Métodos Espectrales

Buscamos soluciones a ecuaciones diferenciales de la forma

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,t) = \mathcal{N}(u(x,t)), \tag{1}$$

dónde $\mathcal{N}$ es un operador diferencial arbitrario que actúa sobre $u(x,t)$

La idea básica de los métodos espectrales es suponer que la solución a una ecuación ó a un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales puede aproximarse por las primeras $N+1$ funciones de una base ortogonal $\{\phi_k\}$. Esto es, la solución se representa como

$$u^N(x,t) = \sum_{k=0}^{N} a_k(t)\phi_k(x) \tag{2}$$

En general la así llamada *función residual*

$$R(x,a_k(t)) = \frac{\partial}{\partial t}u^N(x,t) - \mathcal{N}(u^N(x,t)), \tag{3}$$

no se anula, puesto que la aproximación no es exacta. Los diferentes métodos espectrales difieren en la forma de obtener los coeficientes a_k para minimizar $R(x,a_k(t))$ tanto como sea posible. Una vez que se obtienen los coeficientes, la solución ya estaría completa, y no se tendría ninguna discretización espacial, es decir, la solución se tendría en *todo el dominio espacial*. En diferencias finitas se tiene la solución solo en la red (en puntos espaciales-temporales de la grid).

Para funciones de frontera periódicas, la elección natural de la base de funciones es $\phi_k(x) = \exp(ikx)$. Para funciones de frontera no periódicas, hay una gran variedad de posibles elecciones, aunque en la práctica, las más usadas son las funciones, seno, coseno o los polinomios de Chebyshev. Cuando hay simetría par o impar, se usan las funciones coseno o seno respectivamente. Pero en situaciones mas generales, los polinomios de Chebyshev son una mejor opción.

Las series de Chebyshev, además de estar bien adaptadas para usarse con condiciones de frontera arbitrarias, como son una serie de Fourier disfrazada, se utilizan junto con las poderosas transformadas de Fourier rápidas (TFR). Con otras bases no existe esta posibilidad, pues no cuentan con las TFR.

Polinomios de Chebyshev

Estos polinomios son solución de la ecuación diferencial que lleva el mismo nombre

$$\frac{d}{dx}\left[\sqrt{1-x^2}\frac{d}{dx}T_k(x)\right]+\frac{k^2}{\sqrt{1-x^2}}T_k(x)=0 \tag{4}$$

Los polinomios de Chebyshev son meramente funciones coseno con tal de que $T_k(1)=1$. Con el mapeo $\theta=\arccos(x)$, se pueden escribir como

$$T_k=\cos(k\theta) \tag{5}$$

Esto nos da la opción de utilizar identidades trigonométricas para derivar relaciones de recurrencia para $T_k(x)$. Por ejemplo, la relación $\cos(k+1)\theta+\cos(k-1)\theta=2\cos(\theta)\cos(k\theta)$ nos conduce a

$$T_{k+1}(x)=2xT_k(x)-T_{k-1}(x) \tag{6}$$

que se usa para generar los polinomios de Chebyshev partiendo de $T_0(x)=1$ y $T_1(x)=x$.

Ejercicio Utilizando (6) escriba un programa que, dado un valor de N, genere y grafique $T_0(x)$,...,$T_N(x)$.

Método de Colocación

Resolveremos la ecuación de Poisson, y en el camino, explicaremos brevemente, en qué consiste el metodo de colocación.
Vamos a empezar con el caso en una dimensión.

Ecuación de Poisson 1-D

Resolveremos $d^2u/dx^2=f(x)$, con valores de frontera

$$u(-1)=F_1 \qquad u(1)=F_2 \tag{7}$$

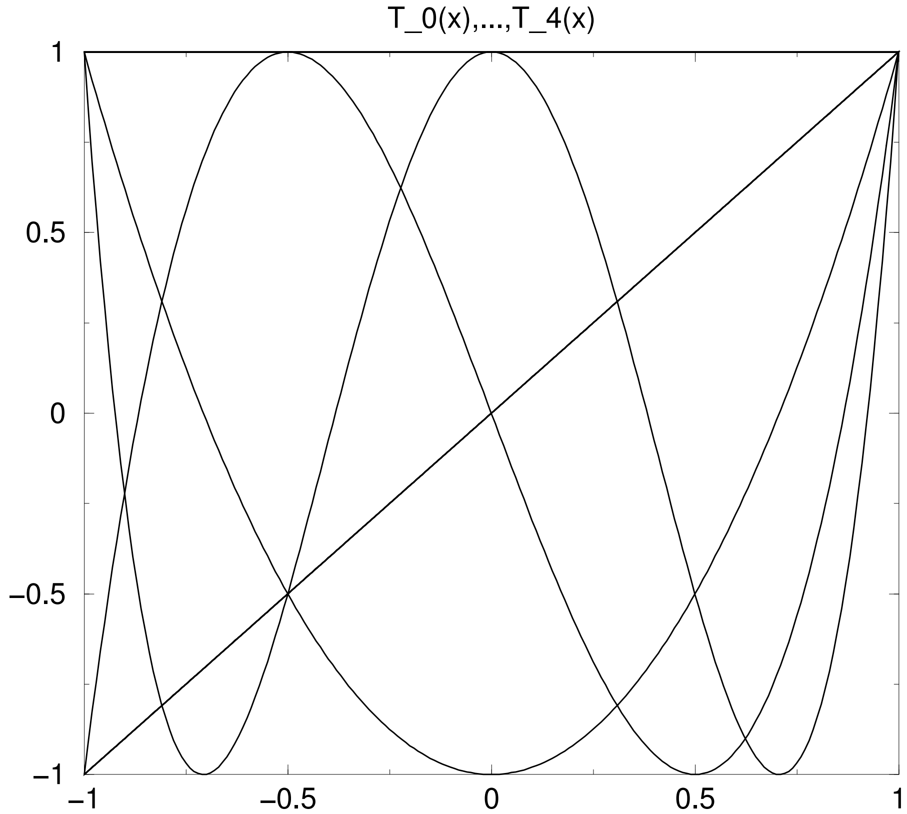

Figura 1: Esta es la figura que debe salir para $N = 4$

La solución la queremos de la forma

$$u(x) = \sum_{n=0}^{N} a_n T_n(x) \tag{8}$$

Sean $\{x_i\}$ un conjunto finito de puntos interiores al dominio $\mathcal{D}$, a estos puntos se les llama *puntos de colocación*, La red que se utiliza para definir estos puntos es $x_i = \cos(\pi i/N)$. Al sustituir (8) en la ecuación diferencial $d^2u/dx^2 = f(x)$, y al evaluar en los puntos de colocación $x_i = cos(i\pi/N)$ se obtiene

$$\sum_{n=0}^{N} a_n \frac{d^2}{dx^2} T_n(x_i) = f(x_i) \tag{9}$$

que junto con las condiciones de frontera forman un sistema lineal de ecuaciones $(N+1) \times (N+1)$ para los coeficientes a_n.

Veamos mas de cerca. Digamos que $N = 5$, los puntos de colocación son $x_0 = 1$, $x_1 = cos(\pi/5)$ =0.809016, $x_2 = cos(2\pi/5)$ =0.309, $x_3 = cos(3\pi/5) =$ -0.309, $x_4 = cos(4\pi/5) =$ -0.809016, $x_1 = cos(\pi) = -1$ Estos valores se usan en (9) para obtener el sistema lineal $AX = b$ donde la primera fila corresponde a $i = 0$, la segunda fila a $i = 1$ y asi sucesivamente. La primera y última fila corresponden a las condiciones de frontera. El sistema específicamente es

$$\begin{pmatrix} T_0(1) & T_1(1) & T_2(1) & T_3(1) & T_4(1) & T_5(1) \\ T_0''(x_1) & T_1''(x_1) & T_2''(x_1) & T_3''(x_1) & T_4''(x_1) & T_5''(x_1) \\ T_0''(x_2) & T_1''(x_2) & T_2''(x_2) & T_3''(x_2) & T_4''(x_2) & T_5''(x_2) \\ T_0''(x_3) & T_1''(x_3) & T_2''(x_3) & T_3''(x_3) & T_4''(x_3) & T_5''(x_3) \\ T_0''(x_4) & T_1''(x_4) & T_2''(x_4) & T_3''(x_4) & T_4''(x_4) & T_5''(x_4) \\ T_0(-1) & T_1(-1) & T_2(-1) & T_3(-1) & T_4(-1) & T_5(-1) \end{pmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_2 \\ f(x_1) \\ f(x_2) \\ f(x_3) \\ f(x_4) \\ F_1 \end{bmatrix}$$

ó bien, puesto que $T_n(1) = 1$ y $T_n(-1) = (-1)^n$ para toda n, se tiene

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ T_0''(x_1) & T_1''(x_1) & T_2''(x_1) & T_3''(x_1) & T_4''(x_1) & T_5''(x_1) \\ T_0''(x_2) & T_1''(x_2) & T_2''(x_2) & T_3''(x_2) & T_4''(x_2) & T_5''(x_2) \\ T_0''(x_3) & T_1''(x_3) & T_2''(x_3) & T_3''(x_3) & T_4''(x_3) & T_5''(x_3) \\ T_0''(x_4) & T_1''(x_4) & T_2''(x_4) & T_3''(x_4) & T_4''(x_4) & T_5''(x_4) \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_2 \\ f(x_1) \\ f(x_2) \\ f(x_3) \\ f(x_4) \\ F_1 \end{bmatrix}$$

Ejercicio Escriba una función que genere las primeras y segundas derivadas de los polinomios $T_n(x)$.

Al invertir la matriz A se tendrán los coeficientes a_n, y de ese modo la solución (8) estará completa.

Cómo invertir la matriz? Nótese primero que la matriz es densa (de hecho no tiene ningún cero) Se puede utilizar el método de descomposición LU. Éste consiste en escribir la matriz A como $A = LU$ donde L es una matriz *Lower triangular*, es decir, tiene sólo ceros arriba de la diagonal, y U es una matriz *Upper triangular*, es decir, tiene sólo ceros abajo de la diagonal. De este modo el problema original $AX = b$ se escribe $AX = (LU)X = L(UX) = b$, y dividimos el proceso de solución en dos pasos. Primero se resuelve $LY = b$ y despúes $UX = Y$ (nótese que es el mismo problema, pues la primera ecuación $b = LY$ al usar la segunda $Y = UX$ da $AX = b$. La ventaja de tener dos pasos en el proceso de solución es que en éstos, se lidia con conjuntos triangulares de ecuaciones, que son sencillitos de resolver. La descomposición matricial la hace la rutina *ludcmp.c* y la solución la da *lubksb.c*. El cómo se implementa puede verse en el código coll.c que ya tienes.

Vale la pena hacer notar que, aunque el problema $d^2u/dx^2 = f(x)$, formalmente se resuelve integrando dos veces, si $f(x)$ no es integrable analíticamente, como por ejemplo $f(x) = \exp(-x^2)$, entonces se requiere lo numérico de cualquier forma. Usando $u(\pm 1) = -M = -\int_{-1}^{1} f(x)dx = -1{,}49365$, proceda a hacer el siguiente

Ejercicio Invierta la matriz anterior con $N = 5, 10, 20$, y grafique $x, u(x)$. Vea cuanto cambia el resultado.

Ecuación de Poisson 2-D

Buscamos una solución de la forma

$$u(x, y) = \sum_{n=0}^{N} \sum_{m=0}^{N} a_{nm} T_n(x) T_m(y) \tag{10}$$

Para encontrar los coeficientes a_{nm}, sustituimos la expansión en la ecuación de Poisson $\nabla^2 u(x, y) = f(x, y) = \exp\left(-x^2 - y^2\right)$, y asumimos que en los puntos de colocación se cumple la ecuación, así que al sustituir la expansión y evaluarla en los puntos de colocación se tiene:

$$\sum_{n=0}^{N}\sum_{m=0}^{N} a_{nm}\left[\frac{d^2T_n(x_i)}{dx^2}T_m(y_j)+T_n(x_i)\frac{d^2T_m(y_i)}{dy^2}\right]=f(x_i,y_j) \qquad (11)$$

Junto con las condiciones de frontera (que es el perímetro del cuadrado de lado 2 centrado en el origen)

$$u(x=\pm 1, y=\pm 1)=-\frac{M}{\sqrt{x^2+y^2}} \qquad (12)$$

se tendrán $(N+1)^2$ ecuaciones lineales para las $(N+1)^2$ incógnitas a_{nm}, asi que se tendrá que resolver una ecuación matricial del tipo $A\vec{X}=\vec{b}$, donde el vector columna $\vec{X}$ tiene como elementos $\vec{X}=(a_{00}, a_{01}, ..., a_{NN})$. Aquí $M=\int_{x=-1}^{1}\int_{y=-1}^{1} f(x,y)dxdy$