



Centrum voor Wiskunde en Informatica
Centre for Mathematics and Computer Science

T.P. de Vries

Plaatsdiscretisatie van hyperbolische differentiaalvergelijkingen
van de tweede orde met periodieke oplossingen

Afdeling Numerieke Wiskunde Notitie NM-N8604 September

*Spatial discretization of hyperbolic differential equations
of the second order with periodical solutions*

Wiskunde en Informatica
Centrum voor Wiskunde en Informatica
Amsterdam

The Centre for Mathematics and Computer Science is a research institute of the Stichting Mathematisch Centrum, which was founded on February 11, 1946, as a nonprofit institution aiming at the promotion of mathematics, computer science, and their applications. It is sponsored by the Dutch Government through the Netherlands Organization for the Advancement of Pure Research (Z.W.O.).

Plaatsdiscretisatie van Hyperbolische Differentiaalvergelijking van de Tweede Orde met Periodieke Oplossingen

T.P. de Vries

Centrum voor Wiskunde en Informatica, Kruislaan 413, 1098 SJ Amsterdam.

We onderzoeken het Cauchy-probleem voor hyperbolische differentiaalvergelijkingen van de tweede orde, waarvan de frequenties van de Fourier componenten in de oplossing zich bevinden in een bekend frequentie-interval;

Er worden differentie-formules ontwikkeld die zijn aangepast aan deze frequentie-intervallen.

1980 Mathematics Subject Classification: 65M20, 76B15.

1. EINDIGE DIFFERENTIES

We beschouwen de plaatsdiscretisatie door middel van eindige differenties van stelsels tweede orde hyperbolische partiële differentiaalvergelijkingen van de vorm

$$\frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = A \frac{\partial^2 w}{\partial x_1^2} + B \frac{\partial^2 w}{\partial x_2^2} + C \frac{\partial^2 w}{\partial x_1 \partial x_2} + g; \quad x := (x_1, x_2)^T \in \Omega \quad (1.1)$$

waarin A, B en C matrices met positieve reële eigenwaarden zijn en g een vectorfunctie. A, B, C en g mogen afhangen van (x, t, w) .

Verder bestaan de partiële afgeleiden $w_{x_1 x_2}$ en $w_{x_2 x_1}$ en zijn beide continue op Ω , zodat $w_{x_1 x_2} = w_{x_2 x_1}$. We zullen alleen symmetrische discretisaties bekijken op een uniform rooster met maaswijdten van Δx_1 en Δx_2 .

De discretisatie-gewichten worden genoteerd als $\xi_j^{(l)}$, $\eta_j^{(l)}$ en $\zeta_j^{(l)}$ en de schuif-operatoren E_1^m en E_2^m worden gedefinieerd door

$$E_n^m f(x) = f(x + m \Delta x_n), \quad m \in \mathbb{Z}, \quad n = 1, 2.$$

We zullen de plaatsafgeleiden $\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}$ en $\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}$ benaderen met de differentie-operatoren

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} &\sim D_1^{(2)} := \frac{1}{2\Delta^2 x_1} \sum_{l=0}^k \sum_{j=0}^k \xi_j^{(l)} (E_1^l + E_1^{-j})(E_2^l + E_2^{-l}), \\ \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} &\sim D_2^{(2)} := \frac{1}{2\Delta^2 x_2} \sum_{l=0}^k \sum_{j=0}^k \eta_j^{(l)} (E_2^l + E_2^{-j})(E_1^l + E_1^{-l}), \end{aligned} \quad (1.2)$$

en de plaatsafgeleide $\frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2}$ met

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} \sim D_{1,2}^{(2)} := \frac{1}{2\Delta x_1 \Delta x_2} \sum_{l=0}^k \sum_{j=0}^k \zeta_j^{(l)} (E_1^l - E_1^{-j})(E_2^l - E_2^{-l}). \quad (1.2')$$

Hierin bepalen de discretisatiegewichten $\xi_j^{(l)}$, $\eta_j^{(l)}$ en $\zeta_j^{(l)}$ de nauwkeurigheid van deze differentie-formules.

In de nu volgende afleidingen lopen de sommatie indices j, l van 0 tot en met k en zullen analoge afleidingen gelden voor formules die betrekking hebben op de x_2 -coëfficiënt.

Aangezien

$$\begin{aligned} E_1^j w(x_1, x_2) &= w(x_1 + j\Delta x_1, x_2) = \left(\sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} (j\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1})^i \right) w(x_1, x_2) \\ &= (e^{j\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}}) w(x) \end{aligned}$$

geldt:

$$\begin{aligned} D_1^{(2)} &= \frac{4}{2\Delta^2 x_1} \sum_{j,l} \xi_j^{(l)} \left\{ \frac{e^{j\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}} + e^{-j\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}}}{2} \right\} \left\{ \frac{e^{l\Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}} + e^{-l\Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}}}{2} \right\} \\ &= \frac{2}{\Delta^2 x_1} \sum_{j,l} \xi_j^{(l)} \cosh(j\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}) \cosh(l\Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}) \\ &= \Psi_1(\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}, \Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}) \frac{\partial^2}{\partial x_1^2}, \end{aligned} \quad (1.3a)$$

met

$$\Psi_1(u, v) := 2 \sum_{j,l} \xi_j^{(l)} \frac{\cosh(ju)}{u^2} \cosh(lv). \quad (1.3b)$$

Op dezelfde wijze vinden we

$$D_2^{(2)} = \Psi_2(\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}, \Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}) \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}, \quad (1.3a')$$

met

$$\Psi_2(u, v) := 2 \sum_{j,l} \eta_j^{(l)} \frac{\cosh(jv)}{v^2} \cosh(lu). \quad (1.3b')$$

De plaatsfout, ontstaan door de benadering van $\frac{\partial^2}{\partial x_n^2}$ door $D_n^{(2)}$ wordt gegeven door

$$[D_n^{(2)} - \frac{\partial^2}{\partial x_n^2}]w = [(\Psi_n(\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}, \Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}) - 1) \frac{\partial^2}{\partial x_n^2}]w, \quad n = 1, 2.$$

Het differentie-schema (1.2) is p -de orde nauwkeurig in de plaats als geldt:

$$\Psi_n(\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}, \Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}) = 1 + O(\Delta^p x_n), \quad n = 1, 2.$$

Voor consistentie moet gelden dat $p \geq 2$.

Wanneer wij aannemen dat $\Delta x_1 = e \Delta x_2, e = \text{constant}$ voorziet de nu volgende stelling ons van de condities voor tweede respectievelijk vierde orde nauwkeurige differentie-operatoren. (Een bewijs wordt gegeven in Appendix 1.).

STELLING 1.1. De differentie-operatoren (1.2) zijn tweede orde nauwkeurig als geldt:

$$\begin{aligned}\sum_{j,l} \xi_j^{(l)} &= 0(\Delta^4 x_1), \\ \sum_{j,l} j^2 \xi_j^{(l)} &= 1 + 0(\Delta^2 x_1), \\ \sum_{j,l} l^2 \xi_j^{(l)} &= 0(\Delta^2 x_1),\end{aligned}$$

en vierde orde nauwkeurig als geldt:

$$\begin{aligned}\sum_{j,l} \xi_j^{(l)} &= 0(\Delta^6 x_1), \quad \sum_{j,l} j^2 \xi_j^{(l)} = 1 + 0(\Delta^4 x_1), \\ \sum_{j,l} l^2 \xi_j^{(l)} &= 0(\Delta^4 x_1), \quad \sum_{j,l} j^4 \xi_j^{(l)} = 0(\Delta^2 x_1), \\ \sum_{j,l} j^2 l^2 \xi_j^{(l)} &= 0(\Delta^2 x_1), \quad \sum_{j,l} l^4 \xi_j^{(l)} = 0(\Delta^2 x_1).\end{aligned}$$

Analoge uitdrukkingen gelden voor de x_2 -richting.

VOORBEELD 1.1A. Voor $k=1$, $\xi_j^{(l)}=0$ voor $l \neq 0$ en tweede orde nauwkeurigheid moet dus gelden:

$$\begin{aligned}\xi_0^{(0)} + \xi_1^{(0)} &= 0(\Delta^4 x_1), \\ \xi_1^{(0)} &= 1 + 0(\Delta^2 x_1).\end{aligned}\tag{1.5}$$

Negeren we de termen $0(\Delta^2 x_1)$ en $0(\Delta^4 x_1)$ dan vinden we het bekende conventionele lijn-molekuul

$$\frac{1}{\Delta^2 x_1} [1, -2, 1].$$

VOORBEELD 1.1B. Voor $k=2$, $\xi_j^{(l)}=0$ voor $l \neq 0$ en vierde orde nauwkeurige differentie-operatoren moet gelden:

$$\begin{aligned}\xi_0^{(0)} + \xi_1^{(0)} + \xi_2^{(0)} &= 0(\Delta^6 x_1), \\ \xi_1^{(0)} + 4\xi_2^{(0)} &= 1 + 0(\Delta^4 x_1), \\ \xi_1^{(0)} + 16\xi_2^{(0)} &= 0(\Delta^2 x_1).\end{aligned}\tag{1.6}$$

Negeren we hier de termen $0(\Delta^2 x_1)$, $0(\Delta^4 x_1)$ en $0(\Delta^6 x_1)$, dan vinden we het conventionele lijn-molekuul

$$\frac{1}{\Delta^2 x_1} \left[-\frac{1}{12}, \frac{16}{12}, -\frac{30}{12}, \frac{16}{12}, -\frac{1}{12} \right].$$

Vervolgens behandelen we de differentie-operator $D_{1,2}^{(2)}$ (1.2'); hiervoor geldt:

$$\begin{aligned}
 D_{1,2}^{(2)} &= \frac{4}{2\Delta x_1 \Delta x_2} \sum_{j,l} \zeta_j^{(l)} \left\{ \frac{e^{j\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}} - e^{-j\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}}}{2} \right\} \left\{ \frac{e^{l\Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}} - e^{-l\Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}}}{2} \right\} \\
 &= \frac{2}{\Delta x_1 \Delta x_2} \sum_{j,l} \zeta_j^{(l)} \sinh(j\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}) \sinh(l\Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}) \\
 &= \Phi(\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}, \Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}) \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} \quad (1.7a)
 \end{aligned}$$

met

$$\Phi(u, v) := 2 \sum_{j,l} \zeta_j^{(l)} \frac{\sinh(ju)}{u} \frac{\sinh(lv)}{v} \quad (1.7b)$$

De plaatsfout, ontstaan door de nadering van $\frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2}$ door $D_{1,2}^{(2)}$ wordt gegeven door

$$[D_{1,2}^{(2)} - \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2}]w = [\Phi(\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}, \Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}) - 1] \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} w$$

zodat differentie-schema (1.2') p -de orde nauwkeurig is, als geldt:

$$\Phi(\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}, \Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}) = 1 + O(\Delta^p x_1).$$

waarbij $\Delta x_1 = e\Delta x_2$, $e = \text{constant}$.

Voor tweede en vierde orde nauwkeurige differentie-schema's worden de orde-condities gegeven in stelling 1.2; een bewijs van deze stelling is in Appendix 2. opgenomen.

STELLING 1.2. De differentie-operator $D_{1,2}^{(2)}$ (1.2') is tweede-orde nauwkeurig als geldt:

$$\sum_{j,l} 2jl \zeta_j^{(l)} = 1 + O(\Delta^2 x_1),$$

en vierde-orde nauwkeurig als geldt;

$$\sum_{j,l} 2jl^3 \zeta_j^{(l)} = 1 + O(\Delta^4 x_1),$$

$$\sum_{j,l} j l^3 \zeta_j^{(l)} = O(\Delta^2 x_1),$$

$$\sum_{j,l} j^3 l \zeta_j^{(l)} = O(\Delta^2 x_1).$$

Wij merken hierbij op dat sommatie-indices j en l hier lopen van 1 tot en met k en dat $\zeta_j^{(l)} = 0$ voor $j=0$ en/of $l=0$.

VOORBEELD 1.2A. Voor $k=1$ en tweede-orde nauwkeurigheid moet dus gelden

$$2\xi_1^{(1)} = 1 + 0(\Delta^2 x_1). \quad (1.8)$$

Negeren we de term $0(\Delta^2 x_1)$ vinden we het molekuul

$$\frac{1}{2\Delta x_1 \Delta x_2} \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

VOORBEELD 1.2B. Voor $k=2$ en vierde-orde nauwkeurigheid moet gelden

$$\begin{aligned} 2\xi_1^{(1)} + 4\xi_2^{(1)} + 4\xi_1^{(2)} + 8\xi_2^{(2)} &= 1 + 0(\Delta^4 x_1), \\ \xi_1^{(1)} + 2\xi_2^{(1)} + 8\xi_1^{(2)} + 16\xi_2^{(2)} &= 0(\Delta^2 x_1), \\ \xi_1^{(1)} + 8\xi_2^{(1)} + 2\xi_1^{(2)} + 16\xi_2^{(2)} &= 0(\Delta^2 x_1). \end{aligned} \quad (1.9)$$

Negeren we de termen $0(\Delta^4 x_1)$ en $0(\Delta^2 x_1)$ dan is een voorbeeld van een molekuul

$$\frac{1}{2\Delta x_1 \Delta x_2} \begin{bmatrix} -\frac{1}{24} & \frac{1}{6} & 0 & -\frac{1}{6} & \frac{1}{24} \\ \frac{1}{6} & -1 & 0 & 1 & -\frac{1}{6} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{6} & 1 & 0 & -1 & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{24} & -\frac{1}{6} & 0 & \frac{1}{6} & -\frac{1}{24} \end{bmatrix}.$$

2. DE AFBREEKFOUT

Zij $W(t, x)$ een roosterfunctie die voldoet aan

$$L(W) := \frac{\partial^2 W}{\partial t^2} - AD_1^{(2)}W - BD_2^{(2)}W - CD_{1,2}^{(2)}W - g = 0, \quad (2.1)$$

$$x \in \Omega_\Delta := \{x | x = (s\Delta x_1, t\Delta x_2), s, t = \pm 1, \pm 2, \dots\}.$$

Hierin zijn A, B, C en g functies van (t, x, W) .

Wij nemen vervolgens aan dat bij de tijdsintegratie van de gewone differentiaalvergelijking (2.1) een verwaarloosbare kleine fout zal worden gemaakt. Dit is te bereiken door gebruik te maken van een hogere orde *ODE*-integrator, of van een "gewone" tijdsintegrator met kleine tijdstappen; echter, het eerste is uit praktisch oogpunt te verkiezen.

Voor de exacte oplossing van (1.1) geldt:

$$g(t, x, w) = \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - A \frac{\partial^2 w}{\partial x_1^2} - B \frac{\partial^2 w}{\partial x_2^2} - C \frac{\partial^2 w}{\partial x_1 \partial x_2}.$$

De partiële differentiaalvergelijking (1.1) wordt echter opgelost met behulp van de differentie-operatoren $D_1^{(2)}$, $D_2^{(2)}$ en $D_{1,2}^{(2)}$ zodat geldt:

$$L(w) = \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - A(t, x, w)D_1^{(2)}w - B(t, x, w)D_2^{(2)}w - C(t, x, w)D_{1,2}^{(2)}w - g(t, x, w):$$

$$x \in \Omega_\Delta.$$

De afbreekfout gemaakt bij de plaatsdiscretisatie wordt nu dus gegeven door:

$$\begin{aligned} L(w) = & A(t, x, w) \left[\frac{\partial^2 w}{\partial x_1^2} - D_1^{(2)}w \right] + B(t, x, w) \left[\frac{\partial^2 w}{\partial x_2^2} - D_2^{(2)}w \right] \\ & + C(t, x, w) \left[\frac{\partial^2 w}{\partial x_1 \partial x_2} - D_{1,2}^{(2)}w \right] : x \in \Omega_\Delta. \end{aligned} \quad (2.2)$$

We veronderstellen dat de exacte oplossing van (1.1) de dominante term

$$w_0 := \sum_{r=1}^R w_0^{(r)}(t) \exp(i f^{(r)} \cdot x), \quad f^{(r)} := (f_1^{(r)}, f_2^{(r)})^T \quad (2.3)$$

bevat.

Laten $\delta_1^{(r)}$, $\delta_2^{(r)}$ en $\delta_{1,2}^{(r)}$ de eigenwaarden zijn van respectievelijk $D_1^{(2)}$, $D_2^{(2)}$ en $D_{1,2}^{(2)}$ met de eigenfunctie $e^{i f^{(r)} \cdot x}$. Met behulp van (1.3) volgt dan:

$$\begin{aligned} D_1^{(2)} e^{i f^{(r)} \cdot x} &= -f_1^{(r)^2} \cdot \Psi_1(\Delta x_1 i f_1^{(r)}, \Delta x_2 i f_2^{(r)}) e^{i f^{(r)} \cdot x}, \\ D_2^{(2)} e^{i f^{(r)} \cdot x} &= -f_2^{(r)^2} \cdot \Psi_2(\Delta x_1 i f_1^{(r)}, \Delta x_2 i f_2^{(r)}) e^{i f^{(r)} \cdot x}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

En aangezien $\cosh(ix) = \cos(x)$ geldt:

$$\begin{aligned} \delta_1^{(r)} &= \frac{2}{\Delta^2 x_1} \sum_{j,l} \xi_j^{(l)} \cos(j \Delta x_1 f_1^{(r)}) \cos(l \Delta x_2 f_2^{(r)}), \\ \delta_2^{(r)} &= \frac{2}{\Delta^2 x_2} \sum_{j,l} \eta_j^{(l)} \cos(j \Delta x_2 f_2^{(r)}) \cos(l \Delta x_1 f_1^{(r)}). \end{aligned} \quad (2.5)$$

Met behulp van (1.7) en $\sinh(iz) = i \sin(z)$ vinden we:

$$D_{1,2}^{(2)} e^{i f^{(r)} \cdot x} = -f_1^{(r)} f_2^{(r)} \cdot \Phi(\Delta x_1 i f_1^{(r)}, \Delta x_2 i f_2^{(r)}) e^{i f^{(r)} \cdot x} \quad (2.6)$$

en

$$\delta_{1,2}^{(2)} = \frac{-2}{\Delta x_1 \Delta x_2} \sum_{j,l} \xi_j^{(l)} \sin(j \Delta x_1 f_1^{(r)}) \sin(l \Delta x_2 f_2^{(r)}) . \quad (2.7)$$

De afbreekfout, gegeven in (2.2) wordt, als w_0 de dominerende term in de exacte oplossing van (1.1) is, benaderd door:

$$\begin{aligned} L(w_0) &\approx - \sum_{r=1}^R \phi^{(r)}(t, x, w_0) w_0^{(r)}(t) e^{i f^{(r)} \cdot x}, \quad x \in \Omega_\Delta, \\ \phi^{(r)}(t, x, w_0) &:= A(t, x, w_0)(f_1^{(r)^2} + \delta_1^{(r)}) + B(t, x, w_0)(f_2^{(r)^2} + \delta_2^{(r)}) \\ &\quad + C(t, x, w_0)(f_1^{(r)} f_2^{(r)} + \delta_{1,2}^{(r)}) . \end{aligned} \quad (2.8)$$

We kunnen $\phi^{(r)}$ met behulp van (2.5) en (2.7) schrijven als:

$$\begin{aligned} \phi^{(r)} &= A \frac{1}{\Delta^2 x_1} \alpha(\mu_1^{(r)}, \mu_2^{(r)}) + B \frac{1}{\Delta^2 x_2} \beta(\mu_2^{(r)}, \mu_1^{(r)}) \\ &\quad + C \frac{1}{\Delta x_1 \Delta x_2} \gamma(\mu_1^{(r)}, \mu_2^{(r)}) , \end{aligned} \quad (2.9)$$

met

$$\begin{aligned} \mu^{(r)} &:= (\mu_1^{(r)}, \mu_2^{(r)})^T := (f_1^{(r)} \Delta x_1, f_2^{(r)} \Delta x_2)^T, \\ \alpha(\mu) &:= \mu_1^2 + 2 \sum_{j,l} \xi_j^{(l)} \cos(j \mu_1) \cos(l \mu_2) = \mu_1^2 - \mu_1^2 \Psi_1(i \mu_1, i \mu_2), \\ \beta(\mu) &:= \mu_2^2 + 2 \sum_{j,l} \eta_j^{(l)} \cos(j \mu_2) \cos(l \mu_1) = \mu_2^2 - \mu_2^2 \Psi_2(i \mu_2, i \mu_1), \\ \gamma(\mu) &:= \mu_1 \mu_2 - 2 \sum_{j,l} \xi_j^{(l)} \sin(j \mu_1) \sin(l \mu_2) = \mu_1 \mu_2 - \mu_1 \mu_2 \Phi(i \mu_1, i \mu_2) . \end{aligned} \quad (2.10)$$

Uit (2.8) blijkt dat de afbreekfout verkleind kan worden door de waarden van $\phi^{(r)}, r=1, \dots, R$ te minimaliseren.

Als de dominante frequenties nauwkeurig genoeg bekend zijn is dit te bereiken door de nulpunten van α, β of γ te kiezen in de punten die corresponderen met die frequenties.

Zijn echter slechts intervallen van dominante frequenties bekend - dit zijn intervallen $[\underline{f}_n, \bar{f}_n]$, $n=1, 2$, waarvoor geldt:

$$\underline{f}_n \leq f_n^{(r)} \leq \bar{f}_n : r=1, \dots, R, \quad n=1, 2$$

- dan kunnen de drie functies α, β of γ geminimaliseerd worden op die intervallen.

In de volgende secties zullen we verder ingaan op methoden om α, β of γ te minimaliseren.

3. LIJN-DISCRETISATIES

In deze sectie bestuderen we de differentie-operatoren $D_1^{(2)}$ en $D_2^{(2)}$ (1.2) met $\xi_j^{(l)} = \eta_j^{(l)} = 0$ voor $l \neq 0$ zodat $D_1^{(2)}$ en $D_2^{(2)}$ lijn-molekullen voorstellen.

De functie α uit (2.10) neemt nu de vorm

$$\alpha(\mu) = \bar{\alpha}(\mu_1) := \mu_1^2 + 2 \sum_{j=0}^k \xi_j \cos(j\mu_1) \quad (3.1)$$

aan, waarvan de index l is weggelaten.

Eenzelfde uitdrukking geldt voor de functie β .

Aangezien er $k+1$ vrije parameters in (3.1) zijn, zoeken we $k+1$ uitdrukkingen om deze parameters zo gunstig mogelijk te bepalen.

In het speciale geval dat we weten dat de oplossing wordt gedomineerd door $k+1$ frequenties, zeg $f^{(p)}$; $p=1, \dots, k+1$, eisen we dat voor de punten

$$z_p = \Delta x_1 f^{(p)}, \quad p = 1, \dots, k+1 \quad (3.2)$$

geldt

$$\bar{\alpha}(z_p) = 0, \quad p = 1, \dots, k+1. \quad (3.3)$$

In het algemene geval dat de dominante frequenties zich bevinden in het frequentie-interval

$$\underline{f}_1 \leq f^{(r)} \leq \bar{f}_1, \quad r = 1, \dots, R;$$

willen we

$$\max_{\mu_1 \leq z \leq \bar{\mu}_1} |\bar{\alpha}(z)| \quad ; \quad \underline{\mu}_1 := \underline{f}_1 \Delta x_1, \quad \bar{\mu}_1 := \bar{f}_1 \Delta x_1, \quad (3.4)$$

minimaliseren.

We nemen aan dat op het interval $[\underline{\mu}_1, \bar{\mu}_1]$ de even-functie $\bar{\alpha}(z)$ voldoende nauwkeurig door een polynoom van de graad $k+1$ voorgesteld kan worden (en aangezien $\bar{\alpha}(z)$ een even-functie is zal het een polynoom in z^2 zijn).

Het minimax-probleem (3.4) wordt nu bij benadering opgelost door $\bar{\alpha}(z)$ te identificeren met een naar $[\underline{\mu}_1^2, \bar{\mu}_1^2]$ getransformeerd Chebyshevpolynoom van de graad $k+1$

$$S_{2(k+1)}(z) := \cos[(k+1) \cdot \arccos \{(2z^2 - (\underline{\mu}_1^2 + \bar{\mu}_1^2))/(\bar{\mu}_1^2 - \underline{\mu}_1^2)\}]. \quad (3.5)$$

Maar dan kunnen we de nulpunten $z_p, p=1, \dots, k+1$, van $\bar{\alpha}(z)$ identificeren met die van zo'n Chebyshev-polynoom.

We verkrijgen nu de $k+1$ nulpunten

$$\begin{aligned} z_p &:= \frac{1}{\sqrt{2}} [(\underline{\mu}_1^2 + \bar{\mu}_1^2) + (\bar{\mu}_1^2 - \underline{\mu}_1^2) \cos(\frac{2p-1}{2(k+1)}\pi)]^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{\Delta x_1}{\sqrt{2}} [(\underline{f}_1^2 + \bar{f}_1^2) + (\bar{f}_1^2 - \underline{f}_1^2) \cos(\frac{2p-1}{2(k+1)}\pi)]^{\frac{1}{2}}, \quad p = 1, \dots, k+1, \end{aligned} \quad (3.6)$$

van $\bar{\alpha}(z)$, zodat voor deze punten (3.3) geldt.

De discretisatie-gewichten zijn te bepalen door het stelsel dat door (3.3) beschreven wordt op te lossen.

VOORBEELD 3.1: We bekijken de driepunts-lijn molekulen, zodat $k=1$. Het stelsel (3.3) wordt dan opgelost door

$$\begin{aligned}\xi_1 &= \frac{-(z_1^2 - z_2^2)}{2(\cos z_1 - \cos z_2)}, \\ \xi_0 &= -\frac{z_1^2}{2} - \xi_1 \cos z_1 = \frac{z_1^2 \cos z_2 - z_2^2 \cos z_1}{2(\cos z_1 - \cos z_2)},\end{aligned}\quad (3.7)$$

met z_1 en z_2 gedefinieerd door (3.2) of (3.6).

We verkrijgen benaderingen van de discretisatie-gewichten voor kleine waarden van de maaswijdte door (3.7) te ontwikkelen in machtreksen.

$$\begin{aligned}\xi_1 &= 1 + \frac{1}{12}(\bar{f}_1^2 + \underline{f}_1^2)\Delta^2 x_1 \\ &\quad + \frac{1}{2880}\{14(\bar{f}_1^2 + \underline{f}_1^2)^2 - (\bar{f}_1^2 - \underline{f}_1^2)^2\}\Delta^4 x_1 + 0(\Delta^6 x_1), \\ \xi_0 &= -\xi_1 + \frac{1}{192}\{2(\bar{f}_1^2 + \underline{f}_1^2)^2 - (\bar{f}_1^2 - \underline{f}_1^2)^2\}\Delta^4 x_1 + 0(\Delta^6 x_1).\end{aligned}\quad (3.8)$$

Deze uitdrukkingen voldoen dus aan de orde-condities (1.5) voor tweede orde nauwkeurigheid.

Vervolgens bestuderen we het verloop van de machtreeksontwikkeling van $\bar{\alpha}(\mu_1)$ in het interval van de dominante frequenties.

Met behulp van (3.8) vinden we

$$\bar{\alpha}(\mu_1) = \frac{1}{96}\{2(\bar{\mu}_1^2 + \underline{\mu}_1^2)^2 + 8\mu_1^2(\mu_1^2 - (\bar{\mu}_1^2 + \underline{\mu}_1^2)) - (\bar{\mu}_1^2 - \underline{\mu}_1^2)^2\} + 0(\mu_1^6) \quad (3.9)$$

en

$$\begin{aligned}\max_{[\underline{\mu}_1, \bar{\mu}_1]} |\bar{\alpha}(\mu_1)| &= |\bar{\alpha}(\underline{\mu}_1)| = |\bar{\alpha}(\bar{\mu}_1)| \\ &= \frac{1}{96}(\bar{\mu}_1^2 - \underline{\mu}_1^2)^2 + 0(\bar{\mu}_1^6).\end{aligned}\quad (3.9')$$

zodat (zie (2.9))

$$\max_{f_1 \in [\underline{f}_1, \bar{f}_1]} \left| \frac{1}{\Delta^2 x_1} \bar{\alpha}(f_1 \Delta x_1) \right| = \frac{1}{96}(\bar{f}_1^2 - \underline{f}_1^2)^2 \Delta^2 x_1 + 0(\Delta^4 x_1). \quad (3.9'')$$

Analoge uitdrukkingen gelden voor η_0, η_1 en $\bar{\beta}$.

GEVOLG 1: Zij

$$(f^{(r)}, f_2^{(r)}) \in [\underline{f}_1, \bar{f}_1] * [\underline{f}_1, \bar{f}_2], \quad r = 1, \dots, R;$$

en laten de discretisatie-gewichten gedefinieerd zijn door (3.7).

Dan wordt de afbreekfout, als er gebruik wordt gemaakt van (2.3) als exacte oplossing van (1.1) met $C=0$ gegeven door:

$$L(w_o) = -\frac{1}{96} \sum_{r=1}^R [C_\alpha \Delta^2 x_1 A + C_\beta \Delta^2 x_2 B] w_o^{(r)} e^{if^{(r)} \cdot x} + 0(\Delta^4 x) \quad (3.10)$$

waarbij de orde-constanten voldoen aan (zie (3.9))

$$|C_\alpha| \leq (\bar{f}_1^2 - \underline{f}_1^2)^2, \quad |C_\beta| \leq (\bar{f}_2^2 - \underline{f}_2^2)^2. \quad (3.10')$$

In het conventionele geval als

$$z_1 = z_2 = 0 \Rightarrow \xi_1 = 1, \xi_0 = 1, \quad (3.11)$$

vinden we

$$\max_{[\mu_1, \bar{\mu}_1]} |\bar{\alpha}(\mu_1)| = \bar{\alpha}(\bar{\mu}_1) = \frac{1}{12} \bar{\mu}_1^4 + O(\bar{\mu}_1^6) \quad (3.12)$$

en dus geldt dat (zie (2.9))

$$\max_{f_1 \in [f_1, \bar{f}_1]} \left| \frac{1}{\Delta^2 x_1} \bar{\alpha}(f_1 \Delta x_1) \right| = \frac{1}{12} \bar{f}_1^4 \Delta^2 x_1 + O(\Delta^4 x_1). \quad (3.12')$$

Zodat eenzelfde uitdrukking als (3.10) geldt maar de orde-constanten moeten nu voldoen aan

$$|C'_\alpha| \leq 8\bar{f}_1^4, \quad |C'_\beta| \leq 8\bar{f}_2^4. \quad (3.10'')$$

Bij gebruikmaking van (3.7) vinden we dus een winstfactor ten opzichte van (3.11), van

$$\frac{\text{afbreekfout (3.11)}}{\text{afbreekfout (3.7)}} = \frac{8\bar{f}_1^4}{(\bar{f}_1^2 - f_1^2)^2} = \frac{8}{1 - 2(f_1/\bar{f}_1)^2 + (f_1/\bar{f}_1)^4}.$$

We zien dat voor niet te grote frequentie-intervallen $[f_1, \bar{f}_1]$ een aanzienlijke winst behaald kan worden.

Zo is de winstfactor voor het frequentie-interval $[0, \bar{f}_1]$ nog altijd gelijk 8.

GEVOLG 2:

We nemen aan dat de exacte oplossing bestaat uit R Fourier-componenten met de frequenties

$$f_n^{(r)} = r f_n; \quad n = 1, 2; \quad r = 1, \dots, R.$$

Als

$$\bar{f}_n = f_n : \bar{f}_n = R f_n$$

voldoen de orde-constanten (3.10') aan

$$|C_\alpha| \leq (R^2 - 1)^2 f_1^4, \quad |C_\beta| \leq (R^2 - 1)^2 f_2^4$$

terwijl de orde-constanten van het conventionele geval (3.10'') voldoen aan

$$|C'_\alpha| \leq 8R^4 f_1^4, \quad |C'_\beta| \leq 8R^4 f_2^4$$

Deze ongelijkheden leiden dus tot een winstfactor

$$\frac{\text{afbreekfout (3.11)}}{\text{afbreekfout (3.7)}} = \frac{8R^4}{(R^2 - 1)^2}.$$

Deze relatie laat dus zien dat de winstfactor varieert van 14 voor $R=2$ tot 8 voor R groot.

VOORBEELD 3.2: We bestuderen nu het vijfpuits-lijn-molekuul gedefinieerd door (3.1) met $k=2$. Het oplossen van stelsel (3.3) levert ons dan de volgende discretisatie-gewichten

$$\begin{aligned}\xi_2 &= -\frac{\frac{z_1^2 - z_2^2}{2(\cos z_1 - \cos z_2)} - \frac{z_1^2 - z_3^2}{2(\cos z_1 - \cos z_3)}}{2(\cos z_2 - \cos z_3)}, \\ \xi_1 &= -\frac{z_1^2 - z_2^2}{2(\cos z_1 - \cos z_2)} - 2\xi_2(\cos z_1 + \cos z_2), \\ \xi_0 &= -\frac{z_1^2}{2} - \xi_1 \cos z_1 - \xi_2(2\cos^2 z_1 - 1).\end{aligned}\quad (3.13)$$

Identificeren we de nulpunten $z_i, i=1,2,3$ van $\bar{\alpha}(z)$ met die van het derdegraads Chebyshev-polynoom, dan worden de z_i gedefinieerd door (3.6).

TABEL 3.1 toont de discretisatie-gewichten ξ_0, ξ_1 en ξ_2 voor tot nul naderende frequentie-intervallen. In de laatste regel staan de conventionele discretisatie-gewichten zoals die bepaald worden door de orde-condities (zie voorbeeld 1.1B).

Tabel 3.1.

$[\mu_1, \bar{\mu}_1]$	ξ_0	ξ_1	ξ_2
[.1, .2]	-1.252496	1.336667	-.084172
[.05, .1]	-1.250625	1.334167	-.083542
[.025, .05]	-1.250156	1.333542	-.083385
[.0125, .025]	-1.250039	1.333385	-.083346
[.00625, .0125]	-1.250004	1.333339	-.083335
conventioneel	-1.25	1.333333	-.083333

We zien dus dat de discretisatie-gewichten gedefinieerd door (3.13) convergeren naar de conventionele discretisatie-gewichten als $\mu_1, \bar{\mu}_1$ naderen tot nul.

De conventionele gewichten zijn dus te interpreteren als de optimale gewichten (3.13) met de dominante frequenties gevestigd in nul.

TABEL 3.2 toont de maximum-waarde van $|\bar{\alpha}(z)|$ op een aantal intervallen $[\mu_1, \bar{\mu}_1]$ voor de conventionele discretisatie-gewichten (zie voorbeeld 1.1B) en voor de optimaal aan het frequentie-interval aangepaste discretisatie-gewichten (3.13).

Tabel 3.2. Maximum-waarden van de coëfficiënt-functie $|\bar{\alpha}(z)|$.

$[\underline{\mu} , \bar{\mu}]$	conventioneel		optimaal	
[0 , .1]	1.1	E -8	3.5	E -10
[0 , .2]	7.1	E -7	2.2	E -8
[0 , .3]	8.0	E -6	2.6	E -7
[0 , .4]	4.5	E -5	1.4	E -6
[0 , .5]	1.7	E -4	5.6	E -6
[0 , .6]	5.0	E -4	1.7	E -5
[0 , .7]	1.3	E -3	4.3	E -5
[0 , .8]	2.8	E -3	9.8	E -5
[0 , .9]	5.5	E -3	2.0	E -4
[0 , 1.0]	1.0	E -2	3.9	E -4
[0.1 , .2]	7.1	E -7	9.4	E -9
[0.1 , .3]	8.0	E -6	1.8	E -7
[0.1 , .4]	4.5	E -5	1.2	E -6
[0.1 , .5]	1.7	E -4	4.9	E -6
[0.1 , .6]	5.0	E -4	1.6	E -5
[0.1 , .7]	1.3	E -3	4.1	E -5
[0.1 , .8]	2.8	E -3	9.4	E -5
[0.1 , .9]	5.5	E -3	2.0	E -4
[0.1 , 1.0]	1.0	E -2	3.8	E -4
[0.1 , 1.1]	1.8	E -2	6.9	E -4
[1.0 , 1.1]	1.7	E -2	3.8	E -6
[1.0 , 1.2]	2.9	E -2	3.6	E -5
[1.0 , 1.3]	4.6	E -2	1.5	E -4
[1.0 , 1.4]	7.0	E -2	4.1	E -4
[1.0 , 1.5]	1.0	E -1	9.3	E -4
[1.0 , 1.6]	1.5	E -1	1.9	E -3
[1.0 , 1.7]	2.1	E -1	3.5	E -3
[1.0 , 1.8]	2.8	E -1	6.2	E -3
[1.0 , 1.9]	3.8	E -1	1.0	E -2
[1.0 , 2.0]	5.0	E -1	1.7	E -2

We concluderen dat er een aanzienlijke winst te behalen is door gebruik te maken van (3.13). Vooral voor grotere waarden van de dominante frequenties en kleine frequentie-intervallen is de winst opmerkelijk. Dit was te verwachten, aangezien voor kleiner wordende waarden van de dominante frequenties de corresponderende discretisatie-gewichten meer gaan gelijken op de conventionele-gewichten (zie ook Tabel 3.1).

Zelfs voor grotere frequentie-intervallen blijkt de winst nog aanzienlijk.

Tenslotte dient nog opgemerkt te worden dat $|\bar{\alpha}(z)|$ in Tabel 3.2. een zesde-orde gedrag vertoont, terwijl we een vierde-orde methode behandelen. Dit komt natuurlijk door de definitie van α in relatie tot ϕ (zie (2.9))

$$\phi \sim \frac{\alpha}{\Delta^2 x} \sim \text{afbreekfout}$$

zodat de afbreekfout wel degelijk vierde-orde is.

4. "NIET" LIJN-DISCRETISATIES

We zullen nu bestuderen of het voordelig is om alle directe burens van een bepaald roosterpunt te gebruiken voor de definitie van de differentie-operatoren (1.2), in plaats van het gebruik van lijn-molekulen zoals in de voorgaande sectie.

Allereerst bekijken we (1.2) met $k=1$.

We hebben nu te maken met een negenpunts-discretisatie die in molekuul-notatie geschreven kan worden als:

$$D_1^{(2)} w(x_1, x_2) = \frac{1}{2\Delta^2 x_1} \begin{pmatrix} \xi_1^{(1)} & 2\xi_0^{(1)} & \xi_1^{(1)} \\ 2\xi_1^{(0)} & 4\xi_0^{(0)} & 2\xi_1^{(0)} \\ \xi_1^{(1)} & 2\xi_0^{(1)} & \xi_1^{(1)} \end{pmatrix} w(x_1, x_2). \quad (4.1)$$

De coëfficiënt-functie $\alpha(\mu)$ (2.10) van de afbreekfout wordt gegeven door

$$\alpha(\mu_1, \mu_2) = \mu_1^{(2)} + 2[\xi_0^{(0)} + \xi_1^{(0)} \cos \mu_1 + \xi_0^{(1)} \cos \mu_2 + \xi_1^{(1)} \cos \mu_1 \cdot \cos \mu_2]. \quad (4.2)$$

We gaan de vier vrije parameters nu zodanig bepalen dat:

- (i) als de dominante frequenties nauwkeurig genoeg bekend zijn, deze dominante frequenties corresponderen met nulpunten van α .
- (ii) als slechts het interval van dominante frequenties M bekend is, geldt dat

$$\max_{\mu \in M} |\alpha(\mu)| \quad (4.3)$$

minimaal is.

Hierin wordt M gedefinieerd als:

$$M := [\mu_1, \bar{\mu}_1] * [\mu_2, \bar{\mu}_2]$$

en voor de dominante frequenties $f_n^{(r)}$ geldt

$$\underline{\mu}_n := \Delta x_n f_n \leq \Delta x_n f_n^{(r)} \leq \Delta x_n \bar{f}_n =: \bar{\mu}_n; \quad r=1, \dots, R; \quad n=1, 2.$$

ad (i) In het speciale geval dat de oplossing wordt gedomineerd door twee frequenties

$$f_1^{(i)}; i = 1, 2 \text{ in de } x_1 \text{ - richting en twee frequenties}$$

$$f_2^{(j)}; j = 1, 2 \text{ in de } x_2 \text{ - richting.}$$

Kiezen we de punten

$$(x_i, y_j) := (\Delta x_1 f_1^{(i)}, \Delta x_2 f_2^{(j)}); \quad i, j = 1, 2, \quad (4.4)$$

als de nulpunten van α .

ad (ii) In het algemene geval gaan we net zo te werk als in sectie 3.

We nemen aan dat voor vaste $\mu_2 \in [\mu_2, \bar{\mu}_2]$ de even-functie $\alpha(\mu_1, \mu_2)$, op het interval $[\mu_1, \bar{\mu}_1]$, voldoende nauwkeurig door een polynoom - in μ_1^2 - van graad 2 voorgesteld kan worden.

Het minimax-probleem wordt nu bij benadering opgelost door $\alpha(\mu_1, \mu_2)$ te identificeren met een naar $[\mu_1^2, \bar{\mu}_1^2]$ getransformeerd Chebyshev-polynoom - in μ_1^2 - van graad 2. (zie (3.5)).

We identificeren nu de nulpunten $x_i, i=1,2$ van $\alpha(\mu_1, \mu_2)$ met die van zo'n Chebyshev-polynoom zodat

$$\begin{aligned} x_i &:= \frac{1}{\sqrt{2}} [(\bar{\mu}_1^2 + \underline{\mu}_1^2) + (\bar{\mu}_1^2 - \underline{\mu}_1^2) \cos(\frac{2i-1}{4}\pi)]^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{\Delta x_1}{\sqrt{2}} [(\bar{f}_1^2 + \underline{f}_1^2) + (\bar{f}_1^2 - \underline{f}_1^2) \cos(\frac{2i-1}{4}\pi)]^{\frac{1}{2}}; \quad i = 1, 2. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Vervolgens doen we hetzelfde maar nu met $\mu'_1 \in [\underline{\mu}_1, \bar{\mu}_1]$ vast en met de even-functie $\alpha(\mu'_1, \mu_2)$.

We verkrijgen dan de nulpunten $y_j, j=1,2$

$$\begin{aligned} y_j &:= \frac{1}{\sqrt{2}} [(\bar{\mu}_2^2 + \underline{\mu}_2^2) + (\bar{\mu}_2^2 - \underline{\mu}_2^2) \cos(\frac{2j-1}{4}\pi)]^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{\Delta x_2}{\sqrt{2}} [(\bar{f}_2^2 + \underline{f}_2^2) + (\bar{f}_2^2 - \underline{f}_2^2) \cos(\frac{2j-1}{4}\pi)]^{\frac{1}{2}}; \quad j = 1, 2. \end{aligned} \quad (4.5')$$

In de gevallen (i) en (ii) verkrijgen we een stelsel dat gedefinieerd wordt door

$$\alpha(x_i, y_j) = 0; \quad i, j = 1, 2. \quad (4.6)$$

De oplossing van dit stelsel is:

$$\begin{aligned} \xi_0^{(0)} &= \frac{x_1^2 \cos x_2 - x_2^2 \cos x_1}{2(\cos x_1 - \cos x_2)}, \\ \xi_1^{(0)} &= \frac{-(x_1^2 - x_2^2)}{2(\cos x_1 - \cos x_2)}, \\ \xi_0^{(1)} &= \xi_1^{(1)} = 0. \end{aligned} \quad (4.7)$$

We concluderen dus dat de optimale negenpunts-discretisatie in feite een optimale driepunts-discretisatie is.

Vervolgens bestuderen we (1.2) met $k=2$.

We hebben nu de vijftigpunts-discretisatie die in molekuul-notatie weergegeven wordt als:

$$D_1^{(2)} = \frac{1}{2\Delta^2 x_1} \begin{bmatrix} \xi_2^{(2)} & \xi_1^{(2)} & 2\xi_0^{(2)} & \xi_1^{(2)} & \xi_2^{(2)} \\ \xi_2^{(1)} & \xi_1^{(1)} & 2\xi_0^{(1)} & \xi_1^{(1)} & \xi_2^{(1)} \\ 2\xi_2^{(0)} & 2\xi_1^{(0)} & 4\xi_0^{(0)} & 2\xi_1^{(0)} & 2\xi_2^{(0)} \\ \xi_2^{(1)} & \xi_1^{(1)} & 2\xi_0^{(1)} & \xi_1^{(1)} & \xi_2^{(1)} \\ \xi_2^{(2)} & \xi_1^{(2)} & 2\xi_0^{(2)} & \xi_1^{(2)} & \xi_2^{(2)} \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

De functie $\alpha(\mu)$ (2.10) wordt gegeven door:

$$\begin{aligned} \alpha(\mu) &= \mu_1^2 + 2 [\xi_0^{(0)} + \xi_1^{(0)} \cos \mu_1 + \xi_0^{(1)} \cos \mu_2 + \xi_1^{(1)} \cos \mu_1 \cos \mu_2 \\ &\quad + \xi_2^{(0)} \cos 2\mu_1 + \xi_2^{(1)} \cos 2\mu_1 \cos \mu_2 \\ &\quad + \xi_0^{(2)} \cos 2\mu_2 + \xi_1^{(2)} \cos \mu_1 \cos 2\mu_2 \\ &\quad + \xi_2^{(2)} \cos 2\mu_1 \cos 2\mu_2] ; \quad \mu \in M. \end{aligned} \quad (4.9)$$

We gaan nu analoog te werk als in het voorgaande probleem met $k=1$, en vinden het stelsel

$$\alpha(x_i, y_j) = 0 ; i, j = 1, 2, 3 , \quad (4.10)$$

met

$$x_i := \Delta x_1 f_1^{(i)} ; y_j := \Delta x_2 f_2^{(j)} ; i, j = 1, 2, 3 ,$$

als de oplossing wordt gedomineerd door drie frequenties in elke richting, of met

$$\begin{aligned} x_i &:= \frac{1}{\sqrt{2}} [(\bar{\mu}_1^2 + \underline{\mu}_1^2) + (\bar{\mu}_1^2 - \underline{\mu}_1^2) \cos(\frac{2i-1}{6}\pi)]^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{\Delta x_1}{\sqrt{2}} [(\bar{f}_1^2 + \underline{f}_1^2) + (\bar{f}_1^2 - \underline{f}_1^2) \cos(\frac{2i-1}{6}\pi)]^{\frac{1}{2}} ; i = 1, 2, 3 . \end{aligned} \quad (4.11)$$

en

$$\begin{aligned} y_j &:= \frac{1}{\sqrt{2}} [(\bar{\mu}_2^2 + \underline{\mu}_2^2) + (\bar{\mu}_2^2 - \underline{\mu}_2^2) \cos(\frac{2j-1}{6}\pi)]^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{\Delta x_2}{\sqrt{2}} [(\bar{f}_2^2 + \underline{f}_2^2) + (\bar{f}_2^2 - \underline{f}_2^2) \cos(\frac{2j-1}{6}\pi)]^{\frac{1}{2}} ; j = 1, 2, 3 . \end{aligned} \quad (4.11')$$

als alleen het interval M van dominante frequenties bekend is.

Het oplossen van stelsel (4.10) leidt nu tot de discretisatie-gewichten

$$\begin{aligned} \xi_0^{(1)} &= \xi_0^{(2)} = \xi_1^{(1)} = \xi_1^{(2)} = \xi_2^{(1)} = \xi_2^{(2)} = 0 , \\ \xi_2^{(0)} &= -\frac{\frac{x_1^2 - x_2^2}{2(\cos x_1 - \cos x_2)} - \frac{x_1^2 - x_3^2}{2(\cos x_1 - \cos x_3)}}{2(\cos x_2 - \cos x_3)} , \\ \xi_1^{(0)} &= -\frac{x_1^2 - x_2^2}{2(\cos x_1 - \cos x_2)} - 2\xi_2^{(0)}(\cos x_1 + \cos x_2) , \\ \xi_0^{(0)} &= -\frac{x_1^2}{2} - \xi_1^{(0)} \cos x_1 - \xi_2^{(0)}(2\cos^2 x_1 - 1) . \end{aligned} \quad (4.12)$$

We concluderen dat de optimale vijftientig-punts discretisatie in feite een optimale vijf-punts discretisatie is.

Het is dus ook hier niet voordeliger om een "Niet" lijnmolekuul te gebruiken in plaats van het optimale vijf-punts-molekuul met gewichten (4.12).

5. DE DIFFERENTIE-OPERATOR $D_{1,2}^{(2)}$

In deze sectie behandelen we de differentie-operator $D_{1,2}^{(2)}$ (zie (1.2')), die de plaatsafgeleide $\frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2}$ benadert.

We gaan uit van de vierde-orde nauwkeurige differentie-operator met $k=2$. Het bijbehorende vijftientig-punts molekuul is te schrijven als:

$$D_{1,2}^{(2)} = \frac{1}{2\Delta x_1 \Delta x_2} \begin{pmatrix} -\xi_2^{(2)} & -\xi_1^{(2)} & 0 & \xi_1^{(2)} & \xi_2^{(2)} \\ -\xi_2^{(1)} & -\xi_1^{(1)} & 0 & \xi_1^{(1)} & \xi_2^{(1)} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \xi_2^{(1)} & \xi_1^{(1)} & 0 & -\xi_1^{(1)} & -\xi_2^{(1)} \\ \xi_2^{(2)} & \xi_1^{(2)} & 0 & -\xi_1^{(2)} & -\xi_2^{(2)} \end{pmatrix} . \quad (5.1)$$

De , op M , te minimaliseren functie $\gamma(\mu)$ wordt dan gegeven als ((2.10)):

$$\gamma(\mu) = \mu_1 \mu_2 - 2[\xi_1^{(1)} \sin \mu_1 \sin \mu_2 + \xi_2^{(1)} \sin 2\mu_1 \sin \mu_2 + \xi_1^{(2)} \sin \mu_1 \sin 2\mu_2 + \xi_2^{(2)} \sin 2\mu_1 \sin 2\mu_2] . \quad (5.2)$$

We willen dat $\max_M |\gamma(z)|$ bij benadering minimaal is, en bereiken dit door vier geschikte punten in het vierkant M te kiezen, zodanig dat γ nul is in die punten.

De punten kunnen gekozen worden als:

$$(x_i, y_j) := (\Delta x_1 f_1^{(i)}, \Delta x_2 f_2^{(j)}) ; i, j = 1, 2 , \quad (5.3)$$

wanneer de oplossing wordt gedomineerd door twee frequenties $f_1^{(i)} : i=1,2$ in de x_1 -richting en twee frequenties $f_2^{(j)} : j=1,2$ in de x_2 -richting.

Anders identificeren we $\gamma(\mu_1, \mu_2)$ (met μ_1 respectievelijk μ_2 vast) weer met een Chebyshev-polynoom (in μ_2 respectievelijk μ_1).

Dit Chebyshev-polynoom zal van graad 2 zijn.

En, aangezien $\gamma(\mu_1, \mu_2)$ een oneven functie is, zal het een polynoom in μ_2 dan wel in μ_1 zijn.

We vinden dan de punten (x_i, y_j) ; $i, j=1,2$, met

$$\begin{aligned} x_i &:= \frac{1}{2}[(\bar{\mu}_1 + \mu_1) + (\bar{\mu}_1 - \mu_1) \cos(\frac{2i-1}{4}\pi)] ; i=1,2 , \\ y_j &:= \frac{1}{2}[(\bar{\mu}_2 + \mu_2) + (\bar{\mu}_2 - \mu_2) \cos(\frac{2j-1}{4}\pi)] ; j=1,2 . \end{aligned} \quad (5.4)$$

We hebben dus nu het stelsel verkregen gedefinieerd door:

$$\gamma(x_i, y_j) = 0 \text{ voor } i, j = 1, 2 \quad (5.5)$$

en met x_i en y_j gedefinieerd als in (5.3) of (5.4).

Door dit stelsel op te lossen vinden we de volgende discretisatie-gewichten:

$$\begin{aligned} \xi_1^{(1)} &= \frac{(x_1 \sin(2x_2) - x_2 \sin(2x_1))(y_1 \sin(2y_2) - y_2 \sin(2y_1))}{8 \sin(x_1) \sin(x_2) \sin(y_1) \sin(y_2) (\cos x_2 - \cos x_1) (\cos y_2 - \cos y_1)} , \\ \xi_2^{(1)} &= \frac{x_1 (y_1 \sin(2y_2) - y_2 \sin(2y_1))}{8 \sin(x_1) \sin(y_1) \sin(y_2) (\cos y_2 - \cos y_1) \cos(x_1)} - \frac{\xi_1^{(1)}}{2 \cos x_1} , \\ \xi_1^{(2)} &= \frac{y_1 (x_1 \sin(2x_2) - x_2 \sin(2x_1))}{8 \sin(x_1) \sin(x_2) \sin(y_1) (\cos x_2 - \cos x_1) \cos(y_1)} - \frac{\xi_1^{(1)}}{2 \cos y_1} , \\ \xi_2^{(2)} &= \frac{x_1 y_1}{2 \sin(2x_1) \sin(2y_1)} - \frac{\xi_1^{(1)}}{4 \cos(x_1) \cos(y_1)} - \frac{\xi_2^{(1)}}{2 \cos y_1} - \frac{\xi_1^{(2)}}{2 \cos x_1} . \end{aligned} \quad (5.6)$$

6. EÉN-DIMENSIONALE GOLVEN

Als we aannemen dat geldt

$$f_2^{(r)} = e f_1^{(r)} , e = \text{constant} , r = 1, \dots, R , \quad (6.1)$$

dan bestaat (2.3) in feite uit één-dimensionale componenten en stelt dus golven voor die in het (x_1, x_2) -vlak alle in dezelfde richting lopen.

Door

$$\Delta x_2 = \Delta x_1 / e, \quad \eta_j^{(l)} = \xi_j^{(l)} \quad (6.2)$$

te kiezen, verandert (2.10) in

$$\alpha(\mu) = \beta(\mu) = \tilde{\alpha}(\mu_1) := \mu_1^2 + 2 \sum_{j,l}^k \xi_j^{(l)} \cos(j\mu_1) \cos(l\mu_1) \quad (6.3)$$

en (2.9) met $C=0$ in

$$\phi^{(r)} = \tilde{\alpha}(\mu_1^{(r)}) \left[\frac{1}{\Delta^2 x_1} A + \frac{1}{\Delta^2 x_2} B \right]. \quad (6.4)$$

Er is dus één functie overgebleven om te minimaliseren.

We bekijken eerst de algemene $k=1$ formule, wat leidt tot de negen-punts discretisatie van de tweede orde afgeleiden. De coëfficiënten-functie $\tilde{\alpha}$ wordt dan gegeven door:

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}(\mu_1) &= \mu_1^2 + 2[\xi_0^{(0)} + (\xi_0^{(1)} + \xi_1^{(0)}) \cos \mu_1 + \xi_1^{(1)} \cos^2 \mu_1] \\ &= \mu_1^2 + 2[\xi_0 + \xi_1 \cos \mu_1 + \xi_2 \cos 2\mu_1] = \bar{\alpha}(\mu_1) \end{aligned} \quad (6.5)$$

met

$$\xi_0 := \xi_0^{(0)} + \frac{1}{2} \xi_1^{(1)}, \quad \xi_1 := \xi_0^{(1)} + \xi_1^{(0)}, \quad \xi_2 := \frac{1}{2} \xi_1^{(1)}.$$

We zien dat $\tilde{\alpha}(\mu_1)$ identiek wordt aan $\bar{\alpha}(\mu_1)$ zoals gedefinieerd in (3.1) voor $k=2$. We kunnen dus alle resultaten die daar behaald zijn gebruiken om de drie overgebleven vrijheidsgraden te bepalen.

Vervolgens bekijken we het vijftwintig-punts molecuul wat ontstaat voor $k=2$. De functie $\tilde{\alpha}$ ziet er dan uit als:

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}(\mu_1) &= \mu_1^2 + 2[\xi_0^{(0)} + (\xi_0^{(1)} + \xi_1^{(0)}) \cos \mu_1 + \xi_1^{(1)} \cos^2 \mu_1 \\ &\quad + (\xi_2^{(0)} + \xi_0^{(2)}) \cos 2\mu_1 + (\xi_2^{(1)} + \xi_1^{(2)}) \cos 2\mu_1 \cos \mu_1 + \xi_2^{(2)} \cos^2 2\mu_1] \\ &= \mu_1^2 + 2[\xi_0 + \xi_1 \cos \mu_1 + \xi_2 \cos 2\mu_1 + \xi_3 \cos 3\mu_1 + \xi_4 \cos 4\mu_1] = \bar{\alpha}(\mu_1) \end{aligned} \quad (6.6)$$

met

$$\begin{aligned} \xi_0 &:= \xi_0^{(0)} + \frac{1}{2}(\xi_1^{(1)} + \xi_2^{(2)}), \\ \xi_1 &:= \xi_0^{(1)} + \xi_1^{(0)} + \frac{1}{2}(\xi_2^{(1)} + \xi_1^{(2)}), \\ \xi_2 &:= \xi_2^{(0)} + \xi_0^{(2)} + \frac{1}{2}\xi_1^{(1)}, \\ \xi_3 &:= \frac{1}{2}(\xi_2^{(1)} + \xi_1^{(2)}), \\ \xi_4 &:= \frac{1}{2}\xi_2^{(2)}, \end{aligned}$$

waarbij $\bar{\alpha}$ wordt gedefinieerd door (3.1) met $k=4$.

Van de negen vrijheidsgraden zijn er dus nog vijf overgebleven voor het minimaliseren van $\tilde{\alpha}$.

In het algemeen is elke functie $\tilde{\alpha}$ van de vorm (6.3) met behulp van de trigonometrische identiteit

$$2\cos(rz)\cos(sz) = \cos(r+s)z + \cos(r-s)z,$$

als een functie $\bar{\alpha}$ van de vorm (3.1) te schrijven. (zie Sectie 3. voor een methode voor het minimaliseren van $\bar{\alpha}$).

Wanneer dit zich voordoet zullen we de tijdstap gelijk nemen aan die van de andere experimenten in dat probleem, en de gemeten nauwkeurigheid tussen vierkante haakjes ([.]), bij gebruik van de tweede-orde tijdsintegrator, en tussen ronde haakjes ((.)) bij gebruik van de vierde-orde tijdsintegrator, vermelden.

Men bedenke dus dat zo'n waarde geheel afhankelijk is van de gekozen tijdstap en tijdsintegrator.

We vergelijken de voor onze problemen bekende exacte oplossing met de numerieke oplossing. Om de verkregen nauwkeurigheid te bepalen definiëren we

$$cd(\Delta x, \Delta t, T) := -^{10}\log(\| \text{globale fout in } t=T \|_{\infty}), \quad (7.2)$$

wat het minimum aantal korrekte decimalen in het eindpunt T voorstelt.

7.1 Probleem 1.

We beschouwen het twee-dimensionale lineaire beginwaarde-probleem uit Tabel 7.1. Dit beginwaarde-probleem heeft de exacte oplossing

$$w(t, x) = \sin(t + x_1) + \cos(2t + x_2) \quad (7.3)$$

en is dus van de vorm (2.3) met $R=2$ en met de frequenties 1,0 in de x_1 -richting en 0,1 in de x_2 -richting.

Tabel 7.1.

(7.1) met $A = 1$, $B = 4$, $C = 0$, $g = 0$ en

$$\begin{cases} w(0, x) = \sin(x_1) + \cos(x_2) \\ w_t(0, x) = \cos(x_1) - 2 \sin(x_2) \end{cases}$$

geëlimineerde frequenties:	(0,0,0)* (0,0,0)	(0,1,3)* (0,1,3)
$cd(\frac{2\pi}{5}, 0.05, 4)$	0.86	(4.92)
$cd(\frac{2\pi}{10}, 0.05, 4)$	2.03	(4.92)
$cd(\frac{2\pi}{20}, 0.05, 4)$	3.21	(4.92)

De cd-waarden, behorende bij het conventionele geval, illustreren het vierde-orde gedrag van de plaatsdiscretisatie. ($^{10}\log 2^4 \approx 1.2$).

Terwijl de cd-waarden, in het geval dat de frequenties (0,1,3)*(0,1,3) geëlimineerd zijn, tonen dat de gemaakte plaatsfout nul is. De waarden laten dus alleen tijdfout zien.

7.2. Probleem 2.

Allereerst bekijken we het één-dimensionale lineaire probleem uit Tabel 7.2. Dit probleem heeft de exacte oplossing

$$w(t, x) = \sin(t + x_1) + \frac{1}{2} \sin(2t + 2x_1) + e \sin(3t + 3x_1) \quad (7.4)$$

Tabel 7.2

$$A = 1, B = C = 0, g = 0$$

$$\begin{cases} w(0,x) = \sin(x_1) + \frac{1}{2}\sin(2x_1) + e \sin(3x_1) \\ w_t(0,x) = \cos(x_1) + \cos(2x_1) + 3e \cos(3x_1) \end{cases}$$

geëlimineerde frequenties:	(0,0,0)	(1,2,3)	(1.05,2.1,3.15)	(1.1,2.2,3.3)	(0,0.5,1)	(1,1.5,2)	(2,2.5,3)
$e=0 ; cd(\frac{2\pi}{15}, 0.1, 4)$	1.97	(4.66)	2.43	2.03	2.12	(4.66)	1.01
$e=0.1; cd(\frac{2\pi}{15}, 0.1, 4)$	1.64	(4.32)	2.34	1.96	2.02	2.21	1.01

Deze resultaten tonen de gevoeligheid van de eliminatie-methode voor afwijkingen in de schatting van de exacte frequenties. Voor een afwijking van 10% zijn de resultaten nauwelijks beter dan die van het conventionele geval, bij een afwijking van 5% is er een kleine winst te zien van 0.4 (bij $e=0$) respectievelijk 0.7 (bij $e=0.1$) decimalen ten opzichte van het conventionele geval (geëlimineerde frequenties (0,0,0)).

Uit de laatste drie kolommen blijkt de dominerende rol van de eerste, en in iets mindere mate, de tweede Fourier-component.

Vervolgens bekijken we het één-dimensionale niet-lineaire probleem van Tabel 7.3 met dezelfde exacte oplossing (7.4) als het voorgaande probleem.

Tabel 7.3

$$A = \sin^2(t+x_1), B = C = 0,$$

$$g = (\sin^2(t+x_1) - 1)[\sin(t+x_1) + 2\sin(2t+2x_1) + 9e \sin(3t+3x_1)]$$

$$\begin{cases} w(0,x) = \sin(x_1) + \frac{1}{2}\sin(2x_1) + e \sin(3x_1) \\ w_t(0,x) = \cos(x_1) + \cos(2x_1) + 3e \cos(3x_1) \end{cases}$$

geëlimineerde frequenties:	(0,0,0)	(1,2,3)	(0.05,2.1,3.15)	(1,1.5,2)
$e=0 ; cd(\frac{2\pi}{15}, 0.1, 4)$	1.69	(4.74)	2.26	(4.74)
$e=0.1; cd(\frac{2\pi}{15}, 0.1, 4)$	1.38	(4.23)	2.31	1.96

De resultaten bij een afwijking van 5% van de exacte frequenties tonen, dat ook bij niet lineaire problemen waarbij de frequenties niet constant zijn maar niet meer dan een klein percentage (bijvoorbeeld 5%) afwijken van een vaste frequentie, de eliminatie-methode van waarde is.

De laatste kolom, tenslotte, laat de gevoeligheid zien voor de aanwezigheid van een Fourier-component waarvan de frequentie niet geëlimineerd is.

7.3. Probleem 3.

In deze sectie bestuderen we het gedrag van de plaatsdiscretisatie van de differentiaal-operator $\partial^2/\partial x_1 \partial x_2$.

Hiertoe integreerden we problemen die vergelijkbaar zijn met die uit sectie 7.2. Deze problemen zijn in Tabel 7.4, voor een lineair probleem, en in Tabel 7.5, voor een niet-lineair probleem, gespecificeerd. Beide problemen hebben dezelfde exacte oplossing

$$w(t, x) = \cos(2t + x_1 + x_2) + e \cos(4t + 2x_1 + 2x_2). \quad (7.5)$$

Tabel 7.4

$$C = 4, A = B = 0, g = 0,$$

$$\begin{cases} w(0, x) = \cos(x_1 + x_2) + e \cos(2x_1 + 2x_2) \\ w_t(0, x) = -2 \sin(x_1 + x_2) - 4e \sin(2x_1 + 2x_2). \end{cases}$$

geëlimineerde frequenties:	(0,0)* (0,0)	(1,2)* (1,2)	(0.95,2.1)* (0.95,2.1)	(0.9,2.2)* (0.9,2.2)	(0,1)* (0,1)	(2,2)* (2,2)
$e = 0.04; cd(\frac{2\pi}{15}, 0.1, 4)$	1.09	(4.06)	1.69	1.34	1.46	0.27
$e = 0.5 ; cd(\frac{2\pi}{15}, 0.1, 4)$	0.23	(3.17)	1.17	0.84	0.37	0.27

Tabel 7.5

$$C = 4 \cos^2(t + x_1 + x_2), A = B = 0,$$

$$g = 4(\cos^2(t + x_1 + x_2) - 1)[\cos(2t + x_1 + x_2) + 4e \cos(4t + 2x_1 + 2x_2)],$$

$$\begin{cases} w(0, x) = \cos(x_1 + x_2) + e \cos(2x_1 + 2x_2) \\ w_t(0, x) = -2 \sin(x_1 + x_2) - 4e \sin(2x_1 + 2x_2). \end{cases}$$

geëlimineerde frequenties:	(0,0)* (0,0)	(1,2)* (1,2)	(0.95,2.1)* (0.95,2.1)	(0,1)* (0,1)	(2,2)* (2,2)
$e = 0.04; cd(\frac{2\pi}{15}, 0.1, 4)$	0.95	(4.12)	1.79	1.23	0.51
$e = 0.5 ; cd(\frac{2\pi}{15}, 0.1, 4)$	0.00	(3.13)	1.11	0.13	0.51

De Tabellen 7.4 en 7.5 vertonen hetzelfde gedrag als de Tabellen 7.2 en 7.3. Het commentaar uit sectie 7.2 is, geprojecteerd op de nieuwe problemen, dan ook hier weer van toepassing.

7.4. Probleem 4.

Het in Tabel 7.6 geïllustreerde lineaire probleem heeft de exacte oplossing

$$w(t, x) = \sin(2t + x_1 + x_2) + \frac{1}{5} \cos(5t + 3x_1 + 2x_2) \quad (7.6)$$

Tabel 7.6

$$A = B = 1, C = 2, g = 0,$$

$$\begin{cases} w(0, x) = \sin(x_1 + x_2) + \frac{1}{5} \cos(3x_1 + 2x_2) \\ w_t(0, x) = 2 \cos(x_1 + x_2) - \sin(3x_1 + 2x_2). \end{cases}$$

geëlimineerde frequenties:	(0,0,(0))* (0,0,(0))	(1,3,(0))* (1,2,(0))	(1,1,(1))* (1,1,(1))	(3,0,(4))* (2,0,(3))
$cd(\frac{2\pi}{10}, 0.05, 4)$	0.42	[2.76]	0.51	0.39
$cd(\frac{2\pi}{20}, 0.05, 4)$	1.46	[2.76]	1.58	1.93

De plaatsfout wordt geëlimineerd door de frequenties (1,3,(0))* (1,2,(0)) exact te fitten. Het is dan de tijd fout die alleen aanwezig is.

We merken op dat, bij de plaatsdiscretisatie met een maaswijdte van $\Delta x = 2\pi/10$, er slechts 3.3 respectievelijk 5 roosterpunten per golflengte worden gebruikt voor de tweede Fourier-component. Door de maaswijdte te verkleinen naar $2\pi/20$ is de golf wel goed te discretiseren, (6.6 respectievelijk 10 roosterpunten per golflengte voor de tweede Fourier-component) en zijn de resultaten wel betrouwbaar.

We behandelen daarom alleen de resultaten met een maaswijdte van $2\pi/20$.

Het blijkt dat de eliminatie van (3,0,(4))* (2,0,(3)) beter is dan de eliminatie van (1,1,(1))* (1,1,(1)). Dit komt omdat door de eliminatie van (3,0,(4))* (2,0,(3)) de fout voor de frequenties 1*1 ook enigszins verkleind wordt.

We voegen nu een derde Fourier-component toe aan de oplossing (7.6):

$$w(t, x) = \sin(2t + x_1 + x_2) + \frac{1}{5} \cos(5t + 4x_1 + 2x_2) - \frac{1}{10} \sin(7t + 4x_1 + 3x_2). \quad (7.7)$$

Tabel 7.7 toont het probleem met als exacte oplossing (7.7).

Tabel 7.7.

$$A = B = 1, C = 2, g = 0,$$

$$\begin{cases} w(0, x) = \sin(x_1 + x_2) + \frac{1}{5} \cos(3x_1 + 2x_2) - \frac{1}{10} \sin(4x_1 + 3x_2) \\ w_t(0, x) = 2 \cos(x_1 + x_2) - \sin(3x_1 + 2x_2) - \frac{7}{10} \cos(4x_1 + 3x_2). \end{cases}$$

geëlimineerde frequenties	(0,0,(0))* (0,0,(0))	(1,3,(4))* (1,2,(3))	(1,3,(0))* (1,2,(0))	(1,4,(0))* (1,3,(0))	(3,4,(0))* (2,3,(0))
$cd(\frac{2\pi}{20}, 0.05, 4)$	0.96	1.50	1.43	1.52	0.83

Omdat $A + B = C$ zou men verwachten dat de invloed van de discretisatie van $\partial^2/\partial x_1 \partial x_2$ even groot is als die van $\partial^2/\partial x_1^2$ en $\partial^2/\partial x_2^2$ samen. Maar $\partial^2/\partial x_1 \partial x_2$ is veel moeilijker te discretiseren omdat:

- i) de roosterpunten verder uiteen liggen,
- ii) er meer nodig zijn en
- iii) omdat er maar twee frequenties in elke richting kunnen worden geëlimineerd.

We gaan er daarom vanuit dat de discretisatie van $\partial^2/\partial x_1 \partial x_2$ de overheersende rol speelt in de totale plaatsdiscretisatie.

Dit is dan ook de reden dat de poging tot de eliminatie van de drie frequenties in beide richtingen minder effect heeft dan in het voorgaande probleem, waar twee frequenties in elke richting werden geëlimineerd.

Tevens verklaart het waarom de eliminaties $(1,3,4)*(1,2,3)$, $(1,3,0)*(1,2,0)$ en $(1,4,0)*(1,3,0)$ ongeveer dezelfde nauwkeurigheid bereiken.

De eliminatie van $(1,4,0)*(1,3,0)$ komt er het best af omdat de frequenties $3*2$ worden gedempt.

De resultaten bij de eliminatie $(3,4,0)*(2,3,0)$ laten duidelijk zien dat de eerste Fourier-component de grootste invloed heeft in de oplossing.

7.5. EEN NIET-LINEAIR PROBLEEM

We bekijken het niet-lineaire probleem uit Tabel 7.8, de exacte oplossing van dit probleem is

$$w(t, x) = \sin(2t + x_1 + x_2) + \frac{1}{2} \cos(5t + 3x_1 + 2x_2) + e \cos(5t + 2x_1 + 3x_2). \quad (7.8)$$

Tabel 7.8.

$$A = B = w^2(x, t), \quad C = 2w^2(x, t),$$

$$g = (w^2 - 1)[4 \sin(2t + x_1 + x_2) + \frac{25}{2} \cos(5t + 3x_1 + 2x_2) + 25e \cos(5t + 2x_1 + 3x_2)].$$

$$\begin{cases} w(0, x) = \sin(x_1 + x_2) + \frac{1}{2} \cos(3x_1 + 2x_2) + e \cos(2x_1 + 3x_2) \\ w_t(0, x) = 2 \cos(x_1 + x_2) - \frac{5}{2} \sin(3x_1 + 2x_2) - 5e \sin(2x_1 + 3x_2). \end{cases}$$

geëlimineerde frequenties	$(0,0,0)^*$ $(0,0,0)$	$(1,3,0)^*$ $(1,2,0)$	$(1,3,2)^*$ $(1,2,3)$	$(1.05,3.15,(2.1))^*$ $(1.05,2.1,(3.15))$	$(1.1,3.3,(2.2))^*$ $(1.1,2.2,(3.3))$
$e=0$; $cd(\frac{2\pi}{15}, 0.1, 4)$	-0.31	(1.76)	(1.76)	0.66	0.33
$e=0.04$; $cd(\frac{2\pi}{15}, 0.1, 4)$	-0.34	1.20	1.32	0.64	0.32
$e=0.1$; $cd(\frac{2\pi}{15}, 0.1, 4)$	-0.32	0.76	0.88	0.60	0.29
$e=0.5$; $cd(\frac{2\pi}{15}, 0.1, 4)$	-0.31	0.21	0.38	0.32	0.13

Deze Tabel illustreert:

- i) de overheersende rol van de differentie-operator $D_{1,2}^{(2)}(1.2')$. Wat blijkt uit de kolom behorende bij $(1,3,(2))*(1,2,(3))$ waar de cd-waarden nauwelijks beter zijn dan in de kolom $(1,3,(0))*(1,2,(0))$, waar de frequenties van de derde Fourier-component niet worden gefit. (Zie ook tweede deel sectie 7.4)
- ii) de gevoeligheid, van de eliminatie-methode, voor de aanwezigheid van een, in meer of mindere mate dominerende, derde Fourier-component. Terwijl de conventionele methode ongevoelig blijkt.
- iii) dat, de eliminatie-methode ook van waarde is voor niet-lineaire problemen. Dit blijkt uit de winst die nog behaald wordt, ten opzichte van het conventionele geval, wanneer slechts schattingen (hier 5% respectievelijk 10%) van de exacte frequenties bekend zijn.

8. CONCLUSIE

Uit de experimenten blijkt dat, wanneer de oplossing uit slechts enkele dominerende Fourier-componenten bestaat, de vijfpunts-lijn discretisatie (3.13) van $\partial^2/\partial x_n^2, n=1,2$, en de vijfentwintigpunts discretisatie (5.6) van $\partial^2/\partial x_1 \partial x_2$ profiteren van goede schattingen van de frequenties.

Verder blijkt dat zowel lineaire problemen als niet-lineaire problemen voordeel halen uit de methode van frequentie eliminatie. Hierbij moeten we ons realiseren dat de winst met te verwaarlozen extra kosten behaald wordt.

APPENDIX 1

Bewijs van stelling 1.1.

Aangezien

$$[D_1^{(2)} - \frac{\partial^2}{\partial x_1^2}]w = [(\Psi_1(\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}, \Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}) - 1) \frac{\partial^2}{\partial x_1^2}]w,$$

is $D_1^{(2)}$ p -de orde nauwkeurig als geldt dat

$$\Psi_1(\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}, \Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}) = 1 + O(\Delta^p x_1). \quad (A.1)$$

We ontwikkelen Ψ_1 in een Taylor-reeks en vinden

$$\begin{aligned} \Psi_1(u, v) &= 2 \sum_{j,l} \xi_j^{(l)} \frac{\cosh(ju)}{u^2} \cosh(lv) \\ &= \frac{2}{u^2} \sum_{j,l} \xi_j^{(l)} \left\{ 1 + \frac{(ju)^2}{2!} + \frac{(ju)^4}{4!} + \frac{(ju)^6}{6!} + O(u^8) \right\} \\ &\quad \left\{ 1 + \frac{(lv)^2}{2!} + \frac{(lv)^4}{4!} + \frac{(lv)^6}{6!} + O(v^8) \right\} \\ &= \sum_{j,l} \left\{ \frac{2\xi_j^{(l)}}{u^2} + j^2 \xi_j^{(l)} + l^2 \xi_j^{(l)} \left(\frac{v}{u}\right)^2 + \frac{j^4 \xi_j^{(l)}}{12} u^2 + \frac{j^2 l^2 \xi_j^{(l)}}{2} v^2 + \frac{l^4 \xi_j^{(l)}}{12} \left(\frac{v^2}{u}\right)^2 \right. \\ &\quad + \frac{j^6 \xi_j^{(l)}}{360} u^4 + \frac{j^2 l^4 \xi_j^{(l)}}{24} v^4 + \frac{j^4 l^2 \xi_j^{(l)}}{24} (uv)^2 + \frac{l^6 \xi_j^{(l)}}{360} \left(\frac{v^3}{u}\right)^2 \\ &\quad \left. + O(u^6 + u^4 v^2 + u^2 v^4 + v^6 + v^8 / u^2) \right\} \end{aligned} \quad (A.2)$$

met $u = \Delta x_1 \partial / \partial x_1$ en $v = \Delta x_2 \partial / \partial x_2$.Wanneer $\Delta x_1 = e \Delta x_2$, $e = \text{constant}$ volgt uit (A.1) en (A.2) dat de differentie-operator $D_1^{(2)}$ tweede-orde nauwkeurig is als geldt:

$$\begin{aligned} \sum_{j,l} \xi_j^{(l)} &= O(\Delta^4 x_1), \\ \sum_{j,l} j^2 \xi_j^{(l)} &= 1 + O(\Delta^2 x_1), \\ \sum_{j,l} l^2 \xi_j^{(l)} &= O(\Delta^2 x_1), \end{aligned}$$

en vierde-orde nauwkeurig als geldt:

$$\begin{aligned} \sum_{j,l} \xi_j^{(l)} &= O(\Delta^6 x_1), \quad \sum_{j,l} j^2 \xi_j^{(l)} = 1 + O(\Delta^4 x_1), \\ \sum_{j,l} l^2 \xi_j^{(l)} &= O(\Delta^4 x_1), \quad \sum_{j,l} j^4 \xi_j^{(l)} = O(\Delta^2 x_1), \\ \sum_{j,l} j^2 l^2 \xi_j^{(l)} &= O(\Delta^2 x_1), \quad \sum_{j,l} l^4 \xi_j^{(l)} = O(\Delta^2 x_1). \end{aligned}$$

Een analoge afleiding geldt voor de functie Ψ_2 . $\square$

APPENDIX 2

Bewijs van stelling 1.2.

In het geval van de differentie-operator $D_{1,2}^{(2)}$ is het analogon van (A.1):

$$\Phi(\Delta x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}, \Delta x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}) = 1 + 0(\Delta^p x_1), \quad (\text{A.3})$$

waarbij weer $\Delta x_1 = e \Delta x_2$, $e = \text{constant}$ is genomen. De Taylor-ontwikkeling van Φ , met $u = \Delta x_1 \partial / \partial x_1$ en $v = \Delta x_2 \partial / \partial x_2$ wordt gegeven door:

$$\begin{aligned} \phi(u, v) &= 2 \sum_{j,l} \xi_j^{(l)} \frac{\sinh(ju)}{u} \frac{\sinh(lv)}{v} \\ &= 2 \sum_{j,l} \xi_j^{(l)} \left\{ j + \frac{j^3}{3!} u^2 + \frac{j^5}{5!} u^4 + \frac{j^7}{7!} u^6 + 0(u^8) \right\} \\ &\quad \cdot \left\{ l + \frac{l^3}{3!} v^2 + \frac{l^5}{5!} v^4 + \frac{l^7}{7!} v^6 + 0(v^8) \right\} \\ &= \sum_{j,l} \xi_j^{(l)} \left\{ 2jl + \frac{j l^3}{3} v^2 + \frac{l j^3}{3} u^2 + \frac{j l^5}{60} v^4 + \frac{l j^5}{60} u^4 + \frac{j^3 l^3}{9} u^2 v^2 \right. \\ &\quad + \frac{j l^7}{2520} v^6 + \frac{l j^7}{2520} u^6 + \frac{j^3 l^5}{180} u^2 v^4 + \frac{l^3 j^5}{180} u^4 v^2 \\ &\quad \left. + 0(u^8 + u^6 v^2 + u^4 v^4 + u^2 v^6 + v^8) \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Uit (A.3) en (A.4) volgt dat de differentie-operator $D_{1,2}^{(2)}$ tweede-orde nauwkeurig is als geldt:

$$\sum_{j,l} 2jl \xi_j^{(l)} = 1 + 0(\Delta^2 x_1),$$

en vierde-orde nauwkeurig als geldt:

$$\sum_{j,l} 2jl \xi_j^{(l)} = 1 + 0(\Delta^4 x_1),$$

$$\sum_{j,l} j l^3 \xi_j^{(l)} = 0(\Delta^2 x_1),$$

$$\sum_{j,l} l j^3 \xi_j^{(l)} = 0(\Delta^2 x_1). \quad \square$$

REFERENTIES

- [1] P.J. VAN DER HOUWEN, *Spatial discretization of hyperbolic equations with periodic solutions*. Report NM-R8514, Centre for Mathematics and Computer Science, Amsterdam, 1985.
- [2] P.J. VAN DER HOUWEN & B.P. SOMMEIJER, *Explicit Runge-Kutta (-Nyström) methods with reduced phase errors for computing oscillating solutions*. Report NM-R8504, Centre for Mathematics and Computer Science, Amsterdam, 1985.