Τοπική και ολική προσέγγιση

Οι μέθοδοι πεπερασμένων διαφορών (ΠΔ) που διαπραγματευτήκαμε μέχρι τώρα προσεγγίζουν την λύση *u(x,t)* μιας διαφορικής μερικών παραγώγων $u_t + L(u) = 0$, όπου $L(u)$ είναι ένας τελεστής ο οποίος περιλαμβάνει χωρικές παραγώγους. Οι παράγωγοι προσεγγίζονται με αναπτύγματα Taylor είτε με την χρήση πολυώνυμων παρεμβολής για την προσεγγιστική λύση (κατόπιν οι χωρικές παράγωγοι προσεγγίζονται με παραγώγιση του πολυώνυμου παρεμβολής). Είναι προφανές ότι η αριθμητική προσέγγιση με την μέθοδο πεπερασμένων διαφορών (όπως και με την μέθοδο πεπερασμένων όγκων που θα εξετάσουμε στο επόμενο κεφάλαιο) έχει τοπικό χαρακτήρα διότι μόνο λίγα σημεία του πλέγματος κοντά στο σημείο αναφοράς, *j*, χρησιμοποιούνται για την προσέγγιση παραγώγων ή τιμών τω αγνώστων.

Στην περίπτωση κατά την οποία η “ακριβής” λύση μιας διαφορικής με μερικές παραγώγους (ΔΜΠ) έχει μικρή μεταβλητότητα στον χώρο, η χρήση πολυωνύμων παρεμβολής από ένα σχετικό περιορισμένο αριθμό κόμβων του πλέγματος είναι δικαιολογημένη. Είναι όμως κατανοητό ότι στην περίπτωση κατά την οποία η μεταβλητότητα της “ακριβούς” λύσης στον χώρο ή στον χρόνο είναι πολύ μεγάλη τότε απαιτείται πολύ πυκνός διαμερισμός (πολύ μικρό Δx ή Δt) για να επιτύχουμε αξιόπιστη αναπαράσταση στην αριθμητική μας λύση.

Το μειονέκτημα των μεθόδων ΠΔ που συναντάτε στην προσέγγιση λύσεων με μεγάλη μεταβλητότητα αντιμετωπίζεται επιτυχώς με τις φασματικές μεθόδους που θα παρουσιάσουμε πρώτα με μορφή παραδειγμάτων, όπου θα δείξουμε ότι οι φασματικές μέθοδοι πραγματοποιούν ολικές και όχι τοπικές προσεγγίσεις της αριθμητικής λύσης.

Παράδειγμα 1:

Θεωρούμε την εξίσωση κύματος στην μια διάσταση

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -2\pi \frac{\partial u}{\partial x} \qquad o \le x \le 2\pi$$

$$u(x,o) = e^{\sin(x)}$$

Με περιοδικές οριακές συνθήκες $u(x)=u(x+2N\pi)$ που έχει την αναλυτική λύση

$$u(x,t)=e^{\sin(x-2\pi t)}$$

Δηλαδή μετάδοση της αρχικής συνθήκης με ταχύτητα 2π.
Θεωρούμε ομοιόμορφο πλέγμα

$$x_j = j\Delta x, \qquad \Delta x = \frac{2\pi}{\mathrm{N}+1}, \qquad j = 0,1,.....N$$

Θα εξετάσουμε και πάλι την συμπεριφορά της αριθμητικής λύσης με προσέγγιση ΠΔ 2ης και 4ης τάξης ακρίβειας και για την ειδική περίπτωση που εξετάζουμε (περιοδικές οριακές συνθήκες) θα αναπτύξουμε μία ειδική μεθοδολογία “μεγάλης” τάξης προσέγγισης.

<u>ΠΔ 2ης τάξης</u>

Οι ΠΔ 2ης τάξης υποθέτουν παρεμβολή της λύσης στο σημείο x_j με ένα πολυώνυμο 2ου βαθμού

$$u(x)=\frac{1}{2\Delta x^2}(x-x_j)(x-x_{j+1})\,u_{j-1}$$

$$-\frac{1}{\Delta x^2}(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\,u_j$$

$$+\frac{1}{2\Delta x^2}(x-x_{j-1})(x-x_j)\,u_{j+1}$$

Με παραγώγιση του παραπάνω πολυωνύμου βρίσκεται η δεύτερης τάξης ακρίβειας προσέγγιση της παραγώγου στο σημείο x_j είναι

$$\left.\frac{du}{dx}\right|_{x_j} = \frac{u_{j+1}-u_{j-1}}{2\Delta x}$$

ΠΔ 4^{ης} τάξης

Σύμφωνα με την διαδικασία που ακολουθήσαμε για την προσέγγιση ΠΔ 2^{ης} τάξης με την κατασκευή του πολυωνύμου παρεμβολής 4^{ης} τάξης που διέρχεται από τα σημεία $x_{j-2}, x_{j-1}, x_j, x_{j+1}, x_{j+2}$ βρίσκουμε ότι η αναπαράσταση της πρώτης παραγώγου με κεντρικές ΠΔ 4^{ης} τάξης είναι

$$\left.\frac{du}{dx}\right|_{x_j} = \frac{1}{12\Delta x}\left(u_{j-2} - 8u_{j-1} + 8u_{j+1} - u_{j+2}\right)$$

Ολικό σχήμα παρεμβολής

Προφανώς με χρήση όλων των σημείων του πλέγματος μπορούμε να επιτύχουμε πολύ καλύτερη προσέγγιση. Εκμεταλλευόμενοι την περιοδικότητα των οριακών συνθηκών μπορούμε, όπως θα αποδείξουμε, να προσεγγίσουμε την παράγωγο στο σημείο x_j χρησιμοποιώντας πληροφορία από όλα τα σημεία $\{x_{j-k}, \ldots . x_{j=k}\}$, $k = N/2$

$$\left.\frac{du}{dx}\right|_{x_j} = \sum_{i=0}^{N} \widetilde{D}_{ji} u_i$$

$$D_{ji} = \begin{cases} \dfrac{(-1)^{j+1}}{2} \left[\sin\left(\dfrac{(j-i)\pi}{\mathrm{N}+1}\right)\right]^{-1} & i \neq j \\ 0 & i = j \end{cases}$$

Απόδειξη

Έστω ότι η άπειρης τάξη ακρίβειας μέθοδος ΠΔ για την προσέγγιση της πρώτης παραγώγου είναι

$$\left.\frac{du}{dx}\right|_{x_j} = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \frac{u_{j+n} - u_{j-n}}{2n\Delta x}$$

Ο προσδιορισμός των συντελεστών α_n του αναπτύγματος επιτυγχάνεται θεωρώντας ότι η συνάρτηση u είναι της μορφής $e^{ikx}, i=\sqrt{-1}$ τότε

$$ike^{ikx} = \sum_{n=L}^{\infty} a_n \frac{e^{i(x+n\Delta x)k} - e^{i(x-n\Delta x)k}}{2n\Delta x} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \frac{e^{inDxk} - e^{-inDxk}}{2n\Delta x} e^{ikx} =$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_n \frac{2i\sin(\eta k\Delta x)}{2n\Delta x} e^{ikx} = ie^{ikx}\sum_{n=1}^{\infty} a_n \frac{\sin(\eta k\Delta x)}{n\Delta x}$$

Δηλαδή

$$k = \sum_{n-1}^{\infty} a_n \frac{\sin(nk\Delta x)}{n\Delta x}$$

Έστω ότι $k\ \Delta x = \xi$ τότε το ανάπτυγμα Fourier του ξ είναι:

$$\xi = \sum_{n-1}^{\infty} \frac{a_n}{n} \sin(n\xi)$$

Δηλαδή οι συντελεστές α_n του αναπτύγματος

$$k\Delta x = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a_n}{n} \sin\ (n\ k\Delta\ x)$$

Είναι

$$a_n = \begin{cases} 2(-1)^{n+1} & n \neq 0 \\ 0 & n = 0 \end{cases}$$

Αντικαθιστώντας $\Delta x = \dfrac{2\pi}{N+1}$ βρίσκουμε ότι η προσέγγιση της $1^{ης}$ παραγώγου είναι:

$$\frac{du}{dx}\Big|_{xj} = \frac{\mathrm{N}+1}{4\pi}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\frac{a_n}{n}u_{j+n}$$

Αλλά όταν η συνάρτηση $u(x,t)$ είναι περιοδική στο διάστημα $x \in [0,2\pi]$ με περίοδο 2π τότε:

$$u_{j+n} = u_{j+n+q(N+1)}, \qquad q = 0,\pm1,\pm2,......$$

Συνεπώς

$$\frac{du}{dx}\Big|_{xj} = \frac{N+1}{4\pi}\sum_{n=-j}^{N-j}\left(\sum_{q=-\infty}^{\infty}\frac{\alpha_{n+q}(N+1)}{n+q(N+!)}\right)u_{j+n}$$

$$= \frac{1}{2\pi}\sum_{n=-j}^{N-j} -(-1)^n\left(\sum_{q=-\infty}^{\infty}\frac{(-1)^{q(N+1)}}{q+\dfrac{n}{N+1}}\right)u_{j+n}$$

$$= \frac{1}{2\pi}\sum_{n=-j}^{N-j} -(-1)^n\left(\sum_{q=-\infty}^{\infty}\frac{(-1)^{q}}{q+\dfrac{n}{N+1}}\right)u_{j+n}$$

Αλλά

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty}\frac{(-1)^m}{m+x} = \frac{\pi}{\sin(\pi x)} \qquad \text{δηλαδή}$$

$$\frac{du}{dx}\Big|_{x_j} = \frac{1}{2\pi}\sum_{n=-j}^{N-j} -(-1)^n\frac{\pi}{\sin\left(\dfrac{n\pi}{N+1}\right)}u_{j+n}$$

Αντικαθιστούμε $j+n=m$ και βρίσκουμε

$$\left.\frac{du}{dx}\right|_{x_j} = \sum_{m=0}^{N} \frac{(-1)^{j+m}}{2}\left[\sin\left(\frac{\pi(j-m)}{N+1}\right)\right]^{-1} u_m$$

Επιχειρούμε αριθμητική επίλυση με την τέταρτης τάξης $RK4$ μέθοδο μέχρι τελικό χρόνο $t=\pi$. Αναμένεται ότι το μέγιστο σφάλμα που βρίσκουμε από τις 2ης τάξης ακρίβειας ΠΔ με *N=2048* σημεία θα είναι το ίδιο με το μέγιστο σφάλμα που θα προκύψει από την 4ης τάξης μέθοδο ΠΔ με *N=128* ή με την μέθοδο ολικής προσέγγισης με *N =12*.

Ανάλυση σφάλματος φάσης

Θεωρούμε πάλι την γραμμική εξίσωση κύματος στην μια διάσταση

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -c\frac{\partial u}{\partial x} \qquad 0 \le x \le 2\pi$$

$$u(x,0) = e^{ikx}, \qquad i = \sqrt{-1}$$

Με αναλυτική (ακριβή) λύση

$$u(x,t) = e^{ik(x-ct)}$$

Όπου c είναι η ταχύτητα φάσης (phase speed)

Χρησιμοποιούμε ομοιόμορφα κατανεμημένο πλέγμα για την αριθμητική επίλυση

$$x_j = j\Delta x = \frac{2\pi}{N+1} j \qquad j = 0,1,......N$$

Και την 2m – τάξης προσέγγιση της παραγώγου

$$\left.\frac{du}{dx}\right|_{x_j} = \sum_{n=1}^{m} a_n^m \frac{u_{j+n} - u_{j-n}}{2n\Delta x}$$

Όπου

$$a_n^m = -2\left(-1\right)^n \frac{\left(m!\right)^2}{\left(m-n\right)!\left(m+n\right)!}$$

Για να ξεχωρίσουμε την αριθμητική από την αναλυτική λύση $u\left(x,t\right) = e^{ik\left(x-ct\right)}$ συμβολίζουμε την ημι-διακριτή μορφή ως $\left[\upsilon_o\left(t\right),.......\upsilon_N\left(t\right)\right]$ (δηλαδή ο χρόνος θεωρείται σαν συνεχής μεταβλητή). Τότε η διακριτοποίηση στον χώρο με m–τάξης ακρίβειας πεπερασμένες διαφορές ικανοποιεί την σχέση

$$\frac{d\upsilon_j}{dt} = -c\sum_{n=1}^{m} a_n^m D_n \upsilon_j$$

$$\upsilon_j\left(0\right) = e^{ikx_j}$$

Όπου D_n είναι ο διακριτός τελεστής

$$D_n f\left(x_j\right) = \frac{f\left(x_j + n\Delta x\right) - f\left(x_j - n\Delta x\right)}{2n\Delta x} = \frac{f_{j+n} - f_{j-n}}{2n\Delta x}$$

Δηλαδή $\upsilon\left(x,t\right) = \upsilon_j\left(t\right)$ ικανοποιεί την εξίσωση

$$\frac{\partial \upsilon}{\partial t} = -c\sum_{n=1}^{m} a_n^m D_n \upsilon\left(x,t\right)$$

$$\upsilon\left(x,0\right) = e^{ikx}$$

Με αναλυτική λύση

$$u(x,t) = e^{ik(x - c_m(k)t)}$$

Όπου $c_m(k)$ είναι η αριθμητική ταχύτητα κύματος ή ταχύτητα φάσης.

Το σφάλμα φάσης είναι το σχετικό σφάλμα μεταξύ της αναλυτικής λύσης και της αριθμητικής προσέγγισης.

$$e_m = \frac{u(x,t) - \upsilon(x,t)}{u(x,t)} = \left|1 - e^{ik[c - c_m(k)]t}\right|$$

Το σφάλμα αυτό σε πρώτη προσέγγιση είναι

$$e_{m^{(k)}} \simeq \left|k\left(c - c_m(k)\right)t\right|$$

Ανάλυση σφάλματος ΠΔ

Όπως έχουμε δει και στα προηγούμενα κεφάλαια το σφάλμα διακριτοποιήσης παίζει σημαντικό ρόλο και καθορίζει την αξιοπιστία των αριθμητικών αποτελεσμάτων. Στις παρακάτω παραγράφους θα δώσουμε ποσοτικές εκτιμήσεις του σφάλματος διακριτοποιήσης που μπορούν να χρησιμεύσουν ως οδηγός εκλογής της πυκνότητας πλέγματος.

2^{η} Τάξη

Η αριθμητική ταχύτητα διάδοσης για ΠΔ 2^{η} τάξης είναι

$$c_2(k) = c\frac{\sin(k\Delta x)}{k\Delta x}$$

Και για $\Delta x \ll 1$

$$c_2\left(k\right)=c\left[1-\frac{\left(k\Delta x\right)^2}{6}+0\left(\left(k\Delta x\right)^4\right)\right]$$

<u>4η Τάξη</u>

Η αριθμητική ταχύτητα διάδοσης είναι

$$c_4\left(k\right)=c\frac{8\sin\left(k\Delta x\right)-\sin\left(2k\Delta x\right)}{6k\Delta x}$$

Και για $\Delta x \ll 1$

$$c_4\left(k\right)=c\left[1-\frac{\left(k-\Delta x\right)^4}{30}+0\left(\left(k\Delta x\right)^6\right)\right]$$

Τα αντίστοιχα σφάλματα φάσης για $C_2\left(k\right)$ και $C_4\left(k\right)$ είναι

$$e_2\left(k,t\right)=kct\left|1-\frac{\sin\left(k\Delta x\right)}{k\Delta x}\right|$$

$$e_4\left(k,t\right)=kct\left|1-\frac{8\sin\left(\Delta xk\right)-\sin\left(2k\Delta x\right)}{6k\Delta x}\right|$$

Με την παραπάνω ανάλυση μπορούμε να προσδιορίσουμε τον αριθμό p των κόμβων που απαιτείται για να προσεγγίσουμε μια κυματομορφή με προκαθορισμένη ακρίβεια.

Η κυματομορφή e^{ikx} έχει k αρμονικές στο διάστημα $(0,2\pi)$ και ο αριθμός σημείων ανά αρμονική είναι

$$p=\frac{N+1}{k}=\frac{2\pi}{k\Delta x}$$

το σφάλμα όμως εξαρτάται και από τον τελικό χρόνο. Έστω ότι η περίοδος είναι

$$\nu = kct/2\pi$$

τότε το σφάλμα είναι

$$e_2\left(p,n\right) = 2\pi\nu\left|1 - \frac{\sin\left(2\pi/p\right)}{\frac{2\pi}{p}}\right| \simeq \frac{\pi\nu}{3}\left(\frac{2\pi}{p}\right)^2$$

$$e_4\left(p,n\right) = 2\pi\nu\left|1 - \frac{8\sin\left(\frac{2\pi}{p}\right) - \sin\left(\frac{4\pi}{p}\right)}{\frac{12\pi}{p}}\right| \simeq \frac{\pi\nu}{15}\left(\frac{2\pi}{p}\right)^4$$

ή ο αριθμός κόμβων του πλέγματος $p_{n-order}$ σε σχέση με το αποδεκτό σφάλμα διακριτοποίησης ε είναι

$$p_2\left(\varepsilon,\nu\right) \ge 2\pi\sqrt{\frac{\nu\pi}{3\varepsilon}}$$

$$p_4\left(\varepsilon,\nu\right) \ge 2\pi\sqrt{\frac{\nu\pi}{15\varepsilon}}$$

Έστω ότι το αποδεκτό σφάλμα ε είναι 10% δηλαδή $\varepsilon = 0.1$ τότε

$$p_2 \ge 20\sqrt{\nu} \quad , \quad p_4 \ge 7\sqrt[4]{\nu}$$

Η προσέγγιση της παραγώγου με ΠΔ $4^{ης}$ τάξης απαιτεί διπλάσιο αριθμό υπολογισμών από ότι η προσέγγιση με ΠΔ $2^{ης}$ τάξης. Όταν $\nu = 1/2$ τότε

$$p_2^{(1/2)} \geq 14 \qquad p_4^{(1/2)} \geq 6$$

και προκύπτει ότι δεν υπάρχει μεγάλο όφελος από την χρήση σχήματος 4ης τάξης. Όταν όμως $\nu = 16$

$$p_2^{(16)} \geq 80 \qquad p_4^{(16)} \geq 14$$

Και αναμένεται ότι συνολικός χρόνος που απαιτείται για τον υπολογισμό με 4ης τάξης ακρίβεια είναι περίπου 2.8 φορές πιο λίγος από εκείνο που απαιτείται για να επιτύχουμε το ίδιο επίπεδο ακρίβειας με ΠΔ 2ης τάξης.

Όταν το αποδεκτό σφάλμα φάσης είναι 1% ε = 0.01 τότε προκύπτει ότι

$$p_2 \geq 64\sqrt{\nu} \qquad p_4 \geq 13\sqrt[4]{\nu}$$

και όταν $\varepsilon = 10^{-5}$

$$p_2 \geq 643\sqrt{\nu} \qquad p_4 \geq 43\sqrt[4]{\nu}$$

Συμβολίζοντας με W_m την υπολογιστική προσπάθεια γι χρόνο ολοκλήρωσης t $W_m = 2m\ x\ p_m\ x\ t/\Delta t$ βρίσκουμε ότι

$$W_2 \simeq 30\nu\frac{\nu}{\varepsilon} \qquad W_4 = 35\nu\sqrt{\frac{\nu}{\varepsilon}}$$

Η φασματική μέθοδος Fourier

Θεωρούμε τριγωνομετρικά πολυώνυμα παρεμβολής $h(x)$ για την συνάρτηση $f(x)$ στα σημεία x_j

$$f_N(x) = \sum_{n=o}^{N} f(x_n) h_n(x)$$

όπου τα τριγωνομετρικά πολυώνυμα παρεμβολής Lagrange δίνονται από

$$h_n(x) = \frac{1}{N+2} \frac{\sin\left[\frac{N+1}{2}(x - x_n)\right]}{\sin\left(\frac{x - x_n}{2}\right)}$$

$$= \sum_{k=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} e^{ik(x-x_n)}$$

που προφανώς είναι ακριβή για τριγωνομετρικά πολυώνυμα βαθμού N/2

Θεωρούμε τα παραπάνω πολυώνυμα παρεμβολής για την αριθμητική επίλυση της εξίσωσης κύματος.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -c \frac{\partial u}{\partial x} \qquad 0 \le x \le 2\pi$$

$$u(u,0) = e^{ikx}$$

με περιοδικές οριακές συνθήκες

τότε το ανάπτυγμα της αριθμητικής λύσης είναι

$$\upsilon(x,t)=\sum_{n=0}^{N}\upsilon(x_n,t)h_n(x)$$

τότε

$$\frac{\partial\upsilon}{\partial t}=-c\frac{\partial\upsilon}{\partial x}$$

στα σημεία $x=x_j \qquad j=0,....,N$

Τότε η παράγωγος στους κόμβους x_j είναι

$$\left.\frac{\partial\upsilon}{\partial t}\right|_{x_j}=\sum_{n=0}^{N}\upsilon(x_n,t)h_n'(x_j)$$

$$h_n'(x_j)=\frac{(-1)^{j+1}}{2}\left[\sin\left(\frac{\pi}{N+1}(j-n)\right)\right]^{-1}$$

$$\left.\frac{d\upsilon}{dt}\right|_{x_j}=-c\sum_{n=0}^{N}\frac{(-1)^{j+1}}{2}\left[\sin\left(\frac{\Pi}{N+1}(j-n)\right)\right]^{-1}\upsilon(x_n,t)$$

Είναι δηλαδή προφανές ότι η φασματική μέθοδο Fourier (spectral Fourier – collocation method) είναι ισοδύναμη με το άπειρης τάξης ακρίβειας σχήμα πεπερασμένων διαφορών που χρησιμοποιήσαμε προηγουμένως.

Η φασματική μέθοδος Fourier – Galerkin

Βασιζόμενοι στα παραπάνω παραδείγματα στα οποία το πεδίο ορισμού της διαφορικής ήταν το διάστημα $[0,2\pi]$μπορούμε να γενικεύσουμε τις φασματικές μεθόδους υποθέτοντας ότι είναι δυνατόν να επεκτείνουμε περιοδικά την λύση η οποία

υποτίθεται ότι είναι ομαλή και έχει τον απαιτούμενο αριθμό έτσι ώστε να είναι δυνατή η κατασκευή αναπτυγμάτων Fourier.
Θεωρούμε το πρόβλημα

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = L\, u(x,t) \qquad x \in [0,2\pi], \qquad t \geq 0$$

$$u(x,o) = g(x) \qquad x \in [0,2\pi] \qquad t = 0$$

και το ανάπτυγμα $u_N(x,t)$ της προσεγγιστικής λύσης

$$u_N(x,t) = \sum_{|n| \leq N/2} a_n(t) e^{inx}$$

Όπου $a_n(t)$ είναι οι άγνωστοι συντελεστές που θα προσδιορισθούν μετά την εφαρμογή της Fourier–Galerkin (F–G) φασματικής μέθοδου ή με την μέθοδο ομοιοθεσίας Fourier (Fourier – collocation method), η οποία αναφέρεται και ως ψευδο-φασματική μέθοδος Fourier–παρεμβολής. Η φασματική μέθοδος F–G και η μέθοδος ομοιοθεσίας Fourier θα παρουσιάσουμε παρακάτω με παραδείγματα.

Πρέπει να σημειωθεί ότι οι άγνωστοι συντελεστές $a_n(t)$ του αναπτύγματος της προσεγγιστικής λύσης δεν είναι οι συντελεστές Fourier $\hat{u}_N$ ίσα ισότητα των συντελεστών $a_n(t)$ και $\hat{u}_N$ επιτυγχάνεται μόνον όταν η προσεγγιστική λύση είναι η ακριβής λύση.

Αντικατάσταση της προσεγγιστικής λύσης $u_N(x,t)$ στην διαφορική εξίσωση συνεπάγεται την δημιουργία ενός υπολοίπου $R_N(x,t)$ που δεν είναι κατ' ανάγκη μηδενικό

$$R_N(x,t) = \frac{\partial u_N(x,t)}{\partial t} - Lu_N(x,t)$$

Η φασματική μέθοδος Fourier–Galerkin (F-G) υπολογίζει τους άγνωστους συντελεστές $\alpha_n(t)$ εξασφαλίζοντας την συνθήκη ορθογωνιότητας του υπολοίπου $R_N(x,t)$ με τις συναρτήσεις βάσης e^{inx}.

Το υπόλοιπο $R_N(x,t)$ μπορεί να εκφρασθεί και αυτό σαν ανάπτυγμα Fourier της μορφής

$$R(x,t) = \sum_{|m|<\infty} \hat{R}_n(t) e^{inx}$$

και η συνθήκη ορθογωνιότητας είναι

$$\hat{R}_n(t) = \frac{1}{2\pi} \int_o^{2\pi} R_N(x,t) e^{-inx} dx = 0 \qquad \forall\, |n| \le \frac{N}{2}$$

Η παραπάνω σχέση είναι ένα σύστημα N + 1 συνήθων διαφορικών εξισώσεων ως προς τους άγνωστους συντελεστές $a_n(t)$ που μαζί με τις οριακές συνθήκες

$$u_{\mathrm{N}}(x,0) = \sum_{|n|\le N/2} a_n(0) e^{inx}$$

$$\alpha_n(0) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} g(x) e^{-inx} dx$$

Προσδιορίζει την προσεγγιστική λύση για κάθε χρονικό βήμα. Η πρακτική εφαρμογή της φασματικής μεθόδου Fourier – Galerkin φαίνεται στο παρακάτω παράδειγμα.

Παράδειγμα εφαρμογής της F–G φασματικής μεθόδου

Θεωρούμε την γραμμική διαφορική εξίσωση με μερικές παραγώγους

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = c\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} + \varepsilon\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}$$

γνωστή και ως εξίσωση μεταφοράς – διάχυσης ορισμένη στο διάστημα $[0,2\pi]$.

Αναζητούμε προσεγγιστική λύση που εκφράζεται με την μορφή αναπτύγματος

$$u_N(x,t) = \sum_{|n|\le N/2} a_n(t)\, e^{inx}$$

Οι συντελεστές $a_n(t)$ προσδιορίζονται από την σχέση ορθογωνιότητας του υπολοίπου

$$R_N(x,t) = \frac{\partial u_N}{\partial t} - c\frac{\partial u_N}{\partial x} - \varepsilon\frac{\partial^2 u_N}{\partial x^2}$$

με το χώρο των βάσεων $\hat{B}_N \in span\left\{e^{inx}\right\}_{|n|\le N/2}$

$$\frac{\partial u_N}{\partial x} = \sum_{|n|\le N/2} (in)\, a_n(t)\, e^{inx}$$

$$\frac{\partial^2 u_N}{\partial x^2} = \sum_{|n|\le N/2} (in)^2\, \alpha_n(t)\, e^{inx}$$

Δηλαδή

$$R_N\left(x,t\right)=\sum_{|n|\le\frac{N}{2}}\left[\frac{da_n\left(t\right)}{dt}-c\left(in\right)a_n\left(t\right)+\varepsilon n^2 a_n\left(t\right)\right]e^{inx}$$

$$=\sum_{|n|\le\frac{N}{2}}\hat{R}_n\left(t\right)e^{inx}$$

Η συνθήκη ορθογωνιότητας είναι

$$\frac{d\alpha_n\left(t\right)}{dt}=\left(c\,in-\varepsilon n^2\right)a_n\left(t\right)\qquad\forall|n|\le\frac{N}{2}$$

που είναι το σύστημα N+1 συνήθων διαφορικών με μιγαδικούς συντελεστές η λύση του οποίου (μαζί με κατάλληλες οριακές και αρχικές συνθήκες) προσδιορίζει την λύση της εξίσωσης μεταφοράς-διάχυσης.

Η ψευδο-φασματική μέθοδος Fourier-collocation

Ο αναλυτικός υπολογισμός των εσωτερικών γινομένων (συνθήκη ορθογωνιοτητας) δεν είναι εφικτός σε περίπλοκα μη γραμμικά προβλήματα. Η δυσκολία αυτή παρακάμπτεται με την χρήση της ψευδο-φασματικής μεθόδου Fourier – collocation, γνωστή στην βιβλιογραφία ως Fourier- collocation method, η οποία απαιτεί τον μηδενισμό του υπολοίπου μόνο σε ορισμένους κόμβους $\hat{x}_j$ (collocation – grid) που δεν είναι κατ’ ανάγκη οι ίδιοι με τους κόμβους παρεμβολής x_j (interpolation grid) που ορίζεται ως

$$x_j=\frac{2\pi}{N}j\qquad,\qquad j=0,1....N-1\qquad,\qquad N=2k$$

Θεωρούμε και πάλι το πρόβλημα με περιοδικές οριακές συνθήκες

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = L\ u(x,t) \qquad x \in [0,2\pi] \qquad t \geq 0$$

$$u(x,0) = g(x) \qquad x \in [0,2\pi] \qquad t = 0$$

Θεωρούμε και πάλι το ανάπτυγμα της προσεγγιστικής λύσης

$$u_N(x,t) = \sum_{|n| \leq N/2} a_n(t)\ e^{inz}$$

Και απαιτούμε τον μηδενισμό του υπολοίπου

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

Στα σημεία ταξινόμησης (collocation points) $\hat{x}_j$ δηλαδή

$$R_N(\hat{x}_j, t) = 0, \qquad j = 0,1, \qquad N-1$$

οι σχέσεις αυτές χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό των συντελεστών $a_n(t)$ όπως φαίνεται στο παρακάτω παράδειγμα.

Θεωρούμε και πάλι την εξίσωση μεταφοράς-διάχυσης

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = c\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} + \varepsilon\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}$$

και το ανάπτυγμα Fourier της λύσης

$$u_N(x,t) = \sum_{|n| \leq N/2} a_n(t) e^{ixn} = I_N u_N$$

Επιλέγουμε να συμπίπτονται σημεία ταξινόμησης $\hat{x}_j$ με τα σημεία παρεμβολής και βρίσκουμε το παρακάτω σύστημα συνήθων διαφορικών για τον υπολογισμό της προσεγγιστικής λύσης

$$\frac{du_N\left(x_j,t\right)}{dt}=cI_N\frac{\partial}{\partial x}I_Nu_{\mathrm{N}}\left(x_j,t\right)+\varepsilon I_{\mathrm{N}}\frac{\partial^2}{\partial x^2}I_Nu_N\left(x_j,t\right)$$

$$=\sum_{k=0}^{N-1}\left[cD_{ik}^{(1)}+\varepsilon D_{jk}^{(2)}\right]u_N\left(x_k\right)$$

όπου $D_{jk}^{(1)}$ και $D_{jk}^{(2)}$ είναι τα μητρώα παραγώγισης.

Στην εφαρμογή της μεθόδου το ανάπτυγμα Fourier χρησιμοποιείται μόνο για να υπολογίσουμε τις παραγώγους της αριθμητικής προσέγγισης. Η διαδικασία αυτή μπορεί να επιτευχθεί με δυο τρόπους (1) με την χρήση F FT και (2) με απ’ ευθείας υπολογισμό όπως αναπτύσσεται στα παρακάτω κεφάλαια.