

# Mètodes espectrals i pseudoespectrals aplicats a la mecànica de fluids

Ainhoa Iturraspe i Daniel Soler

Oinarrizko Zientziak Saila, Goi Eskola Politeknikoa, Mondragon Unibertsitatea

Loramendi 4, 20500 Arrasate-Mondragon, Euskadi

dsoler@eps.mondragon.edu

## Resum

En aquest article s'explica en què consisteixen els mètodes espectrals i pseudoespectrals o de col·locació per a la resolució d'equacions diferencials. Per il·lustrar la potència d'aquests mètodes es planteja un problema clàssic de la mecànica de fluids com és la determinació de les condicions en què s'inicia la convecció lliure d'un fluid sotmès a un gradient de temperatura vertical, s'hi fan un seguit de simplificacions perquè aquest sigui resoluble exactament, a fi de poder comparar la solució exacta amb les solucions aproximades obtingudes amb el mètode spectral i el de col·locació.

## 1 Introducció

En la majoria dels problemes als quals s'enfronta un físic o un enginyer és necessari plantejar i sovint resoldre una equació diferencial amb derivades parcials (PDE). Tanmateix, si es tracta de resoldre una equació diferencial a l'atzar el més probable és que no hi trobi cap solució analítica, de manera que en general hi ha dues formes d'abordar els problemes físics, o bé se simplifiquen les equacions obtingudes a fi de ser capaços d'obtenir solucions analítiques aproximades o bé s'ha de recórrer a tècniques d'integració numèrica. No cal dir que aquestes tècniques han sofert canvis espectaculars des de la irrupció dels ordinadors.

Tradicionalment les tècniques d'integració numèriques es redueixen al mètode de diferències finites i al d'elements finits, tanmateix hi ha altres tècniques per resoldre PDE que estan emergent amb força com a alternativa a aquests mètodes, es tracta dels mètodes espectrals i pseudoespectrals.

En línies generals aquests mètodes es caracteritzen per obtenir funcions analítiques definides en tot el domini de definició que aproximen la solució del problema i per tenir un grau de convergència molt superior als mètodes tradicionals (convergència espectral).

Aquests mètodes no són en si recents (de fet, hi ha un treball de Galerkin del 1915 on els usa en l'anàlisi de l'equilibri elàstic de barres i plats), però sí que hi ha hagut un ressorgiment, tant pel que fa al seu interès des del punt de vista pedagògic com pel que fa al seu ús en el camp de la investigació. Això ha estat condicionat, d'una banda, pel desenvolupament de programari potent que permet treballar matemàtica simbòlica i, de l'altra, per la popu-

larització, a partir de 1965, de la transformada ràpida de Fourier (FFT), que ha permès disminuir significativament el cost computacional d'aquests mètodes.

En aquest article s'explica en què consisteixen aquests mètodes, per aplicar-los després a un problema de mecànica de fluids. Tanmateix, aquests mètodes s'han aplicat amb èxit en altres camps de la física, com ara la conducció de calor o la mecànica quàntica, entre d'altres.

## 2 Mètodes espectrals i pseudoespectrals

Donat un problema diferencial definit per

$$Hu(x) = f \quad x \in [a, b] \quad (1)$$

$$Bu(x_i) = 0 \quad x_i = a, b \quad (2)$$

on  $H$  és un operador diferencial, i  $Bu$  defineix unes condicions de contorn, la idea bàsica consisteix a aproximar la solució exacta  $u(x)$  per una combinació lineal d'unes certes funcions de base  $\phi_n(x)$ ,

$$u(x) \approx u_N(x) = \sum_{n=0}^N a_n \phi_n(x), \quad (3)$$

on  $a_n$  és un conjunt de paràmetres que s'han de calcular a fi i efecte que l'aproximació sigui bona.

Per determinar en quin grau és bona l'aproximació, es defineix el residu o error de l'aproximació:

$$R_N = Hu_N - f. \quad (4)$$

Per a la solució exacta, és clar que el residu és 0, però en general es tracta d'una funció de  $x$  que depèn de  $N+1$  paràmetres, i. e.,  $R_N = R_N(x, a_0, a_1, \dots, a_N)$ . L'objec

ubuntu tiu és, doncs, escollir els coeficients  $a_n$  perquè el residu sigui mínim. Per tant, el grau de convergència de l'aproximació (3) depèn, d'una banda, de l'elecció de les funcions de base  $i$ , de l'altra, del mètode usat per a minimitzar el residu, que és el que permetrà determinar els coeficients.

En general s'escullen com a funcions de base famílies solució d'un problema de Sturm-Liouville, perquè defineixen bases ortonormals completes, cosa que implica en la majoria dels casos una convergència espectral de l'aproximació. En particular s'acostuma a triar la base de Fourier per a problemes periòdics i els polinomis de Tchebixev  $\{T_n(x)\}$  per a problemes no periòdics, essencialment perquè en aquests casos és possible usar tècniques de transformació tipus FFT i perquè les arrels d'aquestes funcions estan ben determinades. (Interessant a l'hora d'aplicar sistemes d'integració numèrica com ara la quadratura de Gauss.)

A l'hora de minimitzar el residu hi ha diversos mètodes, els mètodes espectrals i els mètodes pseudoespectrals o de col·locació, però en ambdós casos es parteix de (4) per definir un sistema algebraic d'equacions sobre els coeficients  $\{a_n\}$ .

### 2.1 Mètodes espectrals

En aquest cas, per minimitzar el residu s'escullen un conjunt de funcions test  $\varphi_k$ , que poden, o no, coincidir amb les funcions de base  $\phi_n$ , i s'imposa

$$\langle \varphi_k, R \rangle = 0 \quad k = 1, \dots, N + 1 \quad (5)$$

sent

$$\langle u, v \rangle := \int_U u(x)\omega(x)v(x)dx \quad (6)$$

un producte escalar de funcions, definit per una funció pes  $\omega(x)$  no negativa. És obvi que (5) defineix un sistema  $N + 1$  equacions lineals sobre les  $\{a_n\}$ .

Normalment s'escullen funcions de base en què cada una d'elles satisfaci les condicions de contorn, de manera que (2) se satisfà automàticament (mètode de Galerkin); quan això no és possible, se substitueixen algunes de les equacions de (5) per les equacions (2) (mètode de Tau).

### 2.2 Mètodes pseudoespectrals o de col·locació

Els mètodes pseudoespectrals, en canvi, minimitzen el residu imposant que s'anul·li en un número finit de punts  $\{x_i\}$ , anomenats *punts de col·locació*. És a dir,

$$R_N = Hu_N(x_i) - f(x_i) = 0 \quad i = k = 1, \dots, N + 1 \quad (7)$$

Els punts de col·locació que s'acostumen a utilitzar són els punts de quadratura de Gauss corresponents a base escollida  $\phi_k$ . L'expressió (7) defineix un sistema de  $N + 1$  equacions, d'on és possible calcular les incògnites  $\{a_n\}$ .

Els dos mètodes són formalment equivalents si es prenen com a funcions test el conjunt de funcions delta de

Dirac,  $\varphi_i(x) = \delta(x - x_i)$ , sent  $x_i$  els punts de col·locació, i poden ser idèntics si les integrals de (5) es calculen numèricament usant quadratures de Gauss.

Tanmateix, en general, si s'aplica el mètode espectral, el residu s'anul·la en mitja, mentre que amb les tècniques pseudoespectrals el residu és exactament zero en els punts de col·locació, i per tant en aquests punts la funció aproximada i la solució exacta valen el mateix,  $u_N(x_i) = u(x_i)$ . Per això, i com que les funcions de base i els punts de col·locació són tals que el sistema

$$\sum_{n=0}^N a_n \phi_n(x_i) = u_N(x_i) \quad (8)$$

té solució, alguns algorismes, en comptes de prendre com a incògnites els coeficients  $\{a_n\}$ , prenen el conjunt equivalent  $\{u(x_i)\}$ . Això facilita la introducció de tècniques especials com ara l'FFT o tècniques de derivació matricial (MDM), vegeu per exemple (Trefethen, 2000). Aquestes tècniques, però, sovint impliquen un tractament especial de les condicions de contorn.

## 3 Aplicació física

Un fluid sotmès a un gradient vertical de temperatura pot estar en equilibri mecànic, és a dir, pot existir un estat en què la velocitat del fluid sigui nul·la. Ara bé, si es va augmentant el gradient de temperatura, arriba un moment en què aquest equilibri ja no és possible i aleshores apareixen corrents interns que l'agiten i que fan que el fluid tendeixi a barrejar-se. Quan això succeeix es diu que s'ha passat d'un règim estacionari conductiu a un règim convectiu, que pot ser, també, estacionari.

La temperatura crítica a la qual es produeix el canvi de règim depèn tant de les característiques del fluid com de la geometria del recipient on es troba, i es pot determinar teòricament. De fet, el salt es produeix quan un nombre adimensional, anomenat nombre de Rayleigh, arriba a cert valor crític ( $Ra_c$ ).

En aquesta secció s'escriuen les equacions que regeixen el comportament d'un fluid incompressible, quan és en un cilindre vertical infinit de radi  $R$ , i es determina el corresponent  $Ra_c$ . Resulta que aquest és un problema que pot resoldre's exactament (Ostroumov, 1958), de manera que permet comparar les solucions aproximades obtingudes pels mètodes espectral i pseudoespectral amb la solució exacta (vegeu la figura 1 on es mostra el perfil de velocitats de la solució exacta).

Per determinar el comportament dels fluids, com en qualsevol problema de mecànica, s'han d'analitzar les lleis de conservació de l'energia, de la quantitat de moviment i de la massa, les dues darreres en el context de la mecànica de fluids reben el nom d'equacions de Navier-Stokes i de continuïtat, respectivament.

Per al problema de la convecció lliure estacionària d'un fluid viscos (Landau et al., 1998), aquestes equacions es

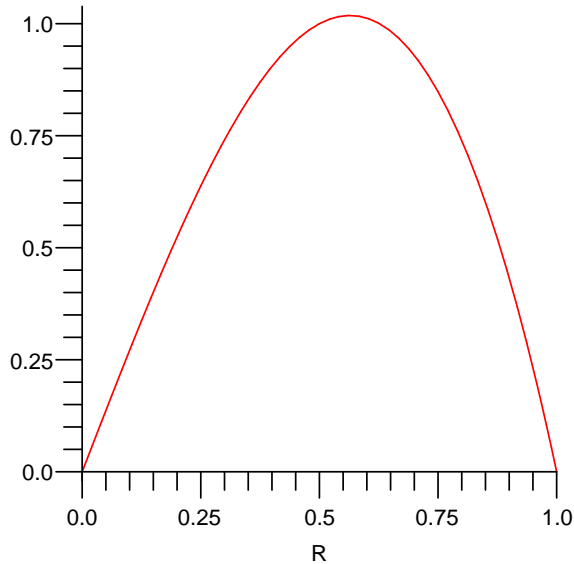


Figura 1: Perfil de la solució exacta de la velocitat del fluid en funció del radi. La solució ha estat normalitzada imposant que el màxim sigui 1

redueixen a:

$$\begin{aligned}\nabla_{\vec{v}}T &= \kappa\Delta T \\ \nabla_{\vec{v}}\vec{v} &= -\frac{1}{\rho}\vec{\nabla}p + \nu\Delta\vec{v} - \beta\vec{g}T \\ \vec{\nabla}\cdot\vec{v} &= 0\end{aligned}\quad (9)$$

on  $\vec{v}$  és el camp de velocitats d'un fluid amb coeficient de viscositat cinemàtic  $\nu$  constant,  $\rho$  és la densitat,  $T = T' - T_0$  sent  $T'$  la temperatura del fluid i  $T_0$  la temperatura en l'estat d'equilibri, és a dir,  $T_0 = -Az$ ,  $\beta$  és el coeficient de dilatació,  $p = p' - p_0$  on  $p'$  és la pressió i  $p_0$  és la pressió corresponent a l'equilibri mecànic i on  $\kappa$  és la conductivitat termomètrica.

La configuració del problema (vegeu la figura 2) permet suposar que la velocitat només té una component no nul·la,  $\vec{v} = v\hat{k}$ , a més, com que el cilindre és infinit, ni  $p$ , ni  $v$ , ni  $T$  poden dependre de la variable  $z$ , de manera que tenint en compte que la variació de la pressió deguda al gradient de temperatures ja s'ha inclòs a  $p_0$ , l'equació de Navier-Stokes se redueix a

$$\nu\nabla^2v + \beta gT = 0, \quad (10)$$

l'equació de l'energia a

$$-Av - \kappa\nabla^2T = 0 \quad (11)$$

on  $A$  ve de  $\vec{\nabla}T_0 = A\vec{k}$  i l'equació de continuïtat se satisfà automàticament.

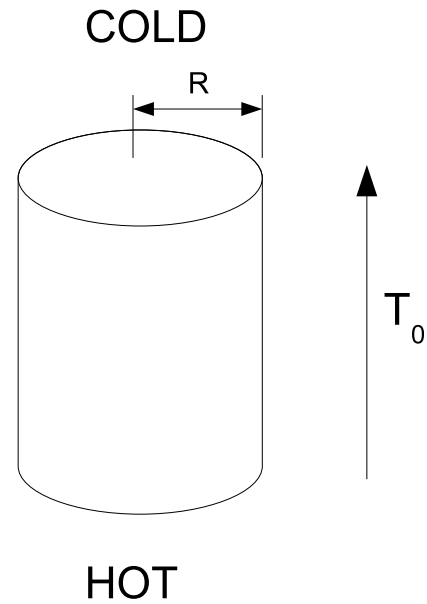


Figura 2: Cilindre infinit vertical de radi  $R$  sotmès a un gradient vertical de temperatura

Si se suposa que les parets del cilindre són perfectament conductores i rígides, s'han d'afegir a aquestes equacions les condicions de contorn  $T|_{r=R} = 0$  i  $v|_{r=R} = 0$ .

En el sistema de dues equacions (10)-(11), les incògnites  $v, T$  depenen dels paràmetres  $\beta, g, \kappa, \nu, A$  i  $R$ . Amb aquests paràmetres es pot definir un nombre adimensional anomenat nombre de Rayleigh

$$Ra = \frac{\beta g R^4 A}{\nu \kappa}. \quad (12)$$

Com ja s'ha comentat, aquest sistema es pot resoldre exactament, per fer-ho n'hi ha prou d'aplicar el laplací ( $\Delta$ ) a l'equació (10) i utilitzar (11), per obtenir l'equació de 4t grau

$$\Delta^2 v = \frac{Ra}{R^4} v. \quad (13)$$

Quan la solució general d'aquesta equació és forçada a satisfer les condicions de contorn, els valors permesos de  $Ra$  es discretitzen. El valor mínim permès és el Rayleigh crític ( $Ra_c$ ). Si es considera un sistema d'unitats en què el radi del cilindre sigui 1, la solució és

$$v(r) = v_0 J_1(\sqrt[4]{Ra_c} r) \quad (14)$$

on  $Ra_c = 215,560262$ , que és aproximadament el valor de la quarta potència de la primera arrel no nul·la de la funció de Bessel  $J_1(r)$ .

Per aplicar els mètodes espectrals i pseudoespectrals, usarem els polinomis de Txebixev,  $T_n(x)$ , per construir les funcions de base,

$$\phi_n(r) := T_n(2r - 1) - T_{n-2}(2r - 1) \quad (15)$$

que estan definides entre  $[0,1]$  i que s'anul·len als extrems d'aquest interval ja que les condicions de contorn impliquen que tant la velocitat ( $v$ ) com la desviació de la temperatura ( $T$ ) s'anul·len en  $r = 1$ . La condició a  $r = 0$  ve determinada pel fet de suposar que la velocitat a l'origen és finita i alhora impedir que l'equació (10) escrita en coordenades cilíndriques tingui termes divergents. Així, les solucions aproximades són

$$T_N(r) = \sum_{n=2}^{N+1} a_n \phi_n(r) \quad (16)$$

$$v_N(r) = \sum_{n=2}^{N+1} b_n \phi_n(r) \quad (17)$$

Aquestes funcions se substitueixen a les equacions (10)-(11) i s'obtenen dues equacions residu amb  $2N$  incògnites.

Aplicar el mètode espectral per resoldre el problema és multiplicar cada un d'aquests residus per  $N$  funcions test, tal com s'indica a (5). En particular s'han triat com a funcions test les funcions de base, és a dir,  $\varphi_k = \phi_k$  i la funció pes és

$$\omega(r) = \frac{1}{\sqrt{1 - (2r - 1)^2}}. \quad (18)$$

D'aquesta manera, les equacions residu esdevenen un sistema algebraic de  $2N$  equacions amb  $2N$  incògnites, i el paràmetre  $Ra$ .

Resoldre el sistema és equivalent a trobar els corresponents vectors propis;  $Ra$  n'és el valor propi. Per resoldre un problema de valors i vectors propis hi ha un munt d'algoritmes, aquí, tots els resultats que es mostren s'han obtingut amb la instrucció Eigvals del programari comercial Maple, al qual a més s'ha imposat que treballi amb 50 dígits de precisió en totes les operacions.

En la taula 1 es poden observar els valors per al número de Rayleigh crític obtinguts amb aquest mètode en funció de  $N$ ; s'hi mostren, a més, els errors comesos i el temps emprat pel nostre algoritme per trobar-los.

En la figura 3 es pot veure la diferència entre la velocitat trobada amb el mètode espectral amb  $N = 7$  i

N	$Ra_c$ espectral	Error (%)	Temps (s)
4	215,533568774	0,0124	1,952
6	215,561782427	0,000705	5,517
7	215,560214104	0,0000222	10,701
8	215,560251388	0,00000489	12,407
12	215,560261936	$1,01 \cdot 10^{-10}$	42,826
16	215,560261936	$7,87 \cdot 10^{-16}$	104,219
20	215,560261936	$2,76 \cdot 10^{-21}$	224,873

Taula 1: La taula mostra el Rayleigh crític per al problema d'Ostroumov obtingut utilitzant el mètode de Galerkin, l'error relatiu comesos i el temps emprat per l'algoritme

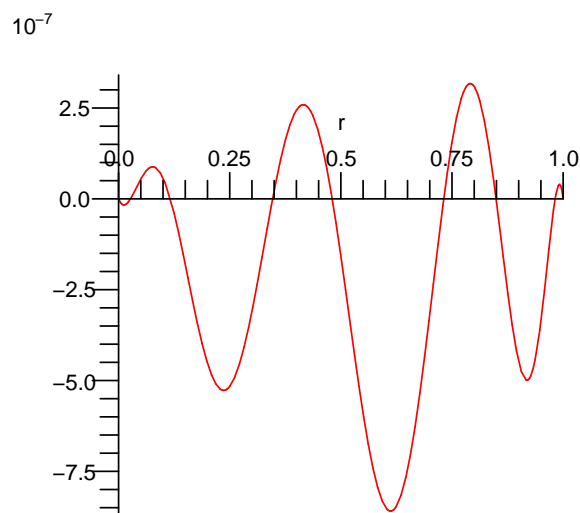


Figura 3: Diferència entre la solució  $v_N(r)$  espectral amb  $N = 7$  i la solució exacta

la solució exacta (14). Com que ambdues solucions estan definides excepte un factor multiplicador, per poder comparar-les s'han de normalitzar. Aquí, el criteri que s'ha establert a aquest efecte ha estat que el màxim de la funció valgui 1.

Finalment, i també per a solucions aproximades amb  $N = 7$ , en la figura 4 es mostra el residu corresponent a l'equació de la temperatura (11).

De la mateixa manera que s'ha fet per al cas espectral, per aplicar el mètode de col·locació s'han de substituir les expressions (16) a (10) i a (11), però en aquest cas les equacions s'avaluen en un conjunt de  $N$  punts.

Els punts de col·locació escollits acostumen a ser les  $N$  arrels del polinomi  $T_N(x)$ , però com que en aquest cas els polinomis s'han definit a l'interval  $[0,1]$ , els punts són

$$x_i = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \frac{(2i - 1)\pi}{2N} \quad i = 1 \dots N \quad (19)$$

Com ja s'ha comentat, el resultat d'aquestes substitucions és un conjunt de  $2N$  equacions amb  $2N$  incògnites i el paràmetre  $Ra$ . Usant Maple per implementar l'algoritme, s'obtenen els resultats que es mostren en la taula 2.

En la figura 6 es mostra la diferència entre la velocitat obtinguda amb  $N = 16$  i l'exacta, i en la figura 5 es pot observar el corresponent residu de l'equació de la velocitat. Com era d'esperar, la funció residu talla 16 vegades l'eix de les abscisses.

És remarcable que l'error comès pel mètode espectral i el pseudoespectral és, per a  $N = 16$ , del mateix ordre de

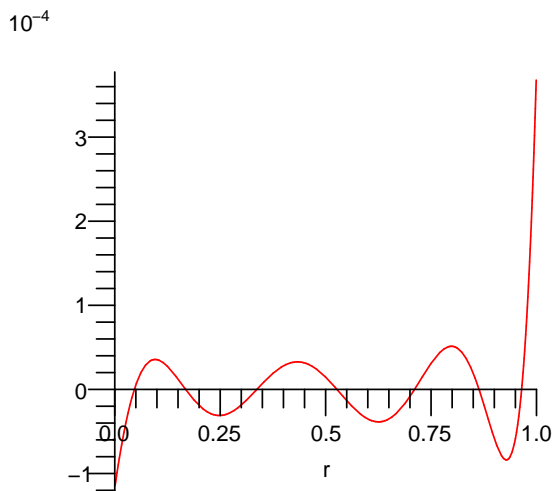


Figura 4: Gràfic del residu de l'equació (11) obtingut per a la solució aproximada pel mètode espectral amb  $N = 7$

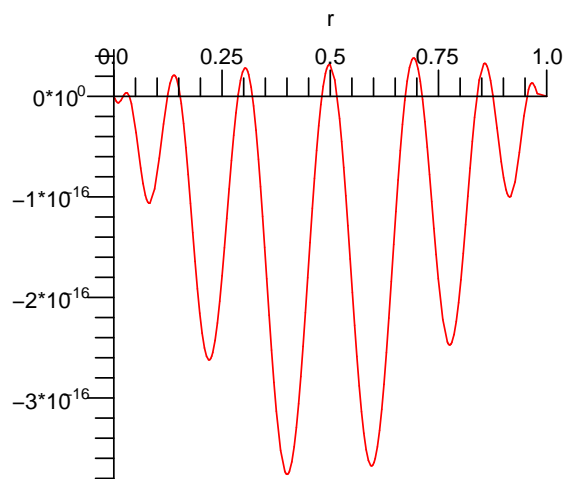


Figura 6: Gràfic del residu de l'equació (10) obtingut per a la solució aproximada pel mètode pseudoespectral amb  $N = 16$

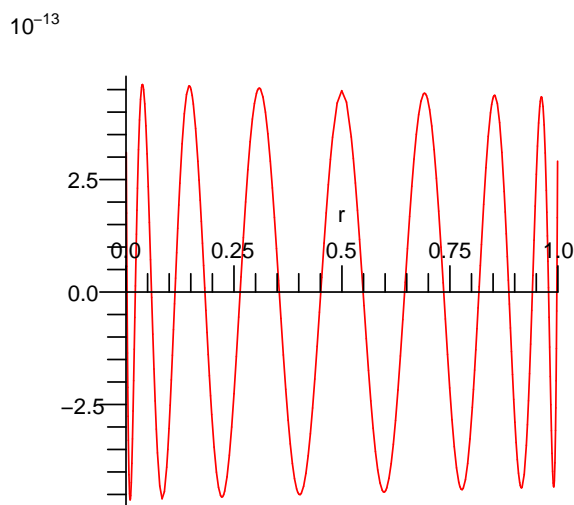


Figura 5: Diferència entre la solució  $v_N(r)$  pel mètode pseudoespectral amb  $N = 16$  i la solució exacta

magnitud, en canvi, el temps de càlcul és molt inferior amb el mètode pseudoespectral. Aquestes diferències es poden apreciar en la figura 7 i són degudes al fet que en l'aplicació proposada del mètode espectral, per trobar la matriu a diagonalitzar s'han calculat  $2N$  integrals definides,  $N$

per a cada funció residu, que s'han resolt analíticament, de manera exacta, fent ús del programari comercial Maple, mentre que amb el mètode de col·locació n'hi ha prou d'avaluar dues funcions en  $N$  punts.

Finalment, la figura 8 mostra, amb una escala logarítmica, l'error comès amb cada un dels mètodes en funció de  $N$ . El gràfic posa de manifest amb claredat a què es refereix el terme *convergència espectral* esmentat a la introducció.

Per tenir una visió més general del potencial d'aquests mètodes és interessant comentar que, usant la instrucció `bvp4c` de Matlab, basada en tècniques numèriques tradicionals, ha estat necessari dividir la regió de definició amb 44 punts per aconseguir un primer resultat acceptable. El resultat obtingut ha estat  $Ra_c = 215,1$ , que suposa un

N	$Ra_c$ Col·locació	Error (%)	Temps (s)
4	217,893	1,08	0,047
6	215,5617	0,000712	0,204
8	215,560273	0,00000552	0,406
12	215,560261936323	$6,28 \cdot 10^{-11}$	1,234
16	215,560261936187887	$3,47 \cdot 10^{-16}$	2,844
20	215,560261936187887	$9,45 \cdot 10^{-22}$	5,469
25	215,560261936187887	$1,83 \cdot 10^{-29}$	10,656

Taula 2: La taula mostra el Rayleigh crític per al problema d'Ostroumov obtingut utilitzant el mètode pseudoespectral, l'error relatiu comès i el temps emprat per l'algoritme

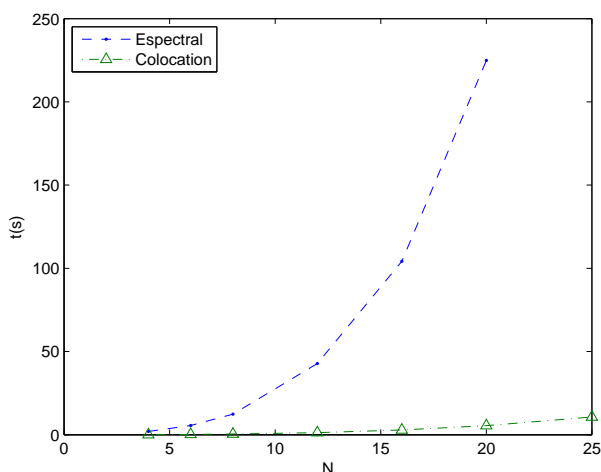


Figura 7: Gràfic del temps d'execució dels algoritmes en funció del nombre d'incògnites per a cada una de les variables i del mètode utilitzat

error del 0,212 %.

## 4 Conclusions

En aquest article s'han exposat les bases dels mètodes espectrals i pseudoespectrals emprats per a la resolució d'equacions diferencials.

A fi d'il·lustrar la potència d'aquests mètodes s'ha optat per aplicar-los a la resolució d'un problema clàssic de la mecànica de fluids, com és el de la determinació de l'inici de la convecció lliure, en particular s'ha triat el problema d'Ostroumov, ja que és una idealització prou senzilla perquè es pugui trobar la solució exacta al problema, i per tant el fan adient per discutir les bondats dels mètodes numèrics emprats per resoldre'l.

En general es pot dir que aquests mètodes tenen un grau de convergència espectacular, les figures 3, 5 i 8 en donen fe, però dels resultats mostrats en les taules 1 i 2 se'n poden desprendre altres conclusions que són generalitzables.

D'una banda, que quan s'usen els mètodes espectrals, com el de Galerkin, amb un nombre d'incògnites molt baix els resultats obtinguts són prou bons, en general millors que els que es trobarien amb mètodes pseudoespectrals i en qualsevol cas molt millors que els que es trobarien amb mètodes tradicionals, ara bé, els algoritmes d'implementació d'aquestes tècniques són més lents que els dels mètodes alternatius, això ens du a la segona conclusió: els algoritmes d'implementació usats en aquest text pels mètodes pseudoespectrals són més ràpids que els usats pels mètodes espectrals, això fa que amb el mateix consum de CPU es puguin buscar solucions aproximades amb més graus de llibertat, cosa que implica una millor aproximació. Aquesta conclusió és generalitzable en el sentit que

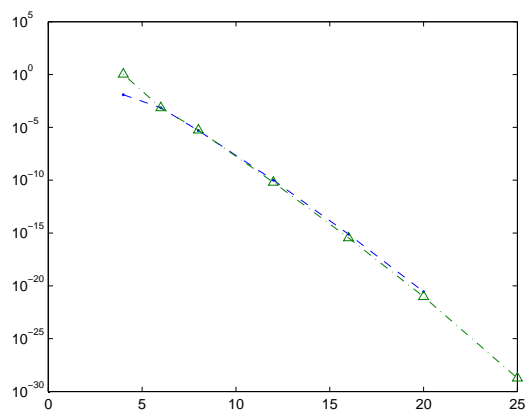


Figura 8: Gràfic de l'error comès en l'avaluació del Rayleigh crític en funció del nombre d'incògnites per a cada una de les variables i del mètode utilitzat

normalment els algoritmes d'implementació dels mètodes pseudoespectrals són més eficients, tot i que sovint al mateix temps impliquen una major dificultat a l'hora d'introduir les condicions de contorn que han de satisfer les solucions.

En aquest sentit, s'ha d'afegir que els resultats mostrats corresponents als mètodes pseudoespectrals s'han obtingut sense emprar tècniques de transformació, ni mètodes de derivació matricial (MDM), que és el que s'acostuma a fer en el món de la investigació. Aquestes tècniques redueixen el temps de consum de CPU sense que això impliqui una pèrdua de precisió en els resultats. La reducció s'assoleix a l'hora de calcular les derivades de les funcions de base i avaluar-les en els punts de col·locació.

Com que aquí les funcions de base escollides s'han construït amb polinomis de Tchebixev, aquestes tècniques es poden utilitzar. Per fer-se una idea del que això suposa, només cal indicar que per assolir una solució amb un error de l'ordre de  $10^{-16}$  amb MDM s'han necessitat 0,001175 s, cosa que implica una notable millora respecte als 2,844 s mostrats en la taula 2 o els 104,219 s de la taula 1.

## Bibliografia

- BOYD, J.P. *Chebyshev and Fourier Spectral Methods*. Dover Publications, Inc., 2000.
- CANUTO, C.; HUSSAINI, M. Y.; QUARTERONI, A.; ZANG, T.A. *Spectral Methods: Fundamentals in Single Domains Series*. Springer, 2006.
- GOTTLIEB, D.; ORZAG, S.A. *Numerical Analysis of Spectral Methods: Theory and Applications*. Siam, 1977.

LANDAU, L.D.; LIFSHITZ, E.M. *Física Teórica, Mecánica de Fluidos*. Editorial Reverté, 1986.

LEE, N.Y.; SCHULTZ, W.W.; BOYD, J.P. "Stability of fluid in a rectangular enclosure by spectral method". *International Journal of Heat and Mass Transfer*. Vol. 32 (1989), p. 513–520.

OSTROUMOV, G.A. *Free Convection Under the Conditions of the Internal Problem*. Moscow: NACA Tech. Mem.1407, 1958.

PLATTEN, J.K.; MARCOUX, M.; MOJTABI, A. "The Rayleigh–Benard problem in extremely confined geometries with and without the Soret effect". *Comptes rendus-Mécanique*. Vol. 335 (2007), p. 638–654.

TREFETHEN, L.N. *Spectral Methods in MATLAB*. Society for Industrial & Applied Mathematics, 2000.