5. Παραγώγιση

Η διαδικασία της υπολογιστικής επίλυσης συνήθων και μερικών διαφορικών εξισώσεων προϋποθέτει την προσέγγιση της εξαρτημένης μεταβλητής και των παραγώγων της στους κόμβους του πλέγματος.

Ειδικά, η προσέγγιση των παραγώγων σε κάθε κόμβο του πλέγματος προϋποθέτει την διατύπωση εκφράσεων που προσεγγίζουν την παράγωγο με τιμές της εξαρτημένης μεταβλητής στον συγκεκριμένο και γειτονικούς κόμβους.

Οι εκφράσεις αυτές ονομάζονται εκφράσεις **πεπερασμένων διαφορών** και προκύπτουν με διάφορους τρόπους μεταξύ των οποίων θα μελετηθούν οι εξής δύο:

- **Σειρά Taylor**
- **Πολυωνυμική παρεμβολή**

5.1 Σειρά Taylor

Θεωρώντας ότι η συνάρτηση $u(x)$ είναι αναλυτική, η $u(x+\Delta x)$ αναπτύσσεται σε σειρά Taylor

$$u(x+\Delta x) = u(x) + \Delta x u_x + \frac{\Delta x^2}{2!}u_{xx} + \frac{\Delta x^3}{3!}u_{xxx} + \ldots + \frac{\Delta x^n}{n!}\frac{\partial^n u(x)}{\partial x^n} + R_{n+1}$$

όπου το υπόλοιπο $R_{n+1} = \dfrac{1}{(n+1)!}\left(\Delta x \dfrac{\partial}{\partial x}\right)^{n+1} u(x+\xi\Delta x), \quad 0<\xi<1.$

Είναι επομένως τάξης $n+1$ δηλαδή $R_{n+1} = O\left(|\Delta x|^{n+1}\right)$.

Λύνοντας τη γενική έκφραση ως προς την πρώτη παράγωγο u_x και απαλείφοντας όρους τάξης ίσης ή μεγαλύτερης του δύο προκύπτει η σχέση

$$u_x = \frac{u(x+\Delta x) - u(x)}{\Delta x} + O(\Delta x).$$

Η παραπάνω προσεγγιστική αλγεβρική έκφραση της $1^{ης}$ παραγώγου της συνάρτησης $u(x)$ ως προς x είναι $1^{ης}$ τάξης αφού το σφάλμα αποκοπής είναι ανάλογο της απόστασης Δx.

Ονομάζεται: **<u>πρόδρομη</u> έκφραση πεπερασμένων διαφορών <u>$1^{ης}$</u> τάξης της $1^{ης}$ παραγώγου**

Θεωρώντας στη συνέχεια το ανάπτυγμα Taylor της $u(x-\Delta x)$ έχουμε

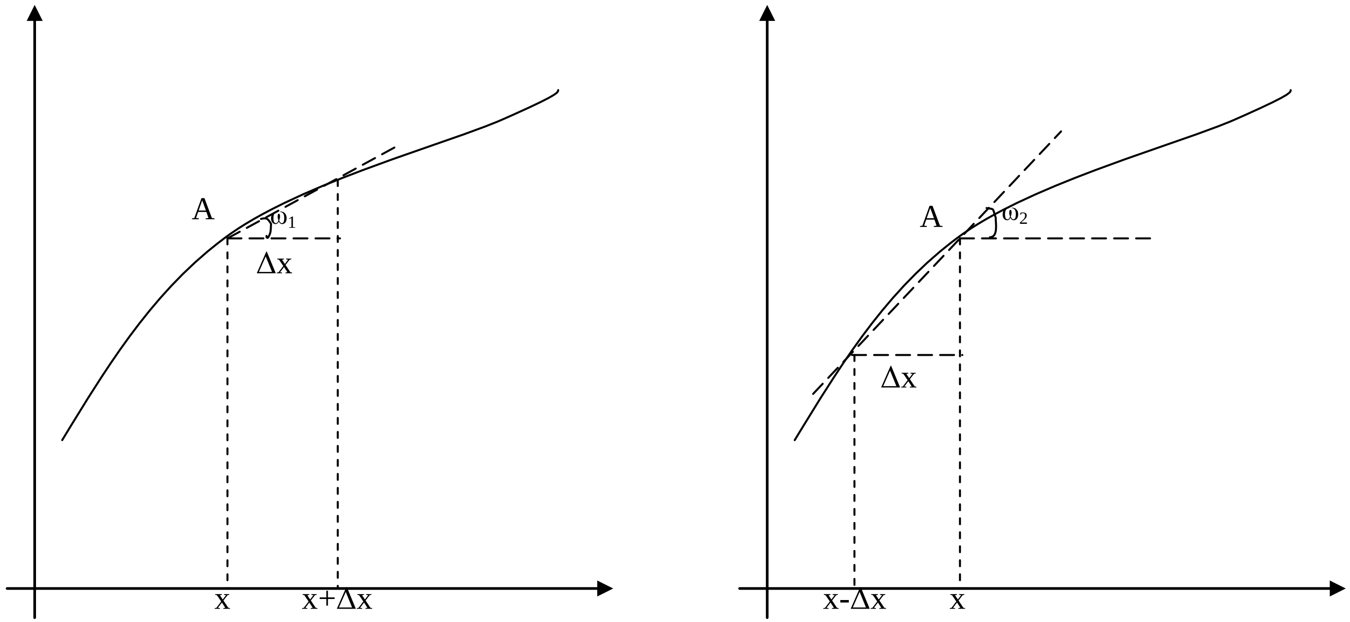
$$u(x-\Delta x)=u(x)-\Delta x u_x+\frac{\Delta x^2}{2!}u_{xx}-\frac{\Delta x^3}{3!}u_{xxx}+\ldots,$$

Λύνοντας και πάλι ως προς u_x και απαλείφοντας όρους τάξης ίσης ή μεγαλύτερης του δύο προκύπτει η σχέση

$$u_x=\frac{u(x)-u(x-\Delta x)}{\Delta x}+O(\Delta x)$$

Ονομάζεται: **<u>ανάδρομη</u> έκφραση πεπερασμένων διαφορών <u>1</u>$^{\text{ης}}$ τάξης της 1$^{\text{ης}}$ παραγώγου**

Η διαφορά ανάμεσα στις δύο εκφράσεις πεπερασμένων διαφορών είναι ότι η 1$^{\text{η}}$ παράγωγος ης $u(x)$ στη πρόδρομη προσεγγίζεται από τις τιμές στα σημεία x και $x+\Delta x$, ενώ στην ανάδρομη στα σημεία x και $x-\Delta x$.



Γραφική απεικόνιση πρόδρομης (αριστερά) και ανάδρομης (δεξιά) προσέγγισης της παραγώγου du/dx στο σημείο A.

Με κατάλληλη αλγεβρική επεξεργασία των αναπτυγμάτων Taylor προκύπτουν διαφορετικές εκφράσεις πεπερασμένων διαφορών για την πρώτη παράγωγο du/dx.

Για παράδειγμα, αφαιρώντας τα αναπτύγματα Taylor των ποσοτήτων $u(x \pm \Delta x)$ και λύνοντας την εξίσωση που προκύπτει ως προς την πρώτη παράγωγο προκύπτει

$$u_x = \frac{u(x+\Delta x) - u(x-\Delta x)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$

Ονομάζεται: **<u>κεντρώα</u> έκφραση πεπερασμένων διαφορών <u>2</u>^{ης} τάξης της 1^{ης} παραγώγου**

Παρατηρούμε ότι το σφάλμα αποκοπής στην έκφραση είναι 2^{ης} τάξης που σημαίνει ότι η ακρίβεια της προσέγγισης της du/dx είναι καλύτερη σε σχέση με την ακρίβεια των εκφράσεων 1^{ης} τάξης.

Η προσέγγιση παραγώγων υψηλότερης τάξης γίνεται με αντίστοιχη μεθοδολογία.

Για παράδειγμα, προσθέτοντας τα αναπτύγματα Taylor των ποσοτήτων $u\left(x \pm \Delta x\right)$

$$u\left(x+\Delta x\right)=u\left(x\right)+\Delta x u_x+\frac{\Delta x^2}{2!}u_{xx}+\frac{\Delta x^3}{3!}u_{xxx}+\frac{\Delta x^4}{4!}u_{xxxx}+\ldots,$$

$$u\left(x-\Delta x\right)=u\left(x\right)-\Delta x u_x+\frac{\Delta x^2}{2!}u_{xx}-\frac{\Delta x^3}{3!}u_{xxx}+\frac{\Delta x^4}{4!}u_{xxxx}+\ldots,$$

και διατηρώντας όρους μέχρι και τέταρτης τάξης προκύπτει

$$u\left(x+\Delta x\right)+u\left(x-\Delta x\right)=2u\left(x\right)+\Delta x^2 u_{xx}+O\left(\Delta x^4\right)\Rightarrow$$

$$u_{xx}=\frac{u\left(x+\Delta x\right)-2u\left(x\right)+u\left(x-\Delta x\right)}{\Delta x^2}+O\left(\Delta x^2\right).$$

Ονομάζεται: **<u>κεντρώα</u> έκφραση πεπερασμένων διαφορών <u>2</u>$^{\text{ης}}$ τάξης της 2$^{\text{ης}}$ παραγώγου**

Επίσης, συνδυάζοντας τα αναπτύγματα τα αναπτύγματα Taylor των ποσοτήτων $u\left(x \pm \Delta x\right)$ με τα αναπτύγματα

$$u\left(x \pm 2\Delta x\right) = u\left(x\right) \pm 2\Delta x u_x + \frac{\left(2\Delta x\right)^2}{2!} u_{xx} \pm \frac{\left(2\Delta x\right)^3}{3!} u_{xxx} + \ldots$$

και διατηρώντας όρους μέχρι και τρίτης τάξης διατυπώνονται οι σχέσεις:

πρόδρομη έκφραση πεπερασμένων διαφορών $1^{ης}$ τάξης της $2^{ης}$ παραγώγου

$$u_{xx} = \frac{u\left(x + 2\Delta x\right) - 2u\left(x + \Delta x\right) + u\left(x\right)}{\Delta x^2} + O\left(\Delta x\right)$$

ανάδρομη έκφραση πεπερασμένων διαφορών $1^{ης}$ τάξης της $2^{ης}$ παραγώγου

$$u_{xx} = \frac{u\left(x\right) - 2u\left(x - \Delta x\right) + u\left(x - 2\Delta x\right)}{\Delta x^2} + O\left(\Delta x\right)$$

Είναι προφανές ότι η **ακρίβεια** των προσεγγιστικών εκφράσεων πεπερασμένων διαφορών βελτιώνεται α) **μειώνοντας την απόσταση** Δx και β) θεωρώντας **περισσότερους όρους** στα αναπτύγματα Taylor

Και στις δύο περιπτώσεις **αυξάνεται το υπολογιστικό κόστος** αφού εμπλέκονται περισσότερα σημεία και αυξάνει ο αριθμός των πράξεων.

Η επιλογή του τύπου της έκφρασης πεπερασμένων διαφορών εξαρτάται και συνδέεται άμεσα με τη φυσική και τον τύπο του προβλήματος που εξετάζεται.

Στη περίπτωση μερικών διαφορικών εξισώσεων, η προσέγγιση των **μερικών παραγώγων** γίνεται με ανάλογο τρόπο με βάση τη σειρά Taylor δύο ή περισσοτέρων μεταβλητών.

Στην περίπτωση των δυο μεταβλητών η σειρά Taylor είναι:

$$u(x+\Delta x, y+\Delta y) = u(x,y) + \left(\Delta x \frac{\partial}{\partial x} + \Delta y \frac{\partial}{\partial y}\right) u(x,y) + \frac{1}{2!}\left(\Delta x \frac{\partial}{\partial x} + \Delta y \frac{\partial}{\partial y}\right)^2 u(x,y) + \ldots +$$

$$+\frac{1}{(n-1)!}\left(\Delta x \frac{\partial}{\partial x} + \Delta y \frac{\partial}{\partial y}\right)^{n-1} u(x,y) + R_n$$

όπου το υπόλοιπο

$$R_n = \frac{1}{n!}\left(\Delta x \frac{\partial}{\partial x} + \Delta y \frac{\partial}{\partial y}\right)^n u(x+\xi\Delta x, y+\eta\Delta y), \qquad 0<\xi,\eta<1.$$

Το σφάλμα αποκοπής είναι τάξης n, δηλαδή $R_n = O\left(\left[|\Delta x| + |\Delta y|\right]^n\right)$.

Έστω ότι ζητείται μια έκφραση πεπερασμένων διαφορών της μικτής παραγωγού u_{xy}.

Προσθαφαιρώντας κατάλληλα τα τέσσερα αναπτύγματα Taylor

$$u\left(x \pm \Delta x, y \pm \Delta y\right) = u\left(x, y\right) + \left(\pm \Delta x \frac{\partial}{\partial x} \pm \Delta y \frac{\partial}{\partial y}\right)\left(x, y\right) + \frac{1}{2!}\left(\pm \Delta x \frac{\partial}{\partial x} \pm \Delta y \frac{\partial}{\partial y}\right)^2 u\left(x, y\right) +$$

$$+\frac{1}{3!}\left(\pm \Delta x \frac{\partial}{\partial x} \pm \Delta y \frac{\partial}{\partial y}\right)^3 u\left(x, y\right) + \frac{1}{4!}\left(\pm \Delta x \frac{\partial}{\partial x} \pm \Delta y \frac{\partial}{\partial y}\right)^4 u\left(x, y\right)$$

προκύπτει **η κεντρώα έκφραση πεπερασμένων διαφορών 2^{ης} τάξης για τη μικτή παράγωγο**

$$u_{xy} = \frac{1}{4\Delta x \Delta y}\Big[u\left(x + \Delta x, y + \Delta y\right) - u\left(x - \Delta x, y + \Delta y\right) -$$

$$-u\left(x + \Delta x, y - \Delta y\right) + u\left(x - \Delta x, y - \Delta y\right)\Big] + O\left(\left[\left|\Delta x\right| + \left|\Delta y\right|\right]^2\right)$$

Οι απλούστερες εκφράσεις πεπερασμένων διαφορών είναι οι πρόδρομες, ανάδρομες και κεντρώες 1^{ης} και 2^{ης} τάξης.

Σε όλες τις περιπτώσεις οι παράγωγοι της εξαρτημένης μεταβλητής σε ένα σημείο διατυπώνονται σε σχέση με τις τιμές της εξαρτημένης μεταβλητής στο σημείο αυτό και στα αμέσως γειτονικά του.

Εκφράσεις πεπερασμένων διαφορών υψηλότερης ακρίβειας είναι αναγκαίες σε εξειδικευμένα προβλήματα και απαιτούν περισσότερο υπολογιστικό χρόνο αφού εμπλέκονται περισσότερα σημεία και επομένως περισσότερες αριθμητικές πράξεις.

Η αριθμητική προσέγγιση των παραγώγων ονομάζεται **αριθμητική παραγώγιση**.

Παρατίθενται εκφράσεις πεπερασμένων διαφορών 3^{ης} και 4^{ης} τάξης που προσεγγίζουν μερικές παραγώγους 1^{ης}, 2^{ης}, 3^{ης} και 4^{ης} τάξης.

Για λόγους συντομίας εισάγονται οι συμβολισμοί:

$$u(x,y) = u_{i,j} \qquad \text{και} \qquad u(x \pm m\Delta x, y \pm n\Delta y) = u_{i\pm m, j\pm n} \qquad \text{με} \qquad \Delta x = \Delta y = h$$

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{i,j} = \frac{1}{12h}\left(-u_{i+2,j} + 8u_{i+1,j} - 8u_{i-1,j} + u_{i-2,j}\right) + O\left(h^4\right)$$

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{i,j} = \frac{1}{h^2}\left(-u_{i+3,j} + 4u_{i+2,j} - 5u_{i+1,j} + 2u_{i,j}\right) + O\left(h^2\right)$$

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{i,j} = \frac{1}{h^2}\left(2u_{i,j} - 5u_{i-1,j} + 4u_{i-2,j} - u_{i-3,j}\right) + O\left(h^2\right)$$

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{i,j} = \frac{1}{12h^2}\left(-u_{i+2,j} + 16u_{i+1,j} - 30u_{i,j} + 16u_{i-1,j} - u_{i-2,j}\right) + O\left(h^4\right)$$

$$\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{i,j} = \frac{1}{2h^3}\left(u_{i+2,j} - 2u_{i+1,j} + 2u_{i-1,j} - u_{i-2,j}\right) + O\left(h^2\right)$$

$$\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{i,j} = \frac{1}{2h^3}\left(-3u_{i+4,j} + 14u_{i+3,j} - 24u_{i+2,j} + 18u_{i+1,j} - 5u_{i,j}\right) + O\left(h^2\right)$$

$$\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{i,j} = \frac{1}{2h^3}\left(5u_{i,j} - 18u_{i-1,j} + 24u_{i-2,j} - 14u_{i-3,j} + 3u_{i-4,j}\right) + O\left(h^2\right)$$

$$\left.\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right|_{i,j} = \frac{1}{h^4}\left(u_{i+2,j} - 4u_{i+1,j} + 6u_{i,j} - 4u_{i-1,j} + u_{i-2,j}\right) + O\left(h^2\right)$$

Παρατίθενται εκφράσεις πεπερασμένων διαφορών για την μικτή παράγωγο u_{xy} για $\Delta x \neq \Delta y$:

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right|_{i,j} = \frac{1}{\Delta x}\left(\frac{u_{i+1,j} - u_{i+1,j-1}}{\Delta y} - \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta y}\right) + O\left(\Delta x, \Delta y\right)$$

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right|_{i,j} = \frac{1}{\Delta x}\left(\frac{u_{i,j-1} - u_{i,j}}{\Delta y} - \frac{u_{i-1,j+1} - u_{i-1,j}}{\Delta y}\right) + O\left(\Delta x, \Delta y\right)$$

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right|_{i,j} = \frac{1}{\Delta x}\left(\frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta y} - \frac{u_{i-1,j+1} - u_{i-1,j-1}}{\Delta y}\right) + O\left(\Delta x, \Delta y\right)$$

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right|_{i,j} = \frac{1}{\Delta x}\left(\frac{u_{i+1,j+1} - u_{i,j-1}}{\Delta y} - \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta y}\right) + O\left(\Delta x, \Delta y\right)$$

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right|_{i,j} = \frac{1}{\Delta x}\left(\frac{u_{i+1,j+1} - u_{i+1,j-1}}{2\Delta y} - \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2\Delta y}\right) + O\left(\Delta x, \Delta y^2\right)$$

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right|_{i,j} = \frac{1}{\Delta x}\left(\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2\Delta y} - \frac{u_{i-1,j+1} - u_{i-1,j-1}}{2\Delta y}\right) + O\left(\Delta x, \Delta y^2\right)$$

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right|_{i,j} = \frac{1}{2\Delta x}\left(\frac{u_{i+1,j+1} - u_{i+1,j}}{\Delta y} - \frac{u_{i-1,j+1} - u_{i-1,j}}{\Delta y}\right) + O\left(\Delta x^2, \Delta y\right)$$

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right|_{i,j} = \frac{1}{2\Delta x}\left(\frac{u_{i+1,j} - u_{i+1,j-1}}{\Delta y} - \frac{u_{i-1,j} - u_{i-1,j-1}}{\Delta y}\right) + O\left(\Delta x^2, \Delta y\right)$$

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right|_{i,j} = \frac{1}{2\Delta x}\left(\frac{u_{i+1,j+1} - u_{i+1,j-1}}{2\Delta y} - \frac{u_{i-1,j+1} - u_{i-1,j-1}}{2\Delta y}\right) + O\left(\Delta x^2, \Delta y^2\right)$$

Παράδειγμα:

Διατύπωση ανάδρομης έκφρασης 2ης τάξης της παραγώγου f_{xxx} με σειρά Taylor:

$$f_{i-1} = f_i - h\left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_i + \frac{h^2}{2}\left.\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right|_i - \frac{h^3}{6}\left.\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right|_i + \frac{h^4}{24}\left.\frac{\partial^4 f}{\partial x^4}\right|_i + O\left(h^5\right)$$

$$f_{i-2} = f_i - 2h\left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_i + \frac{(2h)^2}{2}\left.\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right|_i - \frac{(2h)^3}{6}\left.\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right|_i + \frac{(2h)^4}{24}\left.\frac{\partial^4 f}{\partial x^4}\right|_i + O\left(h^5\right)$$

$$f_{i-3} = f_i - 3h\left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_i + \frac{(3h)^2}{2}\left.\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right|_i - \frac{(3h)^3}{6}\left.\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right|_i + \frac{(3h)^4}{24}\left.\frac{\partial^4 f}{\partial x^4}\right|_i + O\left(h^5\right)$$

$$f_{i-4} = f_i - 4h\left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_i + \frac{(4h)^2}{2}\left.\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right|_i - \frac{(4h)^3}{6}\left.\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right|_i + \frac{(4h)^4}{24}\left.\frac{\partial^4 f}{\partial x^4}\right|_i + O\left(h^5\right)$$

Πολλαπλασιάζοντας τα αναπτύγματα από το πρώτο προς το τέταρτο με 18, -24, 14 και -3 και προσθέτοντας κατά μέλη τις προκύπτουσες εξισώσεις προκύπτει ότι

$$18f_{i-1} - 24f_{i-2} + 14f_{i-3} - 3f_{i-4} = 5f_i - 2h^3 \left.\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right|_i + O\left(h^5\right) \Rightarrow$$

$$\left.\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right|_i = \frac{5f_i - 18f_{i-1} + 24f_{i-2} - 14f_{i-3} + 3f_{i-4}}{2h^3} + O\left(h^2\right)$$

Παράδειγμα: να αποδειχθεί η έκφραση πεπερασμένων διαφορών

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right|_{i,j} = \frac{1}{\Delta x}\left(\frac{u_{i+1,j} - u_{i+1,j-1}}{\Delta y} - \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta y}\right) + O\left(\Delta x, \Delta y\right)$$

$$u_{i+1,j} = u_{i,j} + \Delta x \left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{i,j} + \frac{\Delta x^2}{2}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{i,j} + O\left(\Delta x^3\right)$$

$$u_{i+1,j-1} = u_{i,j} + \Delta x \left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{i,j} - \Delta y \left.\frac{\partial u}{\partial y}\right|_{i,j} + \frac{\Delta x^2}{2}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{i,j} + \frac{\Delta y^2}{2}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right|_{i,j} + \Delta x \Delta y \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + O\left(\Delta x + \Delta y\right)^3$$

$$u_{i,j-1} = u_{i,j} - \Delta y \left.\frac{\partial u}{\partial y}\right|_{i,j} + \frac{\Delta y^2}{2}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right|_{i,j} + O\left(\Delta y^3\right)$$

$$u_{i+1,j} - u_{i+1,j-1} - u_{i,j} + u_{i,j-1} = \Delta x \Delta y \left.\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right|_{i,j} + O\left(\Delta x + \Delta y\right)^3$$

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i+1,j-1} - u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta x \Delta y} + O\left(\Delta x, \Delta y\right)$$

Σύντομη αναφορά σε μη κανονικά όρια:

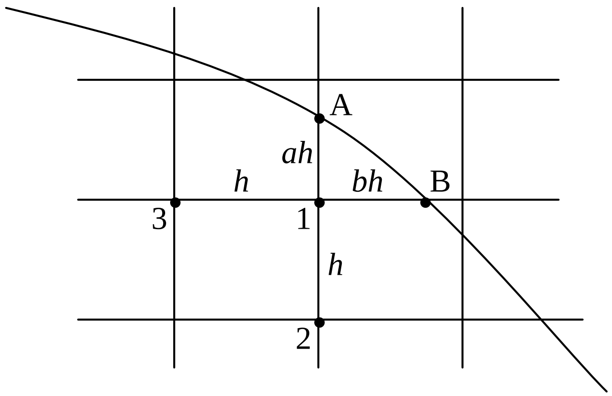
Όταν η γεωμετρία του προβλήματος είναι απλή τότε είναι σχετικά απλό να επιλέξουμε το υπολογιστικό πλέγμα με τρόπο ώστε οι οριακοί κόμβοι του πλέγματος να ευρίσκονται πάνω στο φυσικό όριο του προβλήματος.

Όμως πολλές φορές αυτό δεν είναι εφικτό όπως όταν έχουμε καμπυλόγραμμα φυσικά όρια και χρησιμοποιούμε ορθογώνια πλέγματα. Στην περίπτωση αυτή αναφερόμεθα στα όρια του προβλήματος σαν μη κανονικά όρια.

Το αντικείμενο της ορθολογικής προσαρμογής του πλέγματος στα φυσικά όρια του προβλήματος αποτελεί σύγχρονο πεδίο έρευνας που αντιμετωπίζεται με την εφαρμογή σύνθετων μαθηματικών και υπολογιστικών εργαλείων.

Παρουσιάσουμε μία πολύ απλή μεθοδολογία που μπορεί να καλύψει μερικώς το συγκεκριμένο πρόβλημα.

Έστω ότι ζητείται η υπολογιστική λύση της εξίσωσης Laplace σε ένα χωρίο $\Re$ που περικλείεται από ένα καμπυλόγραμμο όριο Ω με οριακές συνθήκες Dirichlet. Το υπολογιστικό πλέγμα είναι ορθογώνιο. Τμήμα του καμπυλόγραμμου ορίου Ω και του υπολογιστικού πλέγματος φαίνονται στο παρακάτω σχήμα όπου επίσης ορίζονται και τα σημεία τομής του ορίου με το υπολογιστικό πλέγμα.



Καμπυλόγραμμο όριο και ορθογώνιο υπολογιστικό πλέγμα

Παρατηρούμε ότι πάνω στο φυσικό όριο του προβλήματος δεν έχουμε κόμβους. Στην συγκεκριμένη περίπτωση αυτό δεν αποτελεί ιδιαίτερο πρόβλημα αφού οι οριακές συνθήκες είναι τύπου Dirichlet.

Παρατηρούμε όμως επίσης ότι υπάρχουν εσωτερικοί κόμβοι, όπως ο κόμβος 1 που δεν απέχει ίσες αποστάσεις από τα γειτονικά του σημεία.

Στη περίπτωση αυτή η τυπική προσέγγιση των παραγώγων $\partial^2 u / \partial x^2$ και $\partial^2 u / \partial y^2$ στο σημείο 1 γίνεται τροποποιώντας ελαφρώς τη τυπική μεθοδολογία με σειρά Taylor.

Θεωρώντας $\Delta x = \Delta y = h$ και ορίζοντας τις αποστάσεις ανάμεσα στον κόμβο 1 και στους κόμβους A και B με αh και βh αντίστοιχα, όπου $\alpha, \beta < 1$, εφαρμόζονται τα αναπτύγματα Taylor διατηρώντας όρους μέχρι και 2ης τάξης:

$$u_A = u_1 + \alpha h u_y + \frac{(\alpha h)^2}{2} u_{yy} + O\left[h^3\right]$$

$$u_2 = u_1 - h u_y + \frac{(h)^2}{2} u_{yy} + O\left[h^3\right]$$

$$u_B = u_1 + \beta h u_x + \frac{(\beta h)^2}{2} u_{xx} + O\left[h^3\right]$$

$$u_3 = u_1 - h u_x + \frac{(h)^2}{2} u_{xx} + O\left[h^3\right]$$

Συνδυάζοντας τα αναπτύγματα ανά δύο προκύπτουν οι εξής εκφράσεις για τις δεύτερες μερικές παραγώγους:

$$u_A + \alpha u_2 = u_1 + \alpha u_1 + \frac{(\alpha h)^2}{2} u_{yy} + \alpha \frac{(h)^2}{2} u_{yy} + O\left[h^3\right] = (1+\alpha) u_1 + (1+\alpha)\alpha \frac{h^2}{2} u_{yy} + O\left[h^3\right] \Rightarrow$$

$$\Rightarrow u_{yy}\Big|_1 = \frac{2}{h^2} \frac{u_A - (1+\alpha) u_1 + \alpha u_2}{(1+\alpha)\alpha} + O[h]$$

$$u_B + \beta u_3 = u_1 + \beta u_1 + \frac{(\beta h)^2}{2} u_{xx} + \beta \frac{(h)^2}{2} u_{xx} + O\left[h^3\right] = (1+\beta) u_1 + (1+\beta)\beta \frac{h^2}{2} u_{xx} + O\left[h^3\right] \Rightarrow$$

$$\Rightarrow u_{xx}\Big|_1 = \frac{2}{h^2} \frac{u_A - (1+\beta) u_1 + \beta u_2}{(1+\beta)\beta} + O[h]$$

Οι παραπάνω σχέσεις είναι κεντρώες εκφράσεις πεπερασμένων για παραγώγους $2^{ης}$ τάξης με ακρίβεια $1^{ης}$ τάξης και όχι $2^{ης}$ που ισχύει γενικά στις κεντρώες παραγωγίσεις και αυτό επειδή το πλέγμα είναι μη ομοιόμορφο.

Για $\alpha = \beta = 1$ οι παραπάνω σχέσεις ανάγονται στις αντίστοιχες τυπικές εκφράσεις $2^{ης}$ τάξης.

5.2 Πολυώνυμα παρεμβολής

Ο δεύτερος τρόπος προσέγγισης παραγώγων είναι η παρεμβολή της συνάρτησης με ένα πολυώνυμο.

Οι συντελεστές του πολυωνύμου υπολογίζονται από τις τιμές της εξαρτημένης μεταβλητής σε επιλεγμένα σημεία. Ο βαθμός του πολυωνύμου παρεμβολής αντιστοιχεί στην ακριβείας της προκύπτουσας έκφρασης πεπερασμένων διαφορών.

Θεωρώντας, για παράδειγμα, ένα πολυώνυμο παρεμβολής 2^{ου} βαθμού η συνάρτηση $u(x)$ προσεγγίζεται από τη σχέση $u(x) = Ax^2 + Bx + C$.

Για τον υπολογισμό των αγνώστων συντελεστών του πολυωνύμου, επιλέγονται τρία γειτονικά σημεία x, $x+\Delta x$ και $x+2\Delta x$, έτσι ώστε η αρχή των αξόνων να είναι στο σημείο x. Για συντομία τα τρία σημεία, που βρίσκονται στις θέσεις x, $x+\Delta x$ και $x+2\Delta x$ συμβολίζονται με x_i, x_{i+1} και x_{i+2}. Επομένως ισχύει ότι

$$u\left(x_i\right)=u_i=Ax_i^2+Bx_i+C$$
$$u\left(x_{i+1}\right)=u_{i+1}=Ax_{i+1}^2+Bx_{i+1}+C=A\left(x_i+\Delta x\right)^2+B\left(x_i+\Delta x\right)+C$$
$$u\left(x_{i+2}\right)=u_{i+2}=Ax_{i+2}^2+Bx_{i+2}+C=A\left(x_i+2\Delta x\right)^2+B\left(x_i+2\Delta x\right)+C$$

Αφού η αρχή των αξόνων είναι στο σημείο x_i συνεπάγεται $x_i=0$ και τα παραπάνω σύστημα ξαναγράφεται στη μορφή

$$\begin{aligned} u_i &= C \\ u_{i+1} &= A\Delta x^2+B\Delta x+C \\ u_{i+2} &= A4\Delta x^2+B2\Delta x+C \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} A &= \frac{u_{i+2}-2u_{i+1}+u_i}{2\Delta x^2} \\ B &= \frac{-u_{i+2}+4u_{i+1}-3u_i}{2\Delta x} \\ C &= u_i \end{aligned}$$

$$u\left(x\right)=\left[\frac{u_{i+2}-u_{i+1}+u_i}{2\Delta x}\right]x^2+\left[\frac{-u_{i+2}+4u_{i+1}-3u_i}{2\Delta x}\right]x+u_i$$

Η 1^{η} παράγωγος και η 2^{η} παράγωγος προκύπτουν ως εξής:

$$u_x = 2Ax + B \quad \Rightarrow \quad u_x\big|_{x_i} = 2Ax_i + B = B \quad \Rightarrow \quad u_x\big|_{x_i} = \frac{-u_{i+2} + 4u_{i+1} - 3u_i}{2\Delta x}$$

Πρόδρομη έκφραση πεπερασμένων διαφορών 2^{ης} τάξης της 1^{ης} παραγώγου

$$u_{xx} = 2A \quad \Rightarrow \quad u_{xx}\big|_{x_i} = 2A \quad \Rightarrow \quad u_{xx}\big|_{x_i} = \frac{u_{i+2} - 2u_{i+1} + u_i}{\Delta x^2}$$

Πρόδρομη έκφραση πεπερασμένων διαφορών 1^{ης} τάξης της 2^{ης} παραγώγου

Ακριβώς οι ίδιες εκφράσεις μπορούν να διατυπωθούν χρησιμοποιώντας την μεθοδολογία Taylor.

Πρόδρομες εκφράσεις πεπερασμένων διαφορών, με τη μεθοδολογία των πολυωνύμων παρεμβολής, προκύπτουν αρκετά εύκολα επιλέγοντας τα σημεία x, $x-\Delta x$ και $x-2\Delta x$ (ή x_i, x_{i-1} και x_{i-2}) και θέτοντας το σημείο x_i στην αρχή των αξόνων.

Ανάλογα πράττουμε και στη περίπτωση **κεντρώων εκφράσεων πεπερασμένων διαφορών**. Τώρα τα τρία σημεία παρεμβολής είναι τα x_i, $x_i \pm \Delta x \equiv x_{i\pm1}$ με την αρχή των αξόνων να ορίζεται και πάλι στο σημείο x_i.

Η μεθοδολογία γενικεύεται για περισσότερα από 3 σημεία.

Το κύριο πλεονέκτημα της πολυωνυμικής παρεμβολής σε σχέση με τη σειρά Taylor είναι ότι εφαρμόζεται ευκολότερα σε μη ισαπέχοντα σημεία x_i.

Παράδειγμα: Διατύπωση κεντρώας έκφρασης πεπερασμένων διαφορών της παραγώγου f_{xx} με πολυωνυμική παρεμβολή σε μη ισαπέχοντα σημεία:

Προσεγγίζεται η f με πολυώνυμο δευτέρου βαθμού $P_2 = ax^2 + bx + c$ και η αρχή των αξόνων τοποθετείται στο σημείο x_i με τα σημεία x_{i-1} και x_{i+1} να βρίσκονται σε απόσταση $-h$ και kh αντίστοιχα.

$$\left.\begin{aligned} &P_2(x_{i-1} = -h) = ah^2 - bh + c = f_{i-1} \\ &P_2(x_i = 0) = c = f_i \\ &P_2(x_{i+1} = kh) = a\left(kh\right)^2 + b\left(kh\right) + c = f_{i+1} \end{aligned}\right\} \left.\begin{aligned} f_{i-1} &= ah^2 - bh + f_i \\ f_{i+1} &= ak^2h^2 + bkh + f_i \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

$$kf_{i-1} - kf_i + f_{i+1} - f_i = akh^2 + ak^2h^2 \Rightarrow kf_{i-1} - \left(1+k\right) f_i + f_{i+1} = ak\left(1+k\right)h^2 \Rightarrow$$

$$2a = \left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_i = 2\frac{f_{i+1} - (1+k) f_i + kf_{i-1}}{k(1+k)h^2}$$

Παράδειγμα: Να αποδειχθεί με πολυωνυμική παρεμβολή η έκφραση πεπερασμένων διαφορών:

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i+1,j-1} - u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta x \Delta y} + O(\Delta x, \Delta y)$$

$$\boxed{P_2(x,y) = Ax^2 + By^2 + Cxy + Dx + Ey + F} \Rightarrow \frac{\partial^2 P_2}{\partial x \partial y} = C$$

$$(x_i, y_j) = (0,0),\ (x_{i+1}, y_j) = (\Delta x, 0),\ (x_i, y_{j-1}) = (0, -\Delta y),\ (x_{i+1}, y_{j-1}) = (\Delta x, -\Delta y)$$

$$P_2(0,0) = F = u_{i,j}$$

$$P_2(\Delta x, 0) = A\Delta x^2 + D\Delta x + F = u_{i+1,j}$$

$$P_2(0, -\Delta y) = B\Delta y^2 - E\Delta y + F = u_{i,j-1}$$

$$P_2(\Delta x, -\Delta y) = A\Delta x^2 + B\Delta y^2 - C\Delta x\Delta y + D\Delta x - E\Delta y + F = u_{i+1,j-1}$$

$$C\Delta x\Delta y + F = u_{i+1,j} + u_{i,j-1} - u_{i+1,j-1} \Rightarrow \boxed{C = \left.\frac{\partial^2 P}{\partial x \partial y}\right|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i+1,j-1} - u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta x \Delta y}}$$

Ασκήσεις:

1. Έστω τα μη ισαπέχοντα σημεία x_0, x_1, x_2 (επί του άξονα x) όπου $x_1 - x_0 = h/2$ και $x_2 - x_1 = h$ και οι αντίστοιχες τιμές f_0, f_1, f_2. Διατυπώστε την απλούστερη πρόδρομη έκφραση πεπερασμένων διαφορών με σειρά Taylor της $2^{ης}$ παραγώγου της f στο σημείο x_0 ($f_{xx}\big|_{x=x_0} = ?$).

2. Σε τετραγωνική πλάκα $0 \le x \le 1$ και $0 \le y \le 1$ οι θερμοκρασίες $T(x, y)$ έχουν μετρηθεί σε συγκεκριμένα σημεία και είναι:

$T(0,1) = 0$	$T(0.6,1) = 50$	$T(1,1) = 0$
$T(0,0.3) = 50$	$T(0.6,0.3) = 200$	$T(1,0.3) = 50$
$T(0,0) = 0$	$T(0.6,0) = 50$	$T(1,0) = 0$

Εφαρμόζοντας τη πολυωνυμική μεθοδολογία με πολυώνυμο $2^{ης}$ τάξης να υπολογιστούν οι παράγωγοι $\dfrac{\partial T}{\partial x}$ και $\dfrac{\partial T}{\partial y}$ στο σημείο $(x, y) = (0.6, 0.3)$. Σχολιάστε τα αποτελέσματά ως προς την ακρίβεια και το πρόσημο των παραγώγων (θετικό ή αρνητικό).

3. Έστω μία συνάρτηση δύο ανεξάρτητων μεταβλητών $f = f(x, y)$. Με βάση τη σειρά Taylor βρείτε αριθμητικά τις μερικές παραγώγους:

$$\frac{\partial^4 f}{\partial x^4}, \frac{\partial^4 f}{\partial x^2 \partial y^2}, \frac{\partial^4 f}{\partial y^4}$$

4. Έστω μία συνάρτηση μιας ανεξάρτητης μεταβλητής $u = u(x)$. Με βάση πολυώνυμα 2ης τάξης βρείτε αριθμητικά τις μερικές παραγώγους:

$$u_x = \frac{-u_{i+2} + 4u_{i+1} - 3u_i}{2\Delta x} \qquad u_{xx} = \frac{u_{i+2} - 2u_{i+1} + u_i}{\Delta x^2}$$

$$u_x = \frac{u_{i-2} - 4u_{i-1} + 3u_i}{2\Delta x} \qquad u_{xx} = \frac{u_{i-2} - 2u_{i-1} + u_i}{\Delta x^2}$$

5. Με βάση τη σειρά Taylor βρείτε για τη παράγωγο f_{xx} την κεντρώα έκφραση πεπερασμένων διαφορών 2ης τάξης και για τη παράγωγο f_{xxx} την ανάδρομη έκφραση πεπερασμένων διαφορών 2ης τάξης

6. Βρείτε μία κεντρώα έκφραση πεπερασμένων διαφορών 2ης τάξης που να προσεγγίζει την παράγωγο f_{xx} στον κόμβο i ενός πλέγματος ($i = 1,2,\dots,N$), όταν η απόσταση ανάμεσα σε διαδοχικούς κόμβους δεν παραμένει σταθερή αλλά μεταβάλλεται (δηλαδή όταν $|x_i - x_{i-1}| = h_i$).

7. Να αποδειχθεί με σειρά Taylor και πολυωνυμική παρεμβολή η έκφραση πεπερασμένων διαφορών:

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i+1,j-1} - u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta x \Delta y} + O(\Delta x, \Delta y)$$