ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΑΤΡΩΝ
UNIVERSITY OF PATRAS

ΑΝΟΙΚΤΑ ακαδημαϊκά μαθήματα ΠΠ

Επιστημονικός Υπολογισμός Ι

Ενότητα **8** : Το Διακριτό Μοντέλο

Ευστράτιος Γαλλόπουλος
Τμήμα Μηχανικών Η/Υ & Πληροφορικής

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Άδειες Χρήσης

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδειας χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Πατρών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σκοπός Ενότητας

- Πεπερασμένες διαφορές και προσέγγιση διαφορικών εξισώσεων (ΔΕ)
- Συνοριακές συνθήκες (Dirichlet, Neumann) και διακριτοποίησή τους
- Διαχείριση και επίλυση γραμμικού συστήματος από τη διακριτοποίηση ΔΕ

Περιεχόμενα

1. Διακριτό Μοντέλο
   - Διαφορικές εξισώσεις: παραδείγματα
   - Διακριτοποίηση και πεπερασμένες διαφορές

Διακριτό Μοντέλο

Υπενθύμιση

- Παραδοσιακά, οι περισσότερες εφαρμογές του ΕΥ αφορούν σε αριθμητικές *προσομοιώσεις* (φυσικών και άλλων) φαινομένων στον ΗΥ (δηλ. in silico).
- Οι προσομοιώσεις συνήθως απαιτούν την επίλυση κάποιου μαθηματικού μοντέλου που περιγράφεται με μια ή περισσότερες διαφορικές, ολοκληρωματικές και αλγεβρικές εξισώσεων ή συνδυασμό τους.
- Μυριάδες εφαρμογές στην Επιστήμη και Τεχνολογία
- Ειδικού ενδιαφέροντος στο ΤΜΗΥΠ: Ευρύτατο πεδίο εφαρμογών, από τις εξισώσεις που διέπουν λογισμικό προσομοίωσης ηλεκτρονικών κυκλωμάτων[1] μέχρι τα γραφικά Η/Υ και τη σχεδίαση και υλοποίηση παιχνιδιών υπολογιστή.

[1] Όπως το SPICE = Simulation Program with Integrated Circuit Emphasis.

Ενδιαφέρουσες παρατηρήσεις

Στο (FM00) Foster και Metaxas παρατηρούν ότι ένας από τους σταθερούς στόχους των γραφικών σε υπολογιστή είναι η παροχή εργαλείων όχι μόνον για την "καλλιτεχνική" απόδοση του φυσικού κόσμου αλλά για την όσο το δυνατόν πιστότερη αναπαράσταση της πραγματικότητας. Μέχρι τα τέλη του 1980 αυτό αφορούσε κατά κύριο λόγο την πιστή προσομοίωση της επαφής του φωτός με το τα αντικείμενα. Πιο πρόσφατα, σε εφαρμογές από κινηματογραφικά έργα μέχρι τα παιχνίδια, η κυρίαρχη τάση αφορά στην αναπαράσταση ιδεατών κόσμων με όσο το δυνατόν πιο ρεαλιστικά μοντέλα βασισμένα στη Φυσική!

Μερικά εξισώσεις → μαθηματικά μοντέλα

Μηχανική: 2ος νόμος Νεύτωνα - κίνηση - παιχνίδια στον υπολογιστή,

Ηλεκτρομαγνητισμός: εξισώσεις Maxwell, .. - - SPICE - κινητά, κυκλώματα,

Ρευστοδυναμική: εξισώσεις Navier-Stokes, ..., εξισώσεις αβαθών υδάτων - προσομοίωση ρευστών στα γραφικά

Οικονομία: εξισώσεις Black-Scholes

Παράδειγμα: Εξισώσεις *Navier-Stokes*

Περιγράφουν την «ασυμπίεστη ροή» σε χωρίο $\mathcal{G}$ στο $\mathbb{R}^2$ ή στο $\mathbb{R}^3$ με σύνορο Γ είναι οι εξής:

$$\begin{aligned} -\nu\Delta\mathbf{u} + \mathbf{u}\cdot\mathrm{grad}\mathbf{u} + \mathrm{grad}p &= \mathbf{f} \\ \mathrm{div}\mathbf{u} &= 0 \ \text{ στο } \Omega, \\ \mathbf{u} &= 0 \ \text{ στο } \Gamma \quad \text{συνοριακές συνθήκες} \end{aligned}$$

όπου οι άγνωστες μεταβλητές είναι το πεδίο ταχυτήτων **u** και η πίεση p, **f** είναι η εξασκούμενη δύναμη ανά μονάδα μάζας και ν ο δεδομένος συντελεστής κινηματικής γλοιότητας, όπου $\nu := 1/\mathrm{Re}$ και Re ο αριθμός $\mathrm{Reynolds}$.

> *... Στην επίλυση των εξισώσεων NS ή «παραγώγων» τους επενδύονται αμέτρητες ώρες χρήσης Η/Υ ενώ επανειλημμένα ήταν το κίνητρο για τη σχεδίαση νέων τεχνολογιών στους Η/Υ, π.χ. αρχιτεκτονική, λογισμικό, επιστημονικό λογισμικό και γραφικά[2]) ...*

[2] Δείτε http://portal.acm.org/citation.cfm?doid=341852.341864.

Όπως αναφέρουν οι Foster και Metaxas στο (FM00)

> *Modeling physics on a computer and visualizing the results using graphics techniques can lead to complex pictures as dazzling as the real-world phenomena they are intended to represent, especially for such fluid effects as the motion of water, fire, and smoke. It isn´´t surprising that a great deal of effort has been put into modeling such phenomena for computer graphics... Here, we are concerned with modeling and animating water. Although modeling water for computer graphics is not a new research area, only recently have graphics researchers sought to take advantage of the huge body of literature on computational fluid dynamics in the interests of generating highly realistic animations. Mechanical engineers and physicists have been modeling the behavior of liquids on computers for nearly 40 years. However, their approach in general has focused on very specific goals, such as modeling the pressure around a newly designed ship hull as it undergoes various ocean conditions or calculating how the coolant in a nuclear reactor core flows around spherical rods. This focus on a few specialized engineering applications provides students of computer graphics with extremely useful techniques with which to achieve their own more general goals of modeling water so it looks visually convincing, moves realistically, and can be simulated on a desktop computer in a reasonable amount of time... (Foster & Metaxas, Modeling water for computer animation, CACM, 2000)*

Διαφορικές εξισώσεις: ΣΔΕ και ΜΔΕ

Τα περισσότερα μαθηματικά μοντέλα (φυσικά, χημικά, βιολογικά, κοινωνικά, οικονομικά) έχουν στον κορμό τους διαφορικές εξισώσεις (ΔΕ). Οι ΔΕ διακρίνονται σε δύο κατηγορίες:

Συνήθης διαφορική εξίσωση (ΣΔΕ) όταν η άγνωστη συνάρτηση εξαρτάται από μία ανεξάρτητη μεταβλητή,

- Βαθμωτή εξίσωση, π.χ. $u : [a, b] \to G \subset \mathbb{R}$ και $u \in C^2([a, b])$,

$$u_{xx} + b(x)u_x + u^2 = d(x)$$

- Σύστημα ΣΔΕ, π.χ. $\mathbf{u} : [a, b] \to G \subset \mathbb{R}^2$ και $\mathbf{u} \in C^1([a, b])$,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}u_1 &= -(u_1 + u_2) \\ \frac{d}{dt}u_2 &= -(u_1 - u_2) \end{aligned}$$

Μερική διαφορική εξίσωση (ΜΔΕ) όταν η άγνωστη συνάρτηση εξαρτάται από δύο ή περισσότερες ανεξάρτητες μεταβλητές

- Βαθμωτή εξίσωση, π.χ.

$$u_t - b(x)u_{xx} + u^2 = d(x)$$

- Σύστημα, π.χ.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}u_1 + u_1\frac{\partial}{\partial x_1}u_1 + u_2\frac{\partial}{\partial x_2}u_1 + u_3\frac{\partial}{\partial x_3}u_1 &= -\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial x_1}p + F_1 \\ \frac{\partial}{\partial t}u_2 + u_1\frac{\partial}{\partial x_1}u_2 + u_2\frac{\partial}{\partial x_2}u_2 + u_3\frac{\partial}{\partial x_3}u_2 &= -\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial x_2}p + F_2 \\ \frac{\partial}{\partial t}u_3 + u_1\frac{\partial}{\partial x_1}u_3 + u_2\frac{\partial}{\partial x_2}u_3 + u_3\frac{\partial}{\partial x_3}u_3 &= -\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial x_3}p + F_3 \\ \frac{\partial}{\partial x_1}u_1 + \frac{\partial}{\partial x_2}u_2 + \frac{\partial}{\partial x_3}u_3 &= 0 \end{aligned}$$

Η ανάγκη για Διακριτό Μοντέλο

- υπολογιστικό μοντέλο
- μοντέλο αριθμητικής
- διακριτό μοντέλο

Στόχος: Να προσεγγιστεί η δράση των τελεστών των εξισώσεων του μοντέλου που ορίζονται θεωρητικά με χρήση ορίων και βάσει του συνεχούς

Τελεστές: παραγώγισης, ολοκλήρωσης

Μοντέλα και απώλεια πληροφορίας

Ανάγκη να έχουμε μοντέλα που επιτρέπουν αξιόπιστες προβλέψεις.

Μοντέλο	*Προβλέψεις*	*Σφάλματα*
υπολογιστικό	επίδοσης	πιστότητας επίδοσης
αριθμητικής	ακρίβειας υπολογισμών	στρογγύλευσης
διακριτό	ακρίβειας προσεγγίσεων	διακριτοποίησης

Πρέπει να είμαστε ενήμεροι για τις επιπτώσεις των απωλειών πληροφορίας.

Μέθοδος διαφορών Προσεγγίζουμε τις παραγώγους συνάρτησης με διαφορές τιμών της συνάρτησης σε κοντινά σημεία

Μέθοδος πεπερασμένων διαφορών

Συναρτησιακή μέθοδος Προσεγγίζουμε τη συνάρτηση με μίαν απλούστερη την οποία παραγωγίζουμε ακριβώς.

Μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων

Διακριτοποίηση

Δημιουργία διακριτού μοντέλου για την προσέγγιση και λύση του προβλήματος :

Διαδικασία που αφορά

- την προσέγγιση πεδίου ορισμού, εξισώσεων, οριακών συνθηκών.
- Μετά τη διακριτοποίηση, το συνεχές πρόβλημα μετατρέπεται σε ένα σύστημα (γραμμικό ή μη) εξισώσεων ...
- ... το οποίο πρέπει να επιλύσουμε.
- Το αποτέλεσμα είναι προσέγγιση της της πραγματικής λύσης του αρχικού μαθηματικού προβλήματος (η διαφορά τους το ολικό σφάλμα).

Διακριτοποίηση και πεπερασμένες διαφορές

✓ Οι πιο διαδεδομένες μέθοδοι για την αριθμητική επίλυση των ΔΕ προσεγγίζουν τις παραγώγους των εξαρτημένων μεταβλητών με γραμμικούς συνδυασμούς των τιμών τους σε προκαθορισμένα σημεία του χωρίου ορισμού τους.

✓ Αντικαθιστώντας τις παραγώγους με τις παραπάνω προσεγγίσεις, ανάγουμε την αρχική ΔΕ σε ένα σύστημα από εξισώσεις (γραμμικές ή όχι) το οποίο πρέπει να λυθεί με κάποια μέθοδο.

- το χωρίο ορισμού αντικαθίσταται με ένα *πλέγμα* από *κόμβους* και οι τιμές των παραγώγων προσεγγίζονται από συνδυασμούς των τιμών της συνάρτησης στους κόμβους.
- Η λύση αυτών των εξισώσεων αποτελεί προσέγγιση της λύσης της ΔΕ και στη συνέχεια ελέγχεται ως προς την ακρίβειά της.

Θέματα

- Πώς κατασκευάεται το πλέγμα που διακριτοποιεί το χωρίο ορισμού;
- Πώς προσεγγίζουμε τις παραγώγους;
- Πώς λύνουμε τις προκύπτουσες εξισώσεις;
- Πόσο κοντά είναι η λύση των εξισώσεων στην θεωρητική λύση;

Βιβλιογραφία I

N. Foster and D. Metaxas.
Modeling water for computer animation.
Commun. ACM, 43(7):60--67, July 2000.

Ε. Γαλλόπουλος.
Επιστημονικός Υπολογισμός I.
Πανεπιστήμιο Πατρών, 2008.

Χρήση Έργου Τρίτων I

1. http://dl.acm.org/citation.cfm?doid=341852.341864 (βλ. σελ 10)

Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Πατρών - Ευστράτιος Γαλλόπουλος 2015

``Επιστημονικός Υπολογισμός Ι'', Έκδοση: 1.0, Πάτρα 2013-2014.
Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: https://eclass.upatras.gr/courses/CEID1096/

Τέλος Ενότητας

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης