

Pseudospektrální metody

Obecně:

- založeny na rozvoji do bázových funkcí s globálním nosičem
- řešení $u(x)$ diferenciální rovnice aproximuje sumou

$$v(x) = \sum_{k=0}^N a_k \phi_k(x),$$

kde $\phi_k(x)$ jsou např. Čebyševovy polynomy nebo trigonometrické funkce

- tyto funkce pak můžeme derivovat přesně
- otázka: z jaké třídy funkcí vybírat $\phi_k(x)$ a jak určit koeficienty expanze a_k

Požadavky:

1. $v(x)$ musí rychle konvergovat k $u(x)$, aspoň pro „rozumné“ funkce
2. z koeficientů a_k musíme lehce dostat k b_k :

$$\frac{d}{dx} \left(\sum_{k=0}^N a_k \phi_k(x) \right) = \sum_{k=0}^N b_k \phi_k(x)$$

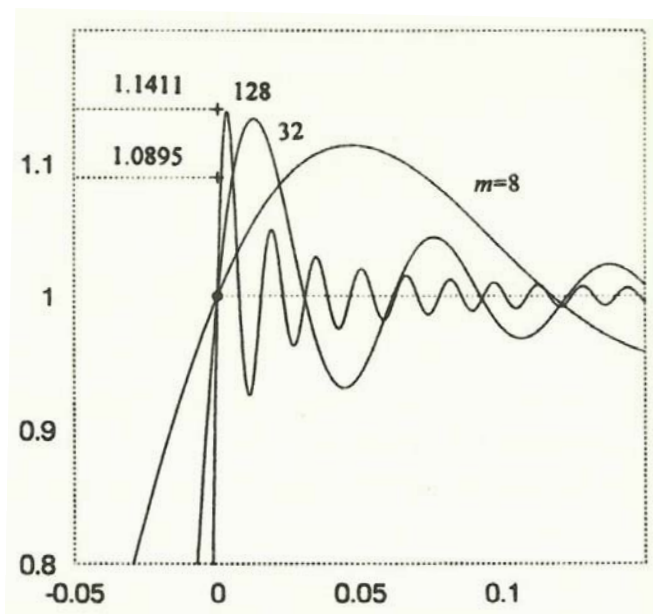
3. musí existovat rychlý algoritmus na přepočítání mezi koeficienty a_k , $k = 0, \dots, N$, a hodnotami $v(x_i)$ v nějakém uzlu sítě x_i , $i = 0, \dots, N$

Periodický problém

- rozvoj do trigonometrických funkcí splňuje všechny tři požadavky; první dva automaticky a třetí díky FFT algoritmu

Neperiodický problém

- rozvoj do trigonometrických funkcí selhává pro požadavek 1. Chyba vznikne umělým vynucením periodicity
- oříznutý Taylorův rozvoj $v(x) = \sum_{k=0}^N a_k x^k$ vyžaduje velkou hladkost, jinak zase není bod 1 splněn
- v případě nespojitosti se objeví Gibbsův jev



Jako nevhodnější funkce se ukazují ortogonální polynomy Jakobiho typu (Čebyševovy a Legendery)

- konečný rozvoj do Legendrových polynomů je optimální pro L^2 normu, aproximace v maximové normě je optimální v Čebyševových polynomech
- interpolace v Čebyševových uzlech (kořenech nebo extrémech), dává pro libovolnou funkci interpolační polynom blízký optimálnímu v maximové normě $\|f - P_N^C\| \leq (1 + \Lambda_N^C) \|f - P_N^{opt}\|$, kde Λ_N^C je Lebesgueova konstanta (př. $\Lambda_N^C = O(\ln N)$; $\Lambda_N^{leg} = O(\sqrt{N})$; $\Lambda_N^{eq} = O\left(\frac{2^N}{N \ln N}\right)$)
- požadavek 1. je tedy pro Jakobiho polynomy splněn, 2. bod také, protože existuje rekurentní algoritmus na výpočet derivace, který navíc není závislý na x .

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & -\frac{1}{2} & & & & \\ & \frac{1}{4} & 0 & -\frac{1}{4} & & & \\ & & \frac{1}{6} & 0 & -\frac{1}{6} & & \\ & & & \frac{1}{8} & 0 & -\frac{1}{8} & \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & & \frac{1}{2N-2} & 0 \\ & & & & & & \frac{1}{2N} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_{N-2} \\ b_{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ \vdots \\ a_{N-1} \\ a_N \end{bmatrix}$$

- Pokud navíc zvolíme $x_i = -\cos\left(\frac{\pi i}{N}\right)$, můžeme na přechod mezi koeficienty rozvoje a_k a funkčními hodnotami $v(x_i)$ použít kosinovou transformaci FCT
- použití Čebyševových polynomů se jeví jako univerzální pro neperiodické problémy

	Legendre	Chebyshev
Weight function $W(x)$	1	$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$
Customary normalization	$P_n(1) = 1$	$T_n(1) = 1$
First few polynomials	1 x $\frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}$ $\frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x$ $\frac{35}{8}x^4 - \frac{15}{4}x^2 + \frac{3}{8}$ $\frac{63}{8}x^5 - \frac{35}{4}x^3 + \frac{15}{8}x$	1 x $2x^2 - 1$ $4x^3 - 3x$ $8x^4 - 8x^2 + 1$ $16x^5 - 20x^3 + 5x$

Three-term recursion	$(n+1)P_{n+1} - (2n+1)xP_n + nP_{n-1} = 0$	$T_{n+1} - 2xT_n + T_{n-1} = 0$
Differential equation	$(1-x^2)P_n'' - 2xP_n' + n(n+1)P_n = 0$	$(1-x^2)T_n'' - xT_n' + n^2T_n = 0$
First derivative recursion	$P_{n+1}' - P_{n-1}' = (2n+1)P_n$	$\frac{T_{n+1}'}{n+1} - \frac{T_{n-1}'}{n-1} = 2T_n$

Kardinální funkce a diferenční matice

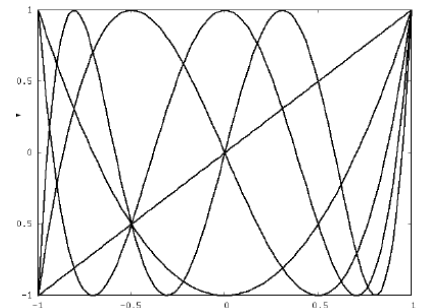
$$v(x) = \sum_{j=0}^m v(x_j) \phi_m(x - x_j)$$

- derivace funkce v bodě $x = x_i$:

$$v'(x_i) = \sum_{j=0}^m v(x_j) \frac{d}{dx} \phi_m(x - x_j) \Big|_{x=x_i}$$

- zapsáno maticovou formou:

$$\begin{bmatrix} v'(x_0) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ v'(x_m) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v(x_0) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ v(x_m) \end{bmatrix}$$



PS metody jako konečné diference (FD)

Periodické i neperiodické PS metody mohou být brány jako velmi přesná limita FD metod

- polynomiální aproximace funkce v bodě pomocí Lagrangeova interpol. polynomu

$$p_N(x) = \sum_{k=0}^N f(x_k) F_k(x)$$

$$F_k(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^N (x - x_j) / \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^N (x_k - x_j), \quad k = 0, \dots, N$$

$$F_k(x_j) = \begin{cases} 0 & \text{if } j = k \\ 1 & \text{if } j \neq k \end{cases}$$

- k -tý člen zaručuje, že má interpolační polynom v daném uzlu správnou hodnotu
- Aproximace derivace funkce v bodě ξ ; $\frac{d^k f(x)}{dx^k} \Big|_{x=\xi}$:

$$\frac{d^k p_i(x)}{dx^k} \Big|_{x=\xi} = \sum_{j=0}^i \frac{d^k F_{i,j}(x)}{dx^k} \Big|_{x=\xi} f(x_j), \quad i = 0, \dots, N,$$

Kde váhy jsou $c_{i,j}^k = \frac{d^k F_{i,j}(x)}{dx^k} \Big|_{x=\xi}$

$$\frac{d^k f(x)}{dx^k} \Big|_{x=\xi} \doteq \sum_{j=0}^i c_{i,j}^k f(x_j)$$

Rozložení uzlů

- Ekvidistantní rozložení

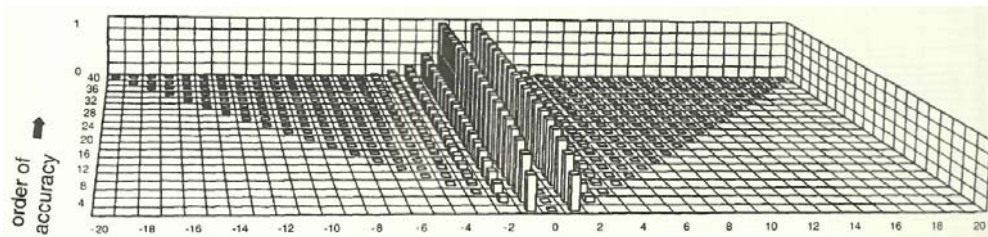


Figure 3.2-1. Magnitude of weights for centered approximations to the first derivative on an equi-spaced grid (cf. Table 3.1-1).

Rozložení vah pro centrální diference a pro jednostrannou derivaci.

Váhy konečných diferencí s ekvidistantně rozloženými uzly pro zvyšující se řád přesnosti u hranic významně rostou a tím se zvyšuje chyba.

Nejjednodušší cesta, jak se těch chyb zbavit, je koncentrovat uzly k hranicím intervalů. Všechny ortogonální polynomy (Čebyšev, Legendre) charakterizuje, že pro rostoucí N se vzdálenost mezi uzly u hranice chová jako $(O(1/N^2))$.

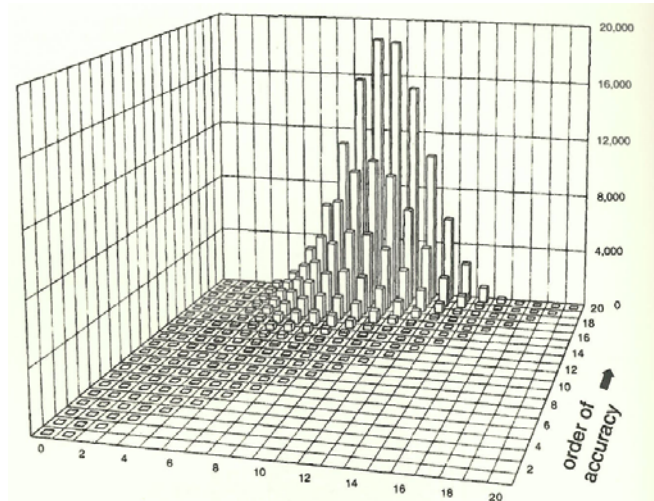


Figure 3.2-2. Magnitude of weights for one-sided approximations to the first derivative on an equi-spaced grid (cf. Table 3.1-2).

- Interpolační polynom dává pěkné chování i mezi uzly, pouze pokud se tak chová i polynom $F_k(x)$

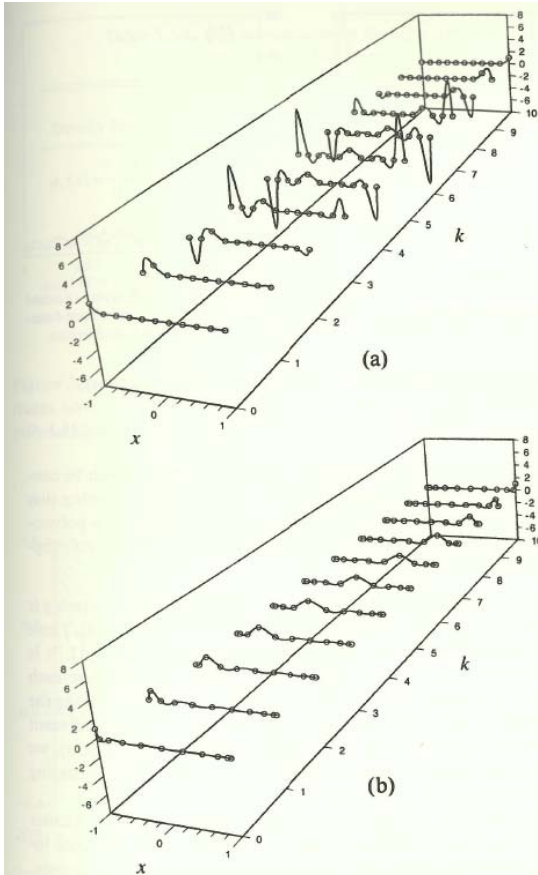


Figure 3.3-2. Basis functions $F_k(x)$ in Lagrange's interpolation formula for two different node distributions in the case of $N = 10$. (a) Equi-distributed nodes: $x_i = -1 + 2i/N$, $i = 0, 1, \dots, N$. (b) Chebyshev-distributed nodes: $x_i = -\cos(\pi i/N)$, $i = 0, 1, \dots, N$.

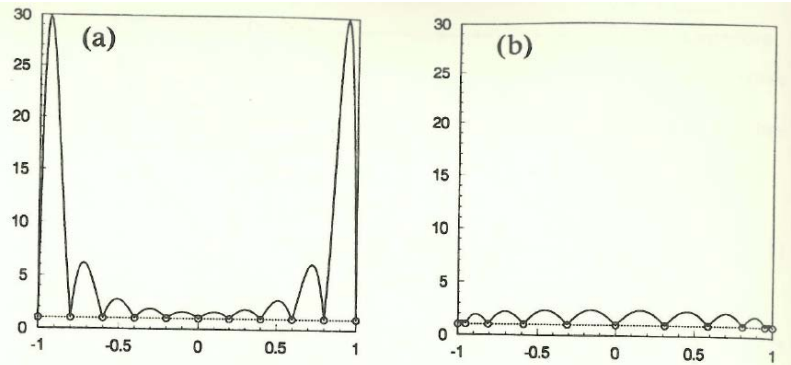
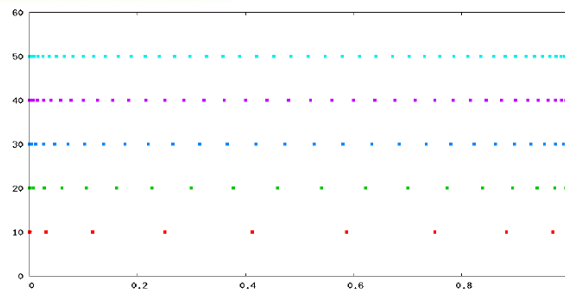


Figure 3.3-3. The functions $\sum_{k=0}^N |F_k(x)|$ (solid curves) and $\sum_{k=0}^N F_k(x) \equiv 1$ (dashed straight lines) in the case of $N = 10$ (cf. Figure 3.3-2 showing the individual functions $F_k(x)$). (a) Equi-distributed nodes. (b) Chebyshev-distributed nodes.

Jednotlivé členy Lagrangeova interpolačního polynomu významně neoscilují na síti s čebyševovsky rozloženými uzly.

Lebesguova konstanta je v Obr. 3.3-3 přímo vidět:

$$\Lambda_N = \max_{x \in [-1, 1]} \sum_{k=0}^N |F_k(x)|$$



Interpolační chyba je obzvlášť malá, pokud použijeme čebyševovskou síť. Chyba interpolačního polynomu $R_N(x) = f(x) - p_N(x)$ splňuje:

$$R_N(x) = \frac{1}{(N+1)!} f^{(N+1)}(\xi) \prod_{j=0}^N (x - x_j); \quad \xi \in [-1, 1]$$

Součin je jediná část, kterou můžeme kontrolovat přímo rozložením uzlů x_j . Na intervalu $[-1, 1]$ je součin nejmenší právě pro Čebyševovy polynomy.

Ekvivalence PS metod a limity FD metod

- Předpokládejme, že data nemůžou být rozšířena přes hranici.
- Řád přesnosti interpolace závisí na počtu síťových bodů.
- Pro daná data a rozložení uzlů je interpolační polynom jedinečný.
- Protože oba přístupy dávají stejné výsledky pro int. polynom, budou i výsledky stejné.

PS:

- Data daná v $N + 1$ bodech na intervalu $[-1, 1]$ v nulách nebo extrémech nějakého ortogonálního polynomu.
- Rozvojem do těchto polynomů se PS metoda postará o přesné odvození interpolačního polynomu procházejícího skrz data.

FD:

- K aproximaci derivací v síťových bodech se musí počítat váhy pro každý bod zvlášť

Interpolace polynomy vyšších řádů má špatnou pověst, protože do nich vstupuje velká chyba daná oscilacemi u hranice, které ovšem nevzniknou použitím sítě s čebyševovsky rozloženými uzly.