Métodos numéricos

Pablo Dmitruk

2do cuatrimestre 2021 - DF/FCEN/UBA

Métodos Espectrales

Libros:

Chebyshev and Fourier spectral methods (J.P. Boyd)

A practical guide to pseudospectral methods (B. Fornberg)

Spectral methods in Matlab (L. Trefethen)

→ visto cómo un paso al límite de diferencias finitas (o polinomios algebraicos)

Sup. una ec. dif. del tipo:

$$\mathcal{L}(u) = f(x) \;\; , \;\; u = u(x)$$

$$a \leq x \leq b \;\;, u(x=a) = u_a \;\; , \;\; u(x=b) = u_b$$

operador diferencial (contiene $\dfrac{\partial}{\partial x}$, $\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}$)

→ expandimos $u(x)$ con N funciones base $\phi_n(x)$

$$u(x) \simeq \sum_{n=0}^{N} c_n \; \phi_n(x) = u_N(x)$$

Esto podría ser por ejemplo el truncamiento de una serie de Fourier (funciones trigonométricas)

$$u(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \; e^{inx2\pi/L} \quad , \;\; a = 0 \; , \; b = L$$

reemplazamos u_N en la ec. dif. y pedimos que se minimize el *residuo* $R_N(x) = \mathcal{L}(u_N) - f(x)$

Cómo elegimos las ϕ_n ? $\rightarrow$ según las c.c. : func. trigonométricas (caso periodico)

polinomios Chebyshev (caso no periodico)

funciones no nulas por secciones (elementos finitos)

fáciles de derivar

Cómo obtenemos los c_n ?

es cómo un producto interno

R_N y ϕ_n ortogonales

$\rightarrow$ Galerkin: asumimos ϕ_n satisfacen las c.c. y pedimos

$$\int_a^b R_N(x)\phi_n(x)\, w(x)dx = 0 \quad , \quad n = 0, \ldots, N$$

si no se llama método Tau

son N+1 ecs con N+1 inc. $c_0, \ldots, c_N$

R_N fuera del subespacio generado por las ϕ_n

$\rightarrow$ colocación o pseudo-espectral (PS)

se introduce una grilla $x_0, \ldots, x_N$

(N+1 puntos en el intervalo [a,b])

con valores asociados $u_0, \ldots, u_N$ y pedimos $R_N(x_i) = 0 \quad , \quad i = 0, \ldots, N$

$c_0, \ldots, c_N$ $\longleftarrow$ son N+1 inc. y N+1 ecs.

Algunas consideraciones:

las func. trigonométricas (o exp. complejas) lo cumplen

se busca que las ϕ_n sean fáciles de derivar

$$\frac{d}{dx}\left(\sum_{n=1}^{N} c_n \phi_n(x)\right) = \sum_{n=1}^{N} d_n \phi_n(x) \iff \frac{d\phi_n}{dx} \text{ en terminos de } \phi_1, \ldots, \phi_N$$

la derivada $\frac{du_N}{dx}$ en un punto x_i depende de $c_0, \ldots, c_N \iff u_0, \ldots, u_N$

global (PS) vs local (FD)

→ esto permite obtener un orden alto de aproximación

en FD una aproximación local con 2 puntos, centrada, daría $O(\Delta x^2)$

aumentando N, si $\Delta x = 1/N$ el error escala cómo $O(1/N^2)$

en PS una aprox. con N+1 puntos da $O(\Delta x^N)$

y al aumentar N, si $\Delta x = 1/N$ el error escala cómo $O((1/N)^N)$

→ mucho más preciso !!

convergencia *algebraica* vs convergencia *geométrica*

→ se dice que los métodos espectrales tienen “precisión infinita”

Donde se usan ?

→ c.c. sencillas → periódicas → fluidos alto Re: turbulencia → mucha precisión

→ pronóstico numérico → modelos de circulación global

espectral en una esfera → armónicos esféricos cómo funciones base

→ muy apropiados p/ problemas no lineales → aliasing

Método Galerkin

$$\mathcal{L}(u) = f(x)$$

$$u(x) \simeq \sum_{n=0}^{N} c_n \, \phi_n(x) = u_N(x) \qquad R_N(x) = \mathcal{L}(u_N) - f(x)$$

$$(R_N, \phi_n) = \int_a^b R_N(x)\phi_n(x) \, w(x) dx = 0$$

(R fuera del subespacio generado por las funciones base)

$$(\mathcal{L}(u_N) - f(x), \phi_n(x)) = 0 \ \Rightarrow \ \boxed{(\mathcal{L}(u_N), \phi_n) = (f, \phi_n) \ \ ; \ \ n = 0, \ldots, N}$$

$$\text{Si } \mathcal{L} \ \text{ lineal } \ \mathcal{L}(u_N) = \sum_{n=0}^{N} c_n \mathcal{L}(\phi_n)$$

$$\Rightarrow \ (\mathcal{L}(u_N), \phi_m) = \sum_{n=0}^{N} c_n (\mathcal{L}(\phi_n), \phi_m) = (f, \phi_m) \ \ ; \ \ m = 0, \ldots, N$$

$$\Rightarrow \sum_{n=0}^{N} c_n P_{mn} = f_m \qquad P_{mn} = (\mathcal{L}(\phi_n), \phi_m) \ \ , \ \ f_m = (f, \phi_m)$$

$$\bar{\bar{P}} \bar{c} = \bar{f} \ \Rightarrow \ \bar{c} = \bar{\bar{P}}^{-1} \bar{f}$$

Ejemplo (armado) :

$$\frac{d^2u}{dx^2} - \frac{1}{2}u = -\frac{3}{2}\cos(x) - \frac{9}{2}\cos(2x) \qquad u(x=0) = u(x=2\pi)$$

c.c. periódicas

$$\rightarrow \mathcal{L} = \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{2} \qquad f = -\frac{3}{2}\cos(x) - \frac{9}{2}\cos(2x)$$

$$u(x) \simeq u_2(x) = c_0 + c_1 \cos(x) + c_2 \cos(2x)$$

$$(\mathcal{L}(u_2), \phi_n) = \int_0^{2\pi} \left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{2}\right] u_2(x) \ \cos(nx)dx \quad , \quad n = 0, 1, 2$$

$$\boxed{(\mathcal{L}(u_N), \phi_n) = (f, \phi_n) \quad ; \quad n = 0, \ldots, N}$$

$$\frac{du_2}{dx} = -c_1 \sin(x) - 2c_2 \sin(2x)$$

$$\frac{d^2u_2}{dx^2} = -c_1 \cos(x) - 4c_2 \cos(2x)$$

$$\int_0^{2\pi} \cos(mx)\cos(nx)dx = \pi\delta_{mn}$$

$$= 2\pi \ \text{ si } \ m = n = 0$$

$$(\mathcal{L}(u_2), \phi_0) = -\pi c_0 \qquad (f, \phi_0) = 0 \qquad c_0 = 0$$

$$(\mathcal{L}(u_2), \phi_1) = -\frac{3}{2}\pi c_1 \qquad (f, \phi_1) = -\frac{3}{2}\pi \qquad c_1 = 1$$

$$(\mathcal{L}(u_2), \phi_2) = -\frac{9}{2}\pi c_2 \qquad (f, \phi_2) = -\frac{9}{2}\pi \qquad c_2 = 1$$

$$\boxed{u(x) = \cos(x) + \cos(2x)}$$

Ejemplo 2: $$\frac{d^2u}{dx^2} + [\cos(x) + \cos^2(x)]\, u = \exp[-1 + \cos(x)]$$ $$u(x=0) = u(x=2\pi)$$

c.c. periódicas

$$\rightarrow \mathcal{L} = \frac{d^2}{dx^2} + [\cos(x) + \cos^2(x)] \qquad f(x) = \exp[-1 + \cos(x)]$$

Sup. $$u(x) \simeq u_3(x) = c_0 + c_1\cos(x) + c_2\cos(2x) + c_3\cos(3x)$$

$$\phi_n(x) = \cos(nx) \;\; , \;\; n = 0, 1, 2, 3$$

$$(\mathcal{L}(u_3), \phi_n) = \int_0^{2\pi} \left[\frac{d^2}{dx^2} + \cos(x) + \cos^2(x)\right] u_3(x)\; \cos(nx)dx \;\;\; , \;\; n = 0, 1, 2$$

$$\frac{du_3}{dx} = -c_1\sin(x) - 2c_2\sin(2x) - 3c_3\sin(3x)$$

$$\frac{d^2u_3}{dx^2} = -c_1\cos(x) - 4c_2\cos(2x) - 9c_3\cos(3x)$$

$$\int_0^{2\pi} \cos(mx)\cos(nx)dx = \pi\delta_{mn}$$
$$= 2\pi \;\; \text{si} \;\; m = n = 0$$

$$\int_0^{2\pi} \cos^2(x)\cos(nx)dx = \pi\delta_{n2} \;\; \text{si} \;\; n \neq 0$$
$$= \pi \;\; \text{si} \;\; n = 0$$

$$\int_0^{2\pi} \exp[-1 + \cos(x)]\cos(nx)dx = f_n$$

func. Bessel

$$e^{-1}I_0(1) \;\; si \;\; n = 0$$
$$e^{-1}2I_n(1) \;\; si \;\; n \neq 0$$

Queda un sist. lineal:

$$\begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 1/4 & 0 \\ 1 & -1/4 & 1/2 & 1/4 \\ 1/2 & 1/2 & -7/2 & 1/2 \\ 0 & 1/4 & 1/2 & -17/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{pmatrix}$$

$f_0 = 0.465759597$

$f_1 = 0.207910413$

$f_2 = 0.049938776$

$f_3 = 0.008155308$

$$\rightarrow c_0\,, c_1\,, c_2\,, c_3$$

$$u(x) \simeq u_3(x) = c_0 + c_1 \cos(x) + c_2 \cos(2x) + c_3 \cos(3x)$$

→ comparar con la sol. exacta

$$u(x) = \exp[-1 + \cos(x)]$$

y con un esquema en FD de 2do orden con N=10, 20 y 40 puntos de grilla

Problemas con dependencia temporal

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{L}(u) + f(x,t) \quad , \quad u = u(x,t) \qquad u(x,0) = g(x) \qquad a \leq x \leq b \quad , u(x=a) = u_a \quad , \quad u(x=b) = u_b$$

Galerkin: $$u(x,t) \simeq \sum_{n=0}^{N} c_n(t)\, \phi_n(x) = u_N(x,t)$$

$$R_N = \frac{\partial u_N}{\partial t} - \mathcal{L}(u_N) - f(x,t)$$ residuo

$$(f,g) \equiv \int_a^b f(x)g(x)w(x)dx \qquad \text{Si } \ f,g \in \mathbb{C} \rightarrow (f,g) \equiv \int_a^b f(x)g^*(x)w(x)dx$$

Pedimos $$(\phi_m, R_N) = 0 \quad , \quad m = 0, \ldots, N$$

$$\sum_{n=0}^{N} \left[\frac{dc_n(t)}{dt}(\phi_m, \phi_n) - (\phi_m, \mathcal{L}(u_N)) \right] - (\phi_m, f) = 0 \ , \ \ m = 0, \ldots, N$$

convertimos una PDE en un sistema de ODEs

→ es un sist. de N+1 ec. dif. ordinarias acopladas para los $c_n(t)$

Si $\mathcal{L}$ es lineal

$$\sum_{n=0}^{N}\left[\frac{dc_n(t)}{dt}(\phi_m,\phi_n)-(\phi_m,\mathcal{L}(\phi_n))c_n(t)\right]-(\phi_m,f)=0\ \ ,\ \ m=0,\ldots,N$$

$$H_{mn}=(\phi_m,\phi_n)\qquad P_{mn}=(\phi_m,\mathcal{L}(\phi_n))\qquad f_m=(\phi_m,f)$$

$$\bar{\bar{H}}\frac{d\bar{c}}{dt}-\bar{\bar{P}}\bar{c}=\bar{f}\qquad\qquad \bar{c}=(c_0,\ldots,c_N)\ \ ,\ \ \bar{f}=(f_0,\ldots,f_N)$$

más c.i. $\quad(\phi_m,u_N(t=0))=(\phi_m,g)=g_m$

$$\sum_{n=0}^{N}H_{mn}c_n(0)=g_m$$

Ejemplo: ec. de difusión

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad , \quad u(x,0) = g(x) \quad , \quad u(0) = u(\pi) = 0 \quad \longrightarrow$$

usamos $\phi_n = \sin(nx)$

$$u_N(x,t) = \sum_{n=1}^{N} c_n(t) \sin(nx) \qquad \frac{\partial u_N}{\partial t} = \sum_{n=1}^{N} \frac{dc_n}{dt} \sin(nx)$$

$$\mathcal{L} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \qquad \mathcal{L}(u_N) = \sum_{n=1}^{N} c_n(t)\, \mathcal{L}(\sin(nx)) = -\sum_{n=1}^{N} c_n(t)\, n^2 \sin(nx)$$

$$(\phi_m, \phi_n) = \int_0^{\pi} \sin(mx)\sin(nx)dx = \frac{\pi}{2}\delta_{mn}$$

$$\sum_{n=1}^{N} \left[\frac{dc_n}{dt}\frac{\pi}{2}\delta_{mn} + n^2 \frac{\pi}{2}\delta_{mn} c_n \right] = 0 \quad , \quad m = 1, \ldots, N$$

$$\rightarrow \frac{dc_m}{dt} + m^2 c_m = 0 \quad , \quad m = 1, \ldots, N \qquad \boxed{\rightarrow c_m(t) = c_m(0) e^{-m^2 t}}$$

$$(\phi_m, u_N(t=0)) = (\phi_m, g)$$

$$\sum_{n=1}^{N} \frac{\pi}{2}\delta_{mn} c_n(0) = \int_0^{\pi} g(x)\sin(mx)dx$$

$$c_m(0) = \frac{2}{\pi}\int_0^{\pi} g(x)\sin(mx)dx$$

Cómo la sol. exacta es $$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t)\sin(nx)$$

$$c_n(t) = g_n e^{-n^2 t} \qquad g_n = \frac{2}{\pi}\int_0^{\pi} g(x)\sin(nx)dx$$

en este caso, la solución por el método de Galerkin me
da simplemente un truncamiento de la serie a N términos

→ error va cómo $e^{-N^2} \ll 1$

Con método de colocación

discretizo el espacio → elijo $x_j = \dfrac{\pi\, j}{N+1}$, $j = 1, \ldots, N$

$$\Delta x = \frac{\pi}{N+1}$$

$x_0 = 0$, $u(x=0) = 0$

$x_{N+1} = \pi$, $u(x=\pi) = 0$

ϕ_n

$$u_N(x,t) = \sum_{n=1}^{N} c_n(t)\sin(nx)$$

$$\{c_n(t)\} \iff \{u(x_j,t)\} \qquad n = 1,\ldots,N \ , \quad j = 1,\ldots,N$$

$$\sum_{n=1}^{N} c_n(t)\sin\left(\frac{\pi\, j\, n}{N+1}\right) = u(x_j,t) \ , \quad j = 1,\ldots,N$$

Transformada Discreta de Fourier (DFT)

(en sen)

$$\bar{\bar{F}}\bar{c} = \bar{u}$$

$$F_{jn} = \sin\left(\frac{\pi\, j\, n}{N+1}\right)$$

$$\iff \quad c_n(t) = \frac{2}{N+1}\sum_{j=1}^{N} u(x_j,t)\sin\left(\frac{\pi\, j\, n}{N+1}\right) \ , \quad n = 1,\ldots,N$$

$$\bar{c} = \bar{\bar{F}}^{-1}\bar{u} \qquad F^{-1}_{nj} = \frac{2}{N+1}\sin\left(\frac{\pi\, j\, n}{N+1}\right)$$

$$\int_0^{\pi}\sin(jx)\sin(kx)dx = \frac{\pi}{2}\delta_{jk}$$

vale $$\sum_{n=1}^{N}\sin\left(\frac{\pi\, j\, n}{N+1}\right)\sin\left(\frac{\pi\, k\, n}{N+1}\right) = \frac{N+1}{2}\delta_{jk}$$

$$x \to \frac{\pi\, n}{N+1} \qquad dx \to \frac{\pi}{N+1} \qquad \int_0^{\pi} \to \sum_{n=1}^{N}$$

$$\mathcal{L}(u_N) = \sum_{n=1}^{N} c_n(t)\, \mathcal{L}(\sin(nx)) = -\sum_{n=1}^{N} c_n(t)\, n^2 \; \sin(nx) \qquad\qquad \frac{\partial u_N}{\partial t} = \sum_{n=1}^{N} \frac{dc_n}{dt} \; \sin(nx)$$

Pedimos: $\left[\frac{\partial u_N}{\partial t} - \mathcal{L}(u_N)\right]\Bigg|_{x_k} = 0 \qquad \rightarrow \sum_{n=1}^{N}\left[\frac{dc_n}{dt} + n^2 c_n\right]\sin(nx_k) = 0 \qquad \rightarrow \frac{dc_n}{dt} = -n^2 c_n$

$k = 1, \ldots, N$

este caso quedó fácil (desacoplado)

pero si no utilizo las identidades $\{c_n(t)\} \iff \{u(x_j, t)\}$ para dejarlo todo en términos de los $u(x_j, t)$

$c_n(t) = \frac{2}{N+1}\sum_{j=1}^{N} u(x_j, t)\sin\left(\frac{\pi\, j\, n}{N+1}\right)$ reemplazo en la ec. de residuos para la $\frac{dc_n}{dt}$

$$\Rightarrow \sum_{n=1}^{N} \frac{2}{N+1}\sum_{j=1}^{N}\left[\frac{du(x_j,t)}{dt} + n^2 u(x_j,t)\right]\sin\left(\frac{\pi\, j\, n}{N+1}\right)\sin\left(\frac{\pi\, k\, n}{N+1}\right) = 0$$

utilizando la identidad de ortogonalidad queda

$$\sum_{j=1}^{N} \frac{du(x_j,t)}{dt}\delta_{jk} + \frac{2}{N+1}\sum_{j=1}^{N}\sum_{n=1}^{N} n^2 \sin\left(\frac{\pi\, j\, n}{N+1}\right)\sin\left(\frac{\pi\, k\, n}{N+1}\right) u(x_j,t) = 0 \qquad\qquad k = 1, \ldots, N$$

$$\boxed{\frac{du(x_k,t)}{dt} = \sum_{j=1}^{N} D_{jk}\; u(x_j,t)} \qquad\qquad k = 1,\ldots,N$$

→ sistema acoplado

$$D_{jk} = -\frac{2}{N+1}\sum_{n=1}^{N} n^2 \sin\left(\frac{\pi\, j\, n}{N+1}\right)\sin\left(\frac{\pi\, k\, n}{N+1}\right)$$

se llaman matrices de [Toeplitz]

(tienen diagonales constantes)

nos queda esa *matriz de diferenciación*

que proviene en este caso del operador $\mathcal{L} = \dfrac{\partial^2}{\partial x^2}$

Notemos que un planteo directo en FD centradas nos daría las ecs:

$$\frac{du_k}{dt} = \frac{1}{\Delta x^2}(u_{k+1} + u_{k-1} - 2u_k) \quad , \quad \Delta x = \frac{\pi}{N+1}$$

$$D_{jk} = -\frac{2}{\Delta x^2} \quad si \;\; j = k$$

$$D_{jk} = \frac{1}{\Delta x^2} \quad si \;\; j = k \pm 1$$

es decir queda una matriz de diferenciación tridiagonal

(con muchos ceros)