4.6.3 Ableitungsoperatoren für Chebyshev-Kollokation

Vollständige Berechnung der Ableitungen im Ortsraum

In (4.146) hatten wir die räumliche Ableitung ausgedrückt durch eine lineare Transformation (Matrixmultiplikation) der spektralen Komponenten $\hat{u}_k$ (Chebyshev-Amplituden). Da auch die Transformation von $\boldsymbol{u}$ in den spektralen Raum ($\hat{\boldsymbol{u}}$) einer Matrixmultiplikation entspricht, kann man die Ableitung vollständig im Ortraum als Matrixmultiplikation schreiben. Mit (4.146) und (4.145) erhalten wir

$$\boldsymbol{u}^{(1)} \overset{(4.146)}{=} \mathsf{D}^{(1)} \cdot \hat{\boldsymbol{u}} \overset{(4.145)}{=} \underbrace{\mathsf{D}^{(1)} \cdot \mathsf{T}^{-1}}_{\mathcal{D}} \cdot \boldsymbol{u}. \tag{4.150}$$

Damit ist

$$\boldsymbol{u}^{(1)} = \mathcal{D} \cdot \boldsymbol{u}. \tag{4.151}$$

Nach einigen algebraischen Umformungen (siehe Peyret (2002)) erhält man dann den Ableitungsoperator für den Ortsraum (und für die Gauß-Lobatto-Punkte)

$$\mathcal{D} = \begin{cases} \mathcal{D}_{i,j} &= \dfrac{\bar{c}_i}{\bar{c}_j} \dfrac{(-1)^{i+j}}{x_i - x_j}, & \text{falls } 0 \leq i, j \leq N, i \neq j, \\ \mathcal{D}_{i,i} &= -\dfrac{x_i}{2\left(1 - x_i^2\right)}, & \text{falls } 1 \leq i \leq N-1, \\ \mathcal{D}_{0,0} &= \dfrac{2N^2+1}{6} = -\mathcal{D}_{N,N}. \end{cases} \tag{4.152}$$

Die zweite Ableitung ergibt sich dementsprechend als

$$\boldsymbol{u}^{(2)} = \mathcal{D} \cdot (\mathcal{D} \cdot \boldsymbol{u}) = \mathcal{D}^2 \cdot \boldsymbol{u}. \tag{4.153}$$

Die Matrizen sind in Canuto et al. (1988) und Peyret (2002) angegeben. Ganz analog kann man die lineare Operation der Ableitung auch vollständig in spektralen Raum formulieren (siehe Anhang C). Bei einem festen Gitter braucht die Matrix $\mathcal{D}$ nur einmal zu Beginn der Rechnung ermittelt werden.

Als Beispiel ist in Abb. 4.17 die Approximation der ersten Ableitung mittels Matrix-Multiplikation mit $\mathcal{D}$ entsprechend (4.152) dargestellt. Für $N = 8$ ist die Ableitung sehr fehlerhaft. Für $N = 16$ ergibt sich für das verwendete Beispiel schon eine sehr genau Darstellung der ersten Ableitung.

Rekursive Berechnung der Ableitungen

Der numerische Aufwand zur Berechnung von Ableitungen hängt davon ab, ob die Ableitungen im Orts- oder im spektralen Raum durchgeführt werden. Die direkte Berechnung der ersten bzw. zweiten Ableitung im Ortsraum an allen $N+1$ Kollokationspunkten nach (4.146) für gegebene Amplituden kostet $O[(N+1)^2]$ Operationen. Die Ableitungsmatrizen sind voll besetzt. Dies gilt für die Fourier- wie auch die Chebyshev-Methode. Wenn die Ableitungen für die Fourier-Methode aber

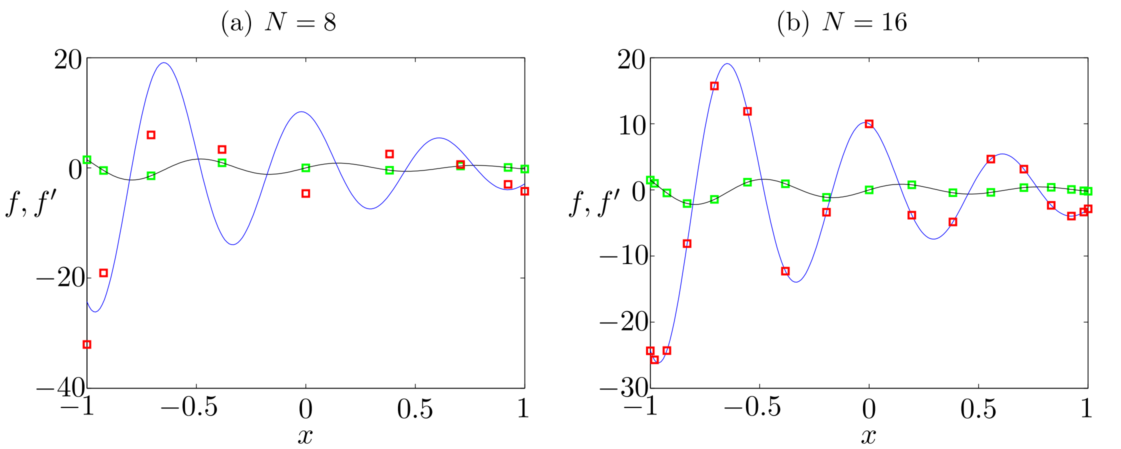

Abbildung 4.17: Kollokationsableitung von $f(x) = \mathrm{e}^{-x}\sin(10x)$ mittels Matrix-Multiplikation nach (4.151) mit (4.152). Durchgezogene Kurven zeigen die exakte Funktion $f(x)$ (schwarz) und ihre erste Ableitung $f'(x)$ (blau). Die grünen Quadrate zeigen $\boldsymbol{f} = f_i = f(x_i)$ an den Gauß-Lobatto-Punkten (4.144) und die roten Quadrate zeigen die Chebshev-Ableitung $\boldsymbol{f}^{(1)} = \mathcal{D}\cdot\boldsymbol{f}$ für $N = 8$ (a) und $N = 16$ (b).

vollständig im Fourier-Raum durchgeführt werden, sind nur $O(N)$ Operationen nötig, denn die Ableitung im Fourier-Raum ist nur eine Multiplikation mit ik. Die zugehörige Ableitungsmatrix ist diagonal!

Für Chebyshev-Polynome sind die Ableitungsmatrizen in beiden Fällen voll und kosten im Prinzip $O[(N+1)^2]$ Operationen. Für $N \lesssim 100$ verwendet man deshalb auch meist (4.146). Für größere Werte von N lohnt es sich aber trotzdem, die Funktion u vor der Ableitung in den Chebyshev-Raum zu transformieren, dann abzuleiten und dann wieder in den Ortsraum zu transformieren. Es zeigt sich nämlich, daß die Ableitungsmatrix im Chebyshev-Raum eine obere Dreiecksmatrix ist. Aufgrund ihrer Struktur kann man die Koeffizienten der Ableitung über eine Rekursion berechnen, die nur $O(N)$ Operationen erfordert, dieselbe Anzahl wie beim Fourier-System. Wenn man daher die Ableitung im Ortsraum benötigt, verwendet man eine schnelle Transformation in den Chebyshev-Raum, bildet dort die Ableitung und transformiert zurück in den Ortsraum. Dies kostet dann nur $O(N+1) + 2\times O[(N+1)\ln(N+1)] = O[(N+1)\ln(N+1)]$ Operationen im Vergleich zu den Operationen $O[(N+1)^2]$ bei der Matrix-Multiplikation.

Zur Anwendung der Methode stellt man die Ableitungen als Summe über Chebyshev-Polynome dar

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \sum_{k=0}^{N-1} \hat{u}_k^{(1)} \mathrm{T}_k(x), \qquad \text{bzw.} \qquad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \sum_{k=0}^{N-2} \hat{u}_k^{(2)} \mathrm{T}_k(x). \tag{4.154}$$

Die Koeffizienten der ersten und der zweiten Ableitung $\hat{u}_k^{(1)}$ und $\hat{u}_k^{(2)}$ kann man dann