

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

Agradecimientos

A elaborar

Sumário

Lista de Figuras	vii
Lista de Tabelas	ix
1 Introdução	1
1.1 História	1
1.2 Julia	1
2 Método espectral	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 mínima	6
2.2.5 Integração gaussiana e linhas pseudoespectral	7
2.2.6 tipos de polinômio	7
2.2.7 Teorema: Integração Gauss-Jacobi	7
3 Conclusões	9
Referências Bibliográficas	11

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	4
2.4	fenômeno Runge	5
2.5	método de raízes de chebychev contra raízes de pontos equidistante	6

Lista de Tabelas

Capítulo 1

Introdução

1.1 História

O método espectral surgiu como uma ferramenta de alto poder computacional em mecânica de fluídos, proposto em 1994 por Blinova, implementado em 1954 por Sylberman, praticamente abandonado no meio da década de 60 e ressurgindo em 1969-1970 por Orszag e Eliason, Manchenhauer e Rasmussen, foi desenvolvido para aplicações especializadas. No entanto, somente em 1977 foi formalizado matematicamente por Gottlieb e Orszag em 1980. 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. 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.

Capítulo 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:

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

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

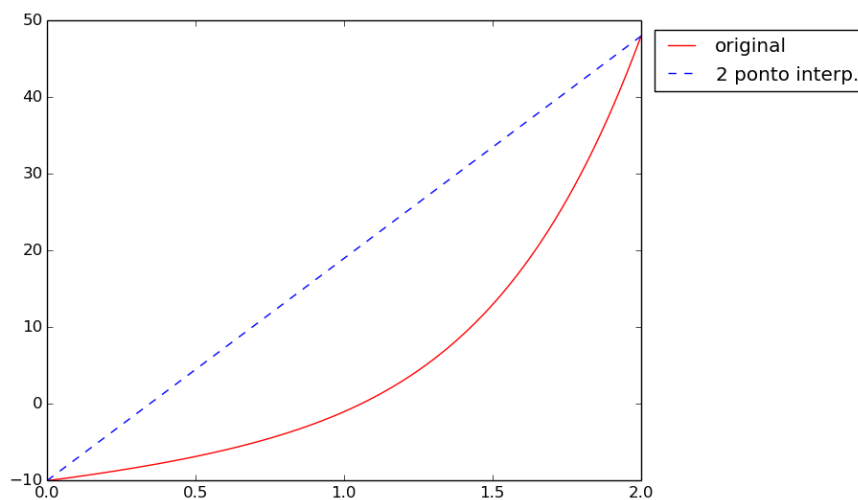


Figura 2.1: interpolação simples

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*.

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

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

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

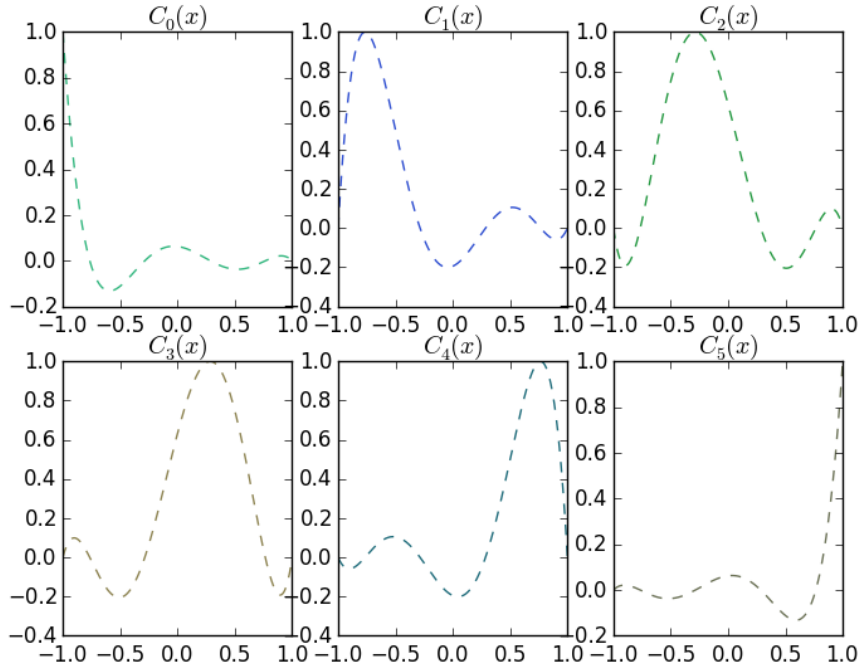


Figura 2.2: polinômio base de *Lagrange* para 6 pontos

A interpolação de *Lagrange* é dada por :

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

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.

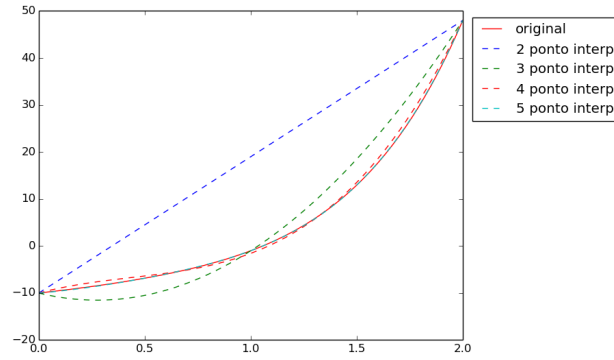


Figura 2.3: *interpolação com n pontos equidistantes*

2.2.2 Fenômeno de Runge

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

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

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).

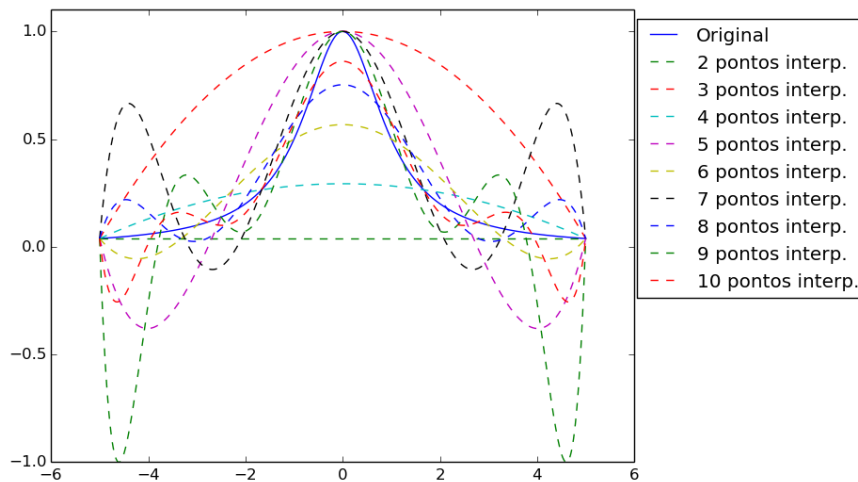


Figura 2.4: *fenômeno Runge*

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 equidistantes. 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 explicada 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:

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

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 mínima

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:

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

$$T_0(x) = 1 \quad (2.8)$$

$$T_1(x) = x \quad (2.9)$$

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

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

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:

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

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:

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

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

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

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:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^N w_i f(x) \quad (2.15)$$

e a função peso w_i é dado por:

$$w_i \equiv \int_a^b C_i(x) dx \quad (2.16)$$

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 integrando 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:

$$\int_b^a f(x) p(x) dx = \sum_{i=0}^N w_i f_i(x) \quad (2.17)$$

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

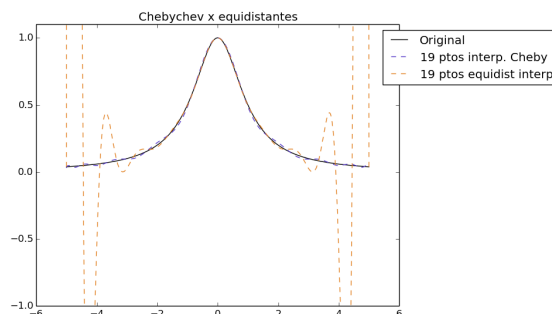


Figura 2.5: método de raízes de chebychev contra raízes de pontos equidistante

2.2.8 Derivada

As derivadas podem ser calculadas da seguinte forma:

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

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

2.3 método dos elementos finitos

adicionar texto de elementos dinâmicos

Capítulo 3

Método dos elementos espectrais

3.1 Equação de Helmholtz

[illegible]

3.2 Condição de contorno Neumann de newton e Dirichilet

[illegible]

3.3 Discretização

[illegible]

3.4 Solver linear

[illegible]

Capítulo 4

Simulações

Capítulo 5

Conclusões

test test test

[Ard14]

Referências Bibliográficas

[Ard14] Luca Ardito. *Energy-aware Software*. Tese de Doutorado, Politecnico di Torino, 2014. [9](#)