x) = 1$, $\psi(x) = x(1-x)e^{x^2}$, $f(x,t) \equiv 0$. Pasirenkame erdvinės koordinatės žingsnį $h = 0,1$, laiko koordinatės – $\tau = 0,005$ ir suformuojame $M = 20$ sprendinių rinkinį laiko momentais $t = 0,1; 0,2; \ldots; 2$, kurį naudojame parabolinio uždavinio tikriniams vektoriams nustatyti. Beveik visą informaciją apie sprendinį turi dvi moduliu didžiausias tikrines reikšmes atitinkantys tikriniai vektoriai – uždavinio pagrindinės komponentės (žr. 1 pav.). Rezultatai yra analogiški publikuotiems [6] straipsnyje. Pastebėkime, kad tokius rezultatus gauname ir Furjė metodu.

Mūsų tikslas yra išsiaiškinti, ar nustatytosios pagrindinės komponentės tinka ir bendresniems paraboliniams uždaviniams. Sprendėme uždavinius, kuriuose keitėme difuzijos koeficientą ir šaltinio funkciją, bet taikydami PKIM metodą naudojome pagrindines komponentes, surastas (1) uždaviniui, kai $k(x) = 1$, $\psi(x) = x(1-x)e^{x^2}$, $f(x,t) \equiv 0$.

1 pavyzdys. Nagrinėjame PKIM jautrumą parabolinio uždavinio difuzijos koeficiento atžvilgiu. Sprendžiame (1) uždavinį, kai $k(x) = 0,1 + x^2$, $\psi(x) = x(1-x)e^{x^2}$, $f(x,t) \equiv 0$. Remdamiesi PKIM metodo idėjomis ir taikydami 3 skyriuje aprašytą algoritmą, sudarome ir sprendžiame redukuotą 2×2 dimensijos uždavinį. 2 pav. matome pradinio (ištisinė linija) ir redukuotojo (taškeliai) uždavinių sprendinius laiko momentais $t = 0,1$, $t = 0,2$, $t = 0,3$, $t = 0,4$, $t = 0,5$, o 3 pav. pavaizduotos paklaidos $|U_i^j - U_{iPK}^j|$, $i = 1, \ldots, N-1$. Pastebime, kad didžiausios paklaidos gaunamos pirmuosiuose laiko sluoksniuose, o vėliau jos mažėja (4 pav.). 1 lentelėje matome skaičiavimų rezultatus.



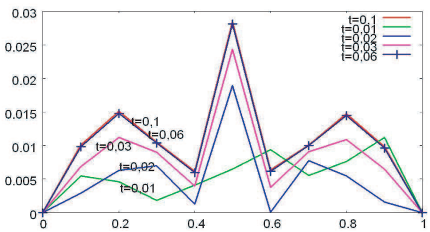
3 pav. Paklaidų $|U^j - U^j_{PK}|$ grafikas.



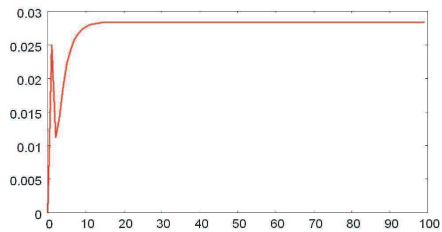
4 pav. Paklaidų dinamika.

1 lentelė. 1 pavyzdžio skaičiavimų rezultatų lentelė.

		U^j	U^j_{PK}	$\lvert U^j - U^j_{PK}\rvert$
$t = 0,2$	$x = 0,2$	0,14348590	0,13187281	0,01161309
	$x = 0,9$	0,02418064	0,02142238	0,00275826
$t = 0,8$	$x = 0,2$	0,02429741	0,01800231	0,0062951
	$x = 0,9$	0,00300476	0,00248787	0,000051689



5 pav. 2 pvz. paklaidos $\lvert U^j - U^j_{PK}\rvert$.



6 pav. 2 pvz. paklaidų kitimas.

2 pavyzdys. Nagrinėjame PKIM jautrumą parabolinio uždavinio šaltinio funkcijos atžvilgiu. Sprendžiame (1) uždavinį, kai $k(x) = 1$, $f(x,t) = \frac{1}{\pi}\frac{0{,}05}{(x-0{,}5)^2+0{,}05^2}$, $\psi(x) = x(1-x)e^{x^2}$. Paklaidas $\lvert U^j - U^j_{PK}\rvert$ ir jų kitimo grafiką matome 5, 6 pav.

Šie pavyzdžiai parodo, kad nustatytosios parabolinio uždavinio pagrindinės komponentės neblogai tinka ir modifikuotiems uždaviniams. Tačiau didesnį tikslumą gautume tada, jei pagrindines komponentes surastume atsižvelgdami į sprendžiamo uždavinio specifiką (įvertintume tai, kad pasikeitė difuzijos koeficientas ar šaltinio funkcija).

5 Rezultatų aptarimas ir išvados

Apibendrinę 4 skyriaus skaičiavimų rezultatus, galime daryti tokias išvadas:

1. PKIM leidžia ženkliai sumažinti pradinio uždavinio dimensiją neprarandant pagrindinės informacijos apie uždavinio sprendinį.
2. Kai pagrindinės komponentės yra parenkamos atsižvelgiant į suformuluotą uždavinį, sprendinių paklaidos atitinka joms keliamus reikalavimus.

Literatūra

[1] J.A. Atwell, J.T. Borggaard and B.B. King. Reduced order controllers for Burgers' equation with a nonlinear observer. *Int. J. Appl. Math. Comput. Sci.*, **11**(6):1311–1330, 2001.

[2] G. Berkooz, P. Holmes and J.L. Lumley. The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flows. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, (25):539–575, 1993.

[3] J. Burkardt, M. Gunzburger and H.-C. Lee. POD and CVT-based reduced-order modeling of Navier–Stokes flows. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg*, (196):337–355, 2006.

[4] L. Cai and R.E. White. Reduction of model order based on proper orthogonal decomposition for litium-ion battery simulations. *J. Electr. Soc.*, **156**(3):A154A161, 2009.

[5] R. Čiegis. *Diferencialinių lygčių skaitiniai sprendimo metodai.* Technika, Vilnius, 2003.

[6] P. Sun, Z. Luo and Y. Zhou. Some reduced finite difference schemes based on a proper orthogonal decomposition technique for parabolic equations. *Appl. Num. Math.*, (60):154–164, 2010.

SUMMARY

Proper orthogonal decomposition method for some parabolic type equations
G. Jankevičiūtė, T. Leonavičienė and R. Čiegis

In this paper proper orthogonal decomposition method for 1D parabolic type equations is described. First basic ideas of method are presented and application scheme for compiutations is derived. Later the sensitivity of proper orthogonal decomposition method is analyzed depending on the diffusion coefficient and source function. The obtained numerical results are presented in figures and tables.

Keywords: parabolic equations, numerical methods, proper orthogonal decomposition method.