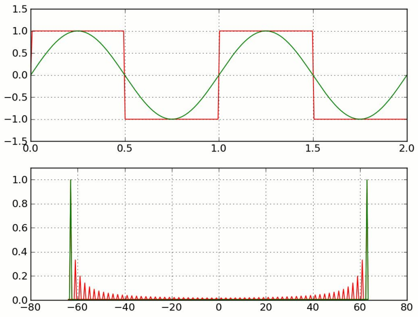
Métodos numéricos

Pablo Dmitruk

2do cuatrimestre 2021 - DF/FCEN/UBA

Métodos espectrales: casos no periódicos

Los métodos con series de Fourier trigonométricas como vimos son especialmente adecuados cuando tratamos con problemas periódicos
→ la no periodicidad en la función o su 1er derivada introduce una discontinuidad susceptible del *fenómeno de Gibbs*



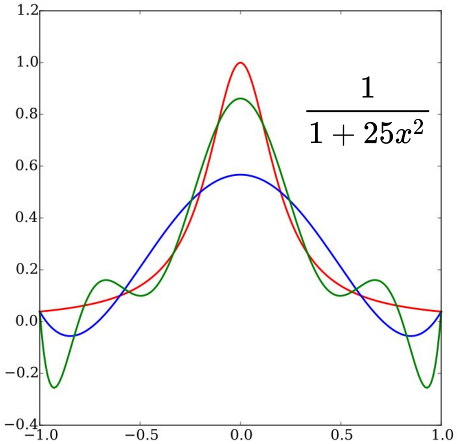
→ se introducen otro tipo de funciones base : en general conviene que sean funciones ortogonales
→ soluciones de problemas de Sturm-Liouville: polinomios Chebyshev, polinomios de Legendre

Vamos a considerar en este caso el método de colocación → discretizamos en el espacio x , es decir introducimos grilla x_j

y los valores de la función u_j

En el método pseudoespectral lo que hicimos fue interpolar la función incógnita con los valores en los puntos de grilla, utilizando la expansión (truncada) en funciones base y calcular derivadas espaciales a partir de esa expansión.

Recordemos que (allá lejos y hace tiempo) hicimos algo así: vimos que podían obtenerse expresiones para las derivadas espaciales (de distinto orden) derivando polinomios que pasaran por los valores de la función incógnita en los puntos de grilla → polinomios de Lagrange



De Nicoguaro - Trabajo propio, CC BY 4.0, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=44404005

Sucede que aproximar funciones con polinomios sobre puntos de grilla equiespaciados trae problemas al aumentar el orden → *fenómeno de Runge*

→ gente pensante encontró una solución a esto usando puntos no-equiespaciados → puntos de Chebyshev

(ver Trefethen → teoría del potencial)

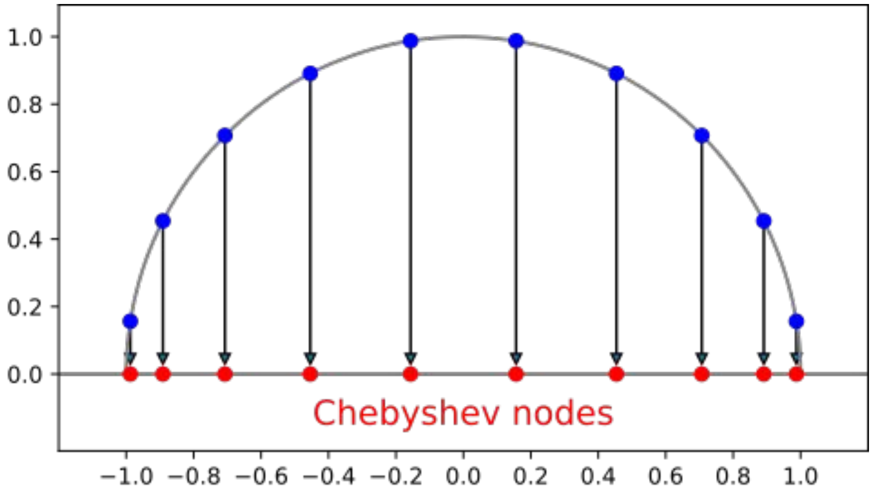
puntos de Chebyshev

$$x_j = \cos(j\pi/N) \;\;,\quad j = 0, 1, \ldots, N$$

(notar están ordenados de der a izq)

$$x \in [-1, 1]$$

(si no reescalo el problema a ese intervalo)



→ notablemente esto corrige el fenómeno de Runge, permitiéndome aumentar el N (y con eso mejorar fuertemente la precisión → por supuesto que a un costo...más cuentas !)

Para realizar la diferenciación numérica el procedimiento que vamos a seguir entonces es:

1. Buscamos el polinomio interpolante de Lagrange de orden N que en los puntos $x_j = \cos(j\pi/N) \;,\quad j = 0, 1, \ldots, N$ ajuste a los valores de la función $u_j = u(x_j)$

2. Derivamos (analíticamente) ese polinomio y evaluamos en cada punto x_j para obtener la aproximación a la derivada en ese punto

Clave: el número de puntos N+1 es igual al orden N del polinomio interpolante

cuando hicimos esto en dif. finitas elegíamos N+1 puntos (normalmente equi-espaciados) pero el orden del polinomio podía ser 2, 3, etc → orden más alto supuestamente mejoraba la aproximación

Las operaciones 1) y 2) se pueden poner en forma de una matriz de diferenciación $\bar{\mathbf{u}}' = \mathbf{D_N}\bar{\mathbf{u}}$

(como sucedía en diferencias finitas)

Veamos un ejemplo de cómo es la matriz de diferenciación, empezando con un N=1 (bajo)

los N+1=2 puntos de Chebyshev son $x_0 = 1 \quad , \quad x_1 = -1$

y el polinomio interpolante de Lagrange de orden N=1 que pasa por los valores u_0 , u_1 en esos puntos es

$$p(x) = \frac{1}{2}(1+x)\,u_0 + \frac{1}{2}(1-x)\,u_1$$

y su derivada (analítica) es

$$p'(x) = \frac{1}{2}u_0 - \frac{1}{2}u_1$$

u_0' y u_1' dan lo mismo en este caso

y la matriz de diferenciación es $D_1 = \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 \\ 1/2 & -1/2 \end{pmatrix}$

Consideremos ahora N=2. Los N+1=3 puntos de Chebyshev son $x_0 = 1 \;\;,\;\; x_1 = 0 \;,\; x_2 = -1$

y el polinomio interpolante de Lagrange de orden N=2 es

$$p(x) = \frac{1}{2}x(1+x)\,u_0 + (1+x)(1-x)u_1 + \frac{1}{2}x(1-x)\,u_2$$

cuya derivada es

$$p'(x) = (x+\frac{1}{2})\,u_0 - 2x\,u_1 + (x-\frac{1}{2})\,u_2$$

evaluando en los 3 puntos de Chebyshev obtenemos la aproximación a la derivada en esos puntos

La matriz de diferenciación es

$$D_2 = \begin{pmatrix} 3/2 & -2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & -1/2 \\ -1/2 & 2 & -3/2 \end{pmatrix} \qquad\qquad \bar{\mathbf{u}}' = D_2\,\bar{\mathbf{u}}$$

Para N arbitrario se obtiene la matriz de diferenciación D_N de $(N+1)\times(N+1)$

$$(D_N)_{00} = \frac{2N^2+1}{6} \qquad (D_N)_{NN} = -\frac{2N^2+1}{6} \qquad (D_N)_{jj} = \frac{x_j}{2(x_j^2-1)} \;\;,\;\; j=1,\ldots,N-1$$

$$(D_N)_{ij} = \frac{c_i}{c_j}\frac{(-1)^{i+j}}{(x_i-x_j)} \;\;,\;\; i\neq j \;\;,\;\; i,j=1,\ldots,N-1$$

$$c_i = 2 \;\;,\;\; i=0 \text{ ó } N$$

$$c_i = 1 \;\;,\;\; i=1,\ldots,N-1$$

Con esta matriz podemos aproximar la derivada de cualquier función evaluada en los puntos de Chebyshev

$$\bar{\mathbf{u}}' = D_N\bar{\mathbf{u}} \qquad u'(x_i) = \sum_{j=0}^{N}(D_N)_{ij}\,u(x_j) \;\;,\;\; i=0,\ldots,N$$

Con el mismo procedimiento podemos aproximar la derivada segunda y la matriz de dif. es

$$(D_N^{(2)})_{00} = \frac{N^4-1}{15} \qquad (D_N^{(2)})_{NN} = \frac{N^4-1}{15} \qquad (D_N^{(2)})_{jj} = -\frac{(N^2-1)(1-x_j^2)+3}{3(1-x_j^2)^2} \;\;,\;\; j=1,\ldots,N-1$$

$$(D_N^{(2)})_{0j} = \frac{2}{3}\frac{(-1)^j}{c_j}\frac{(2N^2+1)(1-x_j)-6}{(1-x_j)^2} \;\;,\;\; j=1,\ldots,N$$

$$(D_N^{(2)})_{Nj} = \frac{2}{3}\frac{(-1)^{j+N}}{c_j}\frac{(2N^2+1)(1+x_j)-6}{(1+x_j)^2} \;\;,\;\; j=0,\ldots,N-1$$

$$(D_N^{(2)})_{ij} = \frac{(-1)^{i+j}}{c_j}\frac{x_i^2+x_ix_j-2}{(1-x_i^2)(x_i-x_j)^2}$$

$$i\neq j \;,\; i=1,\ldots,N-1 \;\;,\;\; j=0,\ldots,N$$

En un problema de evolución temporal estas matrices de dif. espacial se calculan al principio y luego las utilizamos para ir avanzando en el tiempo, en cada paso tenemos que hacer las cuentas de matriz x vector para cada uno de los puntos de grilla

→ son $O(N^2)$ operaciones por cada paso temporal

Alternativa: utilizar funciones base, como hicimos con Fourier y pasar de un espacio a otro (real → modos) y hacer las derivadas espaciales en el espacio de modos y (en caso de que haya) las convoluciones en el espacio real

→ esto funcionaba bien porque teníamos la FFT $O(N \log N)$ operaciones

En este caso, las funciones base que conviene usar son los *polinomios de Chebyshev*

$$T_n(x) = \cos(n\theta) \quad , \quad x = \cos(\theta) \qquad n = 0, 1, 2, \ldots .$$

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x)$$

$$T_0(x) = 1 \qquad T_1(x) = x$$

$$T_2(x) = 2x^2 - 1 \qquad T_3(x) = 4x^3 - 3x$$

$$T_{n+1}(x) = 2x\, T_n(x) - T_{n-1}(x)$$

(sale por trigonometría)

Otras propiedades útiles de los polinomios de Chebyshev:

$$\int_{-1}^{1} T_n\, T_m \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{\pi}{2}\delta_{nm} \quad si \;\; n \neq 0$$

(ortogonalidad)

$$= \pi \quad si \quad n = m = 0$$

$$T_n(1) = 1 \quad , \quad T_n(-1) = (-1)^n$$

$$2T_n(x) = \frac{1}{n+1}\frac{d}{dx}T_{n+1}(x) - \frac{1}{n-1}\frac{d}{dx}T_{n-1}(x)$$

Si evaluamos los polinomios de Chebyshev en los puntos de Chebyshev obtenemos:

(corresponden a extremos de los polinomios)

$$\boxed{T_n(x_j) = \cos\frac{\pi n j}{N}}$$

Si planteamos,

$$u_N(x) = \sum_{n=0}^{N} a_n T_n(x) \qquad \boxed{u_N(x_j) = \sum_{n=0}^{N} a_n T_n(x_j) = \sum_{n=0}^{N} a_n \cos\frac{\pi n j}{N}}$$

$$\Rightarrow a_n = \sum_{j=0}^{N} \frac{2}{N c_n c_j} u_N(x_j) \cos\frac{\pi j n}{N} \quad , \quad n = 0, 1, \ldots, N \qquad \text{con} \quad \begin{aligned} c_n &= 2 \;\text{ si }\; n = 0 \text{ ó } N \\ c_n &= 1 \;\text{ si }\; n = 1, \ldots, N-1 \end{aligned}$$

$$\{a_n\} \iff \{u(x_j)\} \qquad \bar{\mathbf{a}} = \bar{\bar{\mathbf{C}}}\bar{\mathbf{u}} \qquad C_{nj} = \frac{2}{N c_n c_j} \cos\frac{\pi j n}{N} \qquad C^{-1}_{jn} = \cos\frac{\pi j n}{N}$$

Esto es similar a una transf. discreta de Fourier (en cosenos) → **se puede usar una FFT** !

Las derivadas pueden hacerse en el espacio de modos, utilizando relaciones de recursión → O(N) operaciones

$$\frac{\partial u_N}{\partial x} = \sum_{n=0}^{N} a_n^{(1)} T_n(x) \qquad \frac{\partial^2 u_N}{\partial x^2} = \sum_{n=0}^{N} a_n^{(2)} T_n(x)$$

$$c_n a_n^{(1)} = a_{n+2}^{(1)} + 2(n+1) a_{n+1} \quad , \quad n = N-1, N-2, \ldots, 0$$

$$a_N^{(1)} = 0 \qquad a_{N+1}^{(1)} = 0$$

$$c_n a_n^{(2)} = a_{n+2}^{(2)} + 2(n+1) a_{n+1}^{(1)} \quad , \quad n = N-1, N-2, \ldots, 0$$

$$a_N^{(2)} = 0 \qquad a_{N+1}^{(2)} = 0$$