Métodos espectrais de alta ordem na resolução de equações diferenciais

Monografia apresentada
AO
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
PARA
OBTENÇÃO DO TÍTULO
DE
BACHAREL EM MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL

Augusto Carillo Ferrari

Orientador: Prof. Dr. Nelson Mukgayar Kuhl

Coorientador: Dr. Paulo José Saiz Jabardo

São Paulo, dezembro de 2015

Agradecimentos

A elaborar

Sumário

Lista de Figuras				
Lista de Tabelas				
1	Inti	rodução	1	
	1.1	História	1	
	1.2	Julia	1	
2	Mé	todo espectral e Método dos elementos finitos	3	
	2.1	sobre	3	
	2.2	Interpolação	3	
		2.2.1 Interpolação polinomial	3	
		2.2.2 Fenômeno de Runge	5	
		2.2.3 Teorema I: Erro de interpolação de Cauchy	5	
		2.2.4 Teorema II: Amplitude minima	6	
		2.2.5 Integração gaussiana e linhas pseudoespectral	7	
		2.2.6 Teorema: Integração Gauss-Jacobi	7	
		2.2.7 tipos de polinômio	7	
		2.2.8 Derivada	8	
	2.3	método dos elementos finitos	8	
3	Mé	todo dos elementos espectrais	9	
	3.1	Equação de Helmholtz	9	
	3.2	Condição de contorno Neumann de newton e Dirichilet	9	
	3.3	Discretização	9	
	3.4	Solver linear	9	
4	Sim	ulações	11	
5	Cor	aclusões	13	
\mathbf{R}	e ferê	ncias Bibliográficas	15	

Lista de Figuras

2.1	interpolação simples	3
2.2	polinômio base de Lagrange para 6 pontos	4
2.3	interpolação com n pontos equidistantes	Ę
2.4	fenômeno Runge	Ę
2.5	método de raízes de chebychev contra raízes de pontos equidistante	7

Lista de Tabelas

Introdução

1.1 História

O método espectral surgiu como uma ferramenta de alto poder computacional em mecânica de fluídos, proposto em 1994 por Blinova O ANO ESTÁ CERTO???, implementado em 1954 por Sylberman, praticamente abandonado no meio da década de 60 e ressurgindo em 1969-1970 por Orzszag e Eliason, Manchenhauer e Rasmussen, foi desenvolvido para aplicações especializadas. No entanto, somente em 1977 foi formalizado matematicamente por Gottlieb e Orszag em 1980 DECIDA-SE QUAL O ANO. Sugestão PJ: usa o bibtex e coloca as referências. É o correto e não há ambiguidade

Originalmente o método espectral foi promovido por meteorologistas no estudo de modelos globais de tempo e especialistas em dinâmica de fluídos estudando turbulências isotrópicas. Desde a década de 80 até hoje o estudo na área de CFD (Computational Fluid Dynamics- dinâmica dos fluidos computacional) tem crescido lado a lado ao avanço computacional que o tornou possível.

1.2 Julia

Para a implementação do método usaremos como ferramenta de estudo a linguagem de alto nível, *Julia*, que por ser dinâmica e de excelente desempenho computacional será essencial para execução dos cálculos. Será essencial??? Até hoje não se fazia nada? Porque você acha julia interessante?. Leia o que está na pag. da julia.

Apesar de nova, a linguagem criada no MIT vem sendo rapidamente acolhida pela comunidade científica e assim, com seu código open-source, ele é diariamente atualizado e possui um número de bibliotecas em crescente ascensão.

2 INTRODUÇÃO 1.2

Método espectral e Método dos elementos finitos

2.1 sobre

Método espectral é um método poderoso usado para solução de equações diferencial parcial. Diferentemente do método das diferenças finitas, que considera apenas os pontos próximos do ponto que queremos computar chamada de método *local*, o método espectral considera todo o domínio, sendo assim um método *global*. Essa técnica tem mais precisão pois converge exponencialmente diferente do método local. É preferível a utilização desse método quando a solução varia em função do *tempo* e *espaço*.

2.2 Interpolação

A interpolação de uma função f(x) por um polinômio trigonométrico ou não, de grau n, $P_n(x)$ e que satisfaça:

$$P_n(x_i) = f(x_i) \ i = 1, 2, ..., n+1$$
 (2.1)

Onde $f(x_i)$ é a função f pré-calculada nos pontos x_i . A escolha desses pontos x_i ainda será explicada.

2.2.1 Interpolação polinomial

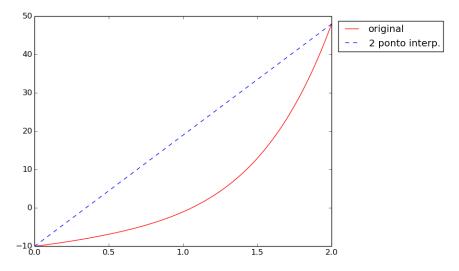


Figura 2.1: interpolação simples

Antes do uso de calculadoras e computadores, um método de estimar o valor de uma f num ponto, eram utilizados tabelas com valores de pré-calculados. A maneira mais simples de entender é a estimação do valor da função em um ponto intermediário entre dois pontos conhecidos é o uso da interpolação Linear.

$$f(x) \approx \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1)$$
 (2.2)

Para fazermos essa interpolação para n pontos conhecidos aproximamos uma função usando o polinômio base de Lagrange.

$$C_i(x) = \prod_{j=0}^{N} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$
 (2.3)

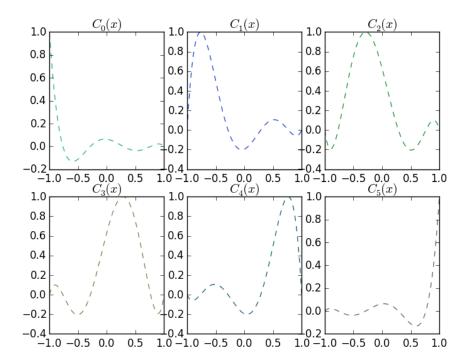


Figura 2.2: polinômio base de Lagrange para 6 pontos

A interpolação de Lagrange é dada por :

$$P_n(x) \equiv \sum_{i=0}^{N} f(x_i)C_i(x)$$
(2.4)

Obedecendo que $P_n(x_i) = f(x_i)$. Apesar dos pontos interpoladores equidistante serem comumente utilizados, não há restrições, podendo até mesmo estar fora de ordem.

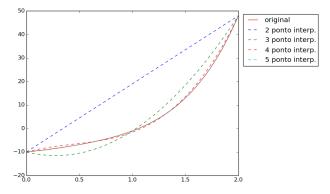


Figura 2.3: interpolação com n pontos equidistantes

2.2.2 Fenômeno de Runge

Apesar de parecer que uma boa interpolação tenha uma boa aproximação usando pontos igualmente distantes sobre um interval [a,b], $\lim_{n\to\infty} |f(x)-P_n(x)|=0$ para qualquer f(x) diferenciável. No início do século XX, $Carl\ David\ Tolm\'e\ Runge$, provou que para uma função f(x):

$$f(x) = \frac{1}{1+x^2}, x \in [-5, 5]$$
 (2.5)

que para pontos equidistantes, a interpolação converge apenas no intervalo [-3.63, 3.63], e diverge fora do mesmo. Para polinômios de maior grau, esse intervalo de convergência tende a diminuir e perto dos pontos de fronteira diverge bastante (figura abaixo).

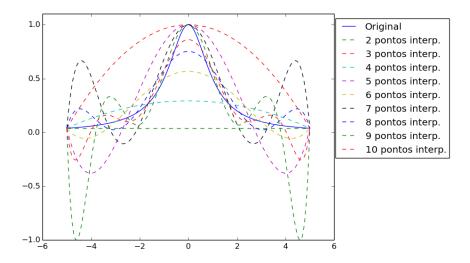


Figura 2.4: fenômeno Runge

Assim, Runge prova que no meio do intervalo temos boas aproximações mas infelizmente perto dos extremos, os valores interpolados oscilam muito, para um polinômio de grau n com pontos equidistante. Esse fenômeno sugere que escolhamos pontos diversos que tenham menor concentração do meio do intervalo, onde temos uma maior precisão, e aumentar a densidade de pontos próximos dos extremos. Agora como encontrar uma distribuição de pontos de forma que melhore a interpolação ? A resposta pode ser explicado pelos teoremas a seguir.

2.2.3 Teorema I: Erro de interpolação de Cauchy

Dado f(x) com pelo menos N+1 derivadas no intervalo de interesse e seja $P_N(x)$ seja o interpolador Lagrangiano de grau N. Então o erro é dado por:

$$f(x) - P_N(x) = \frac{1}{[N+1]!} f^{(N+1)}(\epsilon) \prod_{i=0}^{N} (x - x_i)$$
 (2.6)

Para um $\epsilon(x) \in [-1, 1]$.

Logo, para minimizar o erro, não podemos fazer nada quanto o termo $f^(N+1)(\epsilon)$, pois necessita conhecer a função interpolada. Quanto o polinômio $\prod_{i=0}^N (x-x_i)$, sabemos que o coeficiente do termo x^N é 1, independente da escolha de pontos. Então a pergunta que fica é, qual escolha de pontos nos dá um polinômio com coeficiente líder igual a 1 minimiza essa função ? Felizmente e coincidentemente, essa resposta foi respondida quase meio século antes do próprio fenômeno de Runge ser descoberto. Veremos no próximo teorema.

2.2.4 Teorema II: Amplitude minima

De todos os polinômios de grau N com coeficiente de x^N igual a 1, o único polinômio que tem o menor máximo no intervalo [-1,1] é $\frac{T_N(x)}{2^(N-1)}$, o polinômio de Chebyshev dividido por ideia. Em outras palavras, todos os polinômios de mesmo grau e coeficiente líder unitário, satisfazem a desigualdade:

$$\max_{x \in [-1,1]} |P_N(x)| \ge \max_{x \in [-1,1]} \left| \frac{T_N(x)}{2(N-1)} \right| = \frac{1}{2^{N-1}}$$
 (2.7)

$$T_0(x) = 1 \tag{2.8}$$

$$T_1(x) = x \tag{2.9}$$

$$T_{N+1}(x) = 2xT_N(x) - T_{N-1}(x)$$
(2.10)

$$T_N(x) = \cos(n \arccos x) = \cosh(n \operatorname{arcosh} x)$$
 (2.11)

Agora, qualquer polinômio de grau N pode ser fatorado na forma de um produtório $(x - x_i)$, onde x_i é uma das raízes do polinômio, em particular:

$$\frac{1}{2^N}T_{N+1}(x) \equiv \prod_{i=1}^{N+1} (x - x_i)$$
 (2.12)

Temos então que, para minimizar o erro no Teorema~I, o polinômio deve ser proporcional a $T_{N+1}(x)$. Isso implica que os pontos interpoladores que minimizam o erro, são as raízes do próprio polinômio de Chebyshev de grau N+1.

Usando o fato que esse polinômio pode ser reescrita como uma função trigonométrica, temos que as raízes são:

$$x_i \equiv \cos\left[\frac{(2i-1)pi}{2(N+1)}\right], i = 1, 2, ..., N+1$$
 (2.13)

Pela expansão de Taylor da função coseno, verificamos a afirmação de acima que o espaçamento da malha é $O(N^2)$ perto das fronteiras:

$$x_1 \approx -1 + \frac{\pi^2}{8N^2} \; ; \; x_2 \approx -1 + \frac{9\pi}{8N^2} [N \gg 1]$$
 (2.14)

Agora temos como conseguir o polinômio de *Chebyshev* que minimiza o erro. Porém essa escolha de polinômio varia para diferentes geometrias ou funções harmônicas ou hermitianas.

2.2.5 Integração gaussiana e linhas pseudoespectral

A razão pelo qual o método de colocação é também chamado "pseudoespectral" devido a colocação otimizada dos pontos de interpolação, como o polinômio de *Chebyshev*, faz o método da colocação idêntico ao método de *Galerkin* se o produto interno é calculado por um tipo de integração numérica conhecida como Integração gaussiana. Integração numérica e interpolação Lagrangiana são muito correlacionada pois o método de integração é de aproximar o polinômio pelo integrando de f(x) e depois integrar $P_N(X)$. Como o interpolado pode ser integrado facilmente, o erro é dado como a diferença de f(x) e $P_N(x)$. A fórmula é dada por:

$$\int_{a}^{b} f(x)\partial x \approx \sum_{i=0}^{N} w_{i} f(x)$$
(2.15)

e a função peso w_i é dado por:

$$w_i \equiv \int_a^b C_i(x)\partial x \tag{2.16}$$

Onde C_i é o polinômio base de *Lagrange*. Quando calculamos, os pontos de *interpolação* são nomeados de *abcissas*, enquanto que a *integral* de um polinômio base é chamado de *quadratura*, no contexto da integração numérica.

A ordem de um método numérico é diretamente relacionado a maior polinômio que o aproxima. Por exemplo quando aplicamos a interpolação para equações de primeiro e segundo grau, os erros são respectivamente $O(h^2)$, $O(h^4)$. Similarmente, a fórmula de quadratura com (N+1) pontos, será exata se o integrado for um polinômio de grau N.

Gauss fez uma observação que pontos de interpolação equidistantes não são tão bons. Se tivermos pontos interpoladores x_i e seus pesos w_i desconhecido, teremos o dobro de parâmetros para escolher que maximizem a precisão do método e assim podemos ter uma aproximação exata para polinômios de grau (2N+1).

2.2.6 Teorema: Integração Gauss-Jacobi

Seja (N+1) pontos interpoladores x_i escolhidos e raízes de $P_N(x)$, um polinômio de grau (N+1) do tipo ortogonal no intervalo [a,b] com respeito a função p(x), então a fórmula de quadratura é dado por:

$$\int_{b}^{a} f(x)p(x)\partial x = \sum_{i=0}^{N} w_{i} f_{i}(x)$$
(2.17)

é exata para toda f(x) polinomial de grau máximo (2N+1)

2.2.7 tipos de polinômio

adicionar outros polinômios de base talvez ? Gauss-Jacobi Gauss-Lobatto-Jacobi Gauss-Radau-Jacobi

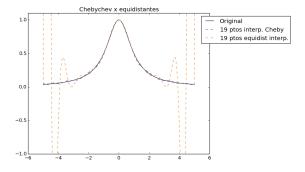


Figura 2.5: método de raízes de chebychev contra raízes de pontos equidistante

2.2.8 Derivada

8

As derivadas podem ser calculadas da seguinte forma:

$$f(x) = \sum_{i=0}^{N-1} f(x_i)C_i(x)$$
 (2.18)

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x} = \sum_{i=0}^{N} f(x_i) \frac{\partial C_i(x)}{\partial x}$$
 (2.19)

para calcular as integrais, é necessário conhecer a derivada nos nós da quadratura, x_i :

2.3 método dos elementos finitos

adicionar texto de elementos dinâmicos

Método dos elementos espectrais

3.1 Equação de Helmholtz

3.2 Condição de contorno Neumann de newton e Dirichilet

3.3 Discretização

3.4 Solver linear

10

Simulações

12 SIMULAÇÕES 4.0

Conclusões

 $\begin{array}{c} \text{test test test} \\ [\text{Ard} 14] \end{array}$

CONCLUSÕES 5.0

Referências Bibliográficas

[Ard14] Luca Ardito. Energy-aware Software. Tese de Doutorado, Politecnico di Torino, 2014. 13