Επιστημονικός Υπολογισμός Ι

Ενότητα 8 : Το Διακριτό Μοντέλο

Ευστράτιος Γαλλόπουλος
Τμήμα Μηχανικών Η/Υ & Πληροφορικής

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

Σχετικά με τις μεθόδους πεπερασμένων διαφορών για ΣΔΕ

- Η εξαρτημένη μεταβλητή, διακριτοποιείται και προσεγγίζεται το διάνυσμα των τιμών της στους κόμβους του επιλεγμένου πλέγματος.
- Το μέγεθος του διανύσματος είναι περίπου ίσο με τον αριθμό των εξαρτημένων μεταβλητών επί το πλήθος των κόμβων, άρα και από τη λεπτότητα του πλέγματος[1].
- Οι τιμές του διανύσματος υπολογίζονται από την αριθμητική επίλυση του συστήματος εξισώσεων με το οποίο διακριτοποιείται η διαφορική εξίσωση.
- Από τη διακριτή μορφή των παραγώγων και ολοκληρωμάτων (π.χ. κανόνας Simpson) μπορούμε να συμπεράνουμε ότι συνήθως:
  1. Οι εξισώσεις που προέρχονται από την εφαρμογή της μεθόδου πεπερασμένων διαφορών σε διαφορικές εξισώσεις είναι αραιά συστήματα.
  2. Οι εξισώσεις που προέρχονται από διακριτοποίηση ολοκληρωματικών εξισώσεων συνήθως αντιστοιχούν σε πυκνά συστήματα.

[1] Εδώ θα θεωρηθεί στατικό, αλλά η πρόκληση είναι να αποφασίζεται δυναμικά και να υπάρχει αυτοπροσαρμογή ώστε να επιτευχθεί λύση με ικανοποιητικά μικρό σφάλμα.

Πεπερασμένες διαφορές

Ιδέα: Από τον ορισμό παραγώγου. Έστω ότι η συνάρτηση u είναι παραγωγίσημη στο διάστημα (α, β), τότε η 1η παράγωγος στο $x \in (\alpha, \beta)$ (χρησιμοποιούμε τους συμβολισμούς $u'(x)$, $u^{(1)}(x)$, $u_x(x)$) μπορεί να οριστεί ισοδύναμα μέσω των παρακάτω ορίων

$$\lim_{h\to 0} \frac{u(x+h)-u(x)}{h}, \lim_{h\to 0} \frac{u(x)-u(x-h)}{h}$$

$$\frac{1}{2}\lim_{h\to 0} \left(\frac{u(x+h)-u(x)}{h} + \frac{u(x)-u(x-h)}{h} \right)$$

Προσεγγίσεις της παραγώγου με πεπερασμένες διαφορές

1. $D_h^{(+)}u(x) := \frac{u(x+h)-u(x)}{h}$, $D_h^{(-)}u(x) := \frac{u(x)-u(x-h)}{h}$ (μονόπλευρες προσεγγίσεις)
2. $D_h^{(2)}u(x) := \frac{u(x+h)-u(x-h)}{2h}$ (αμφίπλευρη προσέγγιση)

Τελεστές πεπερασμένων διαφορών $D_h^{(+)}, D_h^{(-)}, D_h^{(2)}$

Παραδείγματα

$u(x)$	$u'(x)$	$D_h^{(+)}u(x)$	$D_h^{(2)}u(x)$
c	0	0	0
x	1	1	1
x^2	$2x$	$2x+h$	$2x$
$\sin x$	$\cos x$	$\frac{\sin(x+h)-\sin(x)}{h}$	$\frac{\sin h}{h}\cos x$

Παρατηρήσεις:

- Οι $D_h^{(\pm)}$ υπολογίζουν σωστά την παράγωγο όταν η συνάρτηση είναι σταθερή ή γραμμική.
- Όταν η συνάρτηση είναι πολυώνυμο 2ου βαθμού, ο $D_h^{(\pm)}$ προσεγγίζει την παράγωγο με σφάλμα που συμπεριφέρεται όπως το $O(h)$.
- Επιπλέον, ο $D_h^{(2)}$ υπολογίζει ακριβώς την παράγωγο όταν η συνάρτηση είναι πολυώνυμο βαθμού 0, 1, ή 2.
- Η παράγωγος ημιτόνου προσεγγίζεται α) με σφάλμα $O(h)$ με το $D_h^{(\pm)}$ και σφάλμα $O(h^2)$ με το $D_h^{(2)}$.

Σχετικά με την ασυμπτωτική ορολογία

- $f(n) = \mathcal{O}(n^k)$: δηλώνει συμπεριφορά καθώς $n \to \infty$. Δηλαδή, υπάρχουν σταθερά, P και κάποιο n_0 τέτοια ώστε $|f(n)| \leq\ Pn^k$ για κάθε $n > n_0$.
- $g(h) = \mathcal{O}(h^k)$: δηλώνει συμπεριφορά καθώς $h \to 0$. Δηλαδή, υπάρχουν σταθερά, Q και κάποιο δ τέτοια ώστε $|g(h)| \leq\ Qh^k$ για κάθε $h < \delta$.

Προσεγγίσεις με πολυώνυμα από σειρά Taylor

Προσέγγιση Taylor (δείτε και το άρθρο της Wikipedia)

Έστω ότι η πραγματική συνάρτηση u είναι $k+1$ φορές παραγωγίσημη στο ανοικτό διάστημα $(x, x+h) \in \mathbb{R}$ και ότι η $u^{(k)}$ είναι συνεχής στο κλειστό διάστημα $[x, x+h]$. Τότε ισχύει ότι

$$\begin{aligned} u(x+h) &= \sum_{l=0}^{k} \frac{u^{(l)}(x)}{l!} h^l + R_k(h) \\ \text{όπου το υπόλοιπο } R_k(h) &= \frac{u^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!} h^{k+1}, \text{ για κάποιο } \xi \in (x, x+h) \end{aligned}$$

Αντίστοιχα, $u(x-h) = \sum_{l=0}^{k} \frac{u^{(l)}(x)}{l!}(-h)^l + R_k(h)$ αν τα παραπάνω ισχύουν στο $(x-h, x)$. ΒΑΣΙΚΟ ΕΡΩΤΗΜΑ Μπορούμε να προβλέψουμε τη συμπεριφορά του $R_k(h)$;

ΘΕΩΡΗΜΑ ΑΝΑΛΥΣΗΣ Συνάρτηση, συνεχής σε κλειστό διάστημα, είναι φραγμένη.

$\Rightarrow$ αν $u^{(k+1)}$ είναι συνεχής στο $[x, x+h] \Rightarrow |R_k(h)| \leq \frac{M}{(k+1)!} h^{k+1} \Rightarrow R_k(h) = O(h^{k+1})$.

Προσεγγίσεις 1ης παραγώγου

Αν η u είναι 2 φορές παραγωγίσημη

$$\begin{aligned} u(x+h) &= u(x) + hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(\xi) \\ \Rightarrow \frac{u(x+h)-u(x)}{h} &= u'(x) + \frac{h}{2}u''(\xi) \end{aligned}$$

και αν η u'' είναι συνεχής στο $[x, x+h]$ τότε

$$\frac{u(x+h)-u(x)}{h} = u'(x) + O(h)$$

και χρησιμοποιούμε την προσέγγιση

$$u'(x) \approx \frac{u(x+h)-u(x)}{h}$$

Προσοχή: Η προσέγγιση έγινε με «προς τα εμπρός διαφορές» (λέγονται και «κατάντη»). Ο όρος $\frac{h}{2}u''(\xi)$ ονομάζεται σφάλμα αποκοπής της προσέγγισης και ο εκθέτης του h (εδώ, 1) λέγεται τάξη ακρίβειας της προσέγγισης.

Πίσω διαφορές (ανάντη) Παρόμοια μπορούμε να θέσουμε $u'(x) \approx \frac{u(x)-u(x-h)}{h}$

Αν η u είναι 3 φορές παραγωγίσημη

$$\begin{aligned} u(x+h) &= u(x) + hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) + \frac{h^3}{6}u'''(\xi_1) \\ u(x-h) &= u(x) - hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) - \frac{h^3}{6}u'''(\xi_2) \\ \Rightarrow \frac{u(x+h)-u(x-h)}{2h} &= u'(x) + \frac{h^2}{12}(u'''(\xi_1) + u'''(\xi_2)) \end{aligned}$$

και αν η u''' είναι συνεχής στο $[x-h, x+h]$ τότε (θεώρημα ενδιάμεσης τιμής) υπάρχει $\xi \in (\xi_1, \xi_2)$ τέτοιο ώστε $u'''(\xi) = \frac{1}{2}(u'''(\xi_1) + u'''(\xi_2))$. Επομένως

$$\frac{u(x+h)-u(x-h)}{2h} = u'(x) + \frac{h^2}{6}u'''(\xi) = u'(x) + O(h^2)$$

και χρησιμοποιούμε την προσέγγιση

$$u'(x) \approx \frac{u(x+h)-u(x-2h)}{2h}$$

Προσοχή: Η προσέγγιση έγινε με «κεντρισμένες διαφορές». Τάξη ακρίβειας 2, σφάλμα αποκοπής $\frac{h^2}{6}u'''(\xi)$.

Προσέγγιση δευτέρας παραγώγου

Αν η u είναι 4 φορές παραγωγίσημη

$$\begin{aligned} u(x+h) &= u(x) + hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) + \frac{h^3}{6}u'''(x) + \frac{h^4}{24}u^{(4)}(\xi_1) \\ u(x-h) &= u(x) - hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) - \frac{h^3}{6}u'''(x) + \frac{h^4}{24}u^{(4)}(\xi_2) \\ \Rightarrow \frac{u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)}{h^2} &= u''(x) + \frac{h^4}{24}(u^{(4)}(\xi_1) + u^{(4)}(\xi_2)) \end{aligned}$$

και αν η $u^{(4)}$ είναι συνεχής στο $[x-h, x+h]$ τότε (θεώρημα ενδιάμεσης τιμής) υπάρχει $\xi \in (\xi_1, \xi_2)$ τέτοιο ώστε $u^{(4)}(\xi) = \frac{1}{2}(^{(4)}(\xi_1) +^{(4)} (\xi_2))$. Επομένως

$$\frac{u(x-h) - 2u(x) + u(x+h)}{h^2} = u''(x) + \frac{h^2}{12}u^{(4)}(\xi) = u''(x) + O(h^2)$$

και χρησιμοποιούμε την προσέγγιση

$$u''(x) \approx \frac{u(x-h) - 2u(x) + u(x+h)}{h^2}$$

Προσοχή: Η προσέγγιση έγινε με «κεντρισμένες διαφορές». Τάξη ακρίβειας 2, σφάλμα αποκοπής $\frac{h^2}{12}u^{(4)}(\xi)$.

Προβλήματα συνοριακών τιμών

Περιγραφή Πρόκειται για ΔΕ ορισμένες σε ένα διάστημα $\Omega = (X_L, X_U) \subset \mathbb{R}$ ή σε ένα ανοικτό χωρίο $\Omega \subset \mathbb{R}^k$ (συνήθως $k = 2, 3$) στις οποίες οι τιμές της άγνωστης συνάρτησης ή παραγώγων της ή κάποιου συνδυασμού τους ορίζονται στα σύνορα του χωρίου (π.χ. στα άκρα του διαστήματος).

Σημαντικές περιπτώσεις

Poisson, $k = 1$ $\quad -u_{xx}(x) = f(x), x \in \Omega = (X_L, X_U)$.

Poisson, $k > 1$ $\quad -\Delta u(x) = f(x), x \in \Omega$ όπου Δ είναι ο τελεστής Laplace, π.χ. όταν $k = 2$:

$$\Delta u(\mathbf{x}) = u_{xx} + u_{yy}$$

Προσοχή Οι παραπάνω ΔΕ διαθέτουν απειρία λύσεων, (π.χ. αν u είναι λύση τότε το ίδιο ισχύει και για $u(x) + \mu x + \nu$). Για να προσδιοριστεί μοναδική λύση πρέπει να προσδιορίσουμε τη συμπεριφορά της συνάρτησης στο σύνορο του χωρίου Ω.

Διαδικασία επίλυσης

Εξετάζουμε την περίπτωση ΔΕ με βαθμωτή άγνωστη συνάρτηση, έστω $u \in \mathbb{R}$.

1. Διακριτοποιούμε το χωρίο Ω με πλέγμα Ω_h. Κάποιοι κόμβοι (2 αν το πρόβλημα είναι σε 1 διάσταση, περισσότεροι διαφορετικά) θεωρούνται συνοριακοί, οι υπόλοιποι εσωτερικοί.
2. Αριθμούμε τους κόμβους του πλέγματος και αντιστοιχούμε ένα στοιχείο (άγνωστο προς παρόν) U_j σε κάθε κόμβο, έτσι ώστε το U_j να χρησιμοποιηθεί ως προσέγγιση του $u(x_j)$.
3. Γράφουμε τη διακριτοποιημένη μορφή της ΔΕ σε κάθε (συνήθως εσωτερικό) κόμβο του πλέγματος χρησιμοποιώντας τις επιλεγμένες προσεγγίσεις για τις παραγώγους και λαμβάνοντας υπόψη τις συνοριακές συνθήκες.
4. Προκύπτει ένα σύστημα εξισώσεων με αγνώστους τις τιμές U_j.
5. Επιλύουμε το σύστημα εξισώσεων ως προς τις τιμές U_j.
6. Ελέγχουμε την ακρίβεια μέσω της θεωρίας και επιλέγοντας προβλήματα με γνωστή λύση.
7. Αν χρειάζεται, προσαρμόζουμε το πλέγμα (π.χ. διπλασιάζουμε τους κόμβους) και το σχήμα διακριτοποίησης και επαναλαμβάνουμε.

Σημαντικά στοιχεία

Θεώρημα

Δίνεται το γραμμικό συνοριακό πρόβλημα 2 σημείων

$$-\frac{d^2u}{dx^2}(x) + b(x)\frac{du}{dx}(x) + c(x)u(x) = f(x).$$

με γνωστές τιμές $u(X_L), u(X_U)$. Αν οι συναρτήσεις $b(x), c(x), f(x)$ είναι συνεχείς και $c(x) \geq 0$ στο διάστημα ορισμού $[X_L, X_U]$ τότε το πρόβλημα έχει μία και μοναδική λύση.

Συμπεριφορά σφάλματος - σύγκλιση Μπορεί να δειχτεί ότι αν $b(x) = 0$, η $u_{xxxx}(x)$ είναι συνεχής στο Ω και η διακριτοποίηση γίνει με κεντρισμένες διαφορές, τότε (σε αριθμητική άπειρης ακρίβειας) ισχύει ότι

$$\max_{0 \leq j \leq n} |u(x_j) - U_j| \leq \frac{1}{96} h^2 (X_U - X_L)^2 M$$

όπου M είναι άνω φράγμα για την 4η παράγωγο $u_{xxxx}(x)$ στο Ω. Καθώς $h \to 0$, οι τιμές U_j τείνουν προς τις αντίστοιχες τιμές $u(x_j)$ και λέμε ότι η μέθοδος συγκλίνει.
ΠΡΟΣΟΧΗ Καθώς μικραίνει το h, το πλήθος των τιμών U_j μεγαλώνει. Πολλές φορές αυτό δηλώνεται γράφοντας $U(h)$ για το διάνυσμα (η διάσταση του οποίου εξαρτάται από το h).

Πρόβλημα Poisson με συνθήκες Dirichlet σε 1 διάσταση

Να υπολογιστεί η συνάρτηση u που ικανοποιεί τις παρακάτω συνθήκες:

Εξίσωση: $-u_{xx}(x) = f(x)$ για $x \in (\alpha, \beta)$

Συνοριακές τιμές: Δίδονται οι (συν)οριακές τιμές $u(\alpha), u(\beta)$

Παρατήρηση: Η απλή μορφή της εξίσωσης προκαλεί να γράψουμε τη γενική λύση χρησιμοποιώντας ολοκλήρωση (τετραγωνισμό), π.χ.

$$u(x) = \int_{\alpha}^{x} dx \int_{\alpha}^{x} f(x)dx + C_1(x-\alpha) + C_2 \text{ή} \int_{\alpha}^{x} (x-\tau) f(x) d\tau + C_1(x-\alpha) + C_2$$

όπου C_1, C_2 προσδιορίζονται από τις συνοριακές συνθήκες (εδώ $C_2 = u(\alpha)$.)

Προσοχή: Αυτός ο τρόπος όμως είναι περιορισμένης εμβέλειας:

- το ολοκλήρωμα $\int f$ μπορεί να υπολογίζεται δύσκολα ως συνάρτηση ή καθόλου. Για παράδειγμα, οι συναρτήσεις $\int \exp(-x^2)dx$, $\int 1/\ln(x)dx$.
- Δεν εφαρμόζεται σε απλές αλλά λίγο διαφορετικές εξισώσεις, π.χ. $-u_{xx}(x) + u(x) = f(x)$.

Πρόβλημα Poisson με συνθήκες Dirichlet σε 1 διάσταση

Να υπολογιστεί η συνάρτηση u που ικανοποιεί τις παρακάτω συνθήκες:

Εξίσωση: $-u_{xx}(x) = f(x)$ για $x \in (\alpha, \beta)$

Συνοριακές τιμές: Δίδονται οι (συν)οριακές τιμές $u(\alpha), u(\beta)$

Παρατήρηση: Η απλή μορφή της εξίσωσης προκαλεί να γράψουμε τη γενική λύση χρησιμοποιώντας ολοκλήρωση (τετραγωνισμό), π.χ.

$$u(x) = \int_\alpha^x dx \int_\alpha^x f(x)dx + C_1(x-\alpha) + C_2 \text{ή} \int_\alpha^x (x-\tau)f(x)d\tau + C_1(x-\alpha) + C_2$$

όπου C_1, C_2 προσδιορίζονται από τις συνοριακές συνθήκες (εδώ $C_2 = u(\alpha)$.)

Προσοχή: Αυτός ο τρόπος όμως είναι περιορισμένης εμβέλειας:

- το ολοκλήρωμα $\int f$ μπορεί να υπολογίζεται δύσκολα ως συνάρτηση ή καθόλου. Για παράδειγμα, οι συναρτήσεις $\int \exp(-x^2)dx$, $\int 1/\ln(x)dx$.
- Δεν εφαρμόζεται σε απλές αλλά λίγο διαφορετικές εξισώσεις, π.χ. $-u_{xx}(x) + u(x) = f(x)$.

$\Rightarrow$ καταφεύγουμε σε αριθμητική επίλυση

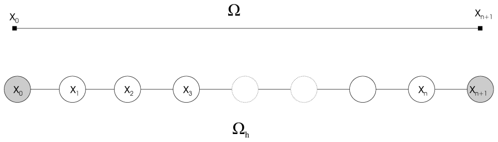
Παρατήρηση: Το ζήτημα της αριθμητικής επίλυσης ΔΕ είναι από τα σημαντικότερα των αριθμητικών μεθόδων, των εφαρμοσμένων μαθηματικών και του επιστημονικού υπολογισμού. Εδώ θα περιοριστούμε σε μια "αστραπιαία" παρουσίαση. Μια καλή εισαγωγή στο ζήτημα υπάρχει στο βιβλίο του A. Iserles (Ise08).

Παράδειγμα

Θα λύσουμε προβλήματα του τύπου

$$-u_{xx} = f(x),\ x \in D = [1,2],\ u(1) = 0, u(2) = 1.$$

Χαρακτηρισμός: Πρόκειται για συνοριακό πρόβλημα 2 σημείων, με συνοριακές συνθήκες Dirichlet.
Επιλογή πλέγματος & αρίθμηση: Το σύνολο $\Omega_h = \{x_0, x_1, \ldots, x_n, x_{n+1}\}$ όπου $x_0 = 1, x_{n+1} = 2$ και $x_j = 1 + jh, j = 1, ..., n$, όπου $h = \frac{2-1}{n+1}$. Επιλέξαμε ισαπέχοντες κόμβους.



$$
\begin{aligned}
\frac{-u(x_0) + 2u(x_1) - u(x_2)}{h^2} &= f(x_1) + \tau(x_1) \\
\vdots \quad & \quad \vdots \\
\frac{-u(x_{j-1}) + 2u(x_j) - u(x_{j+1})}{h^2} &= f(x_j) + \tau(x_j) \\
\vdots \quad & \quad \vdots \\
\frac{-u(x_{n-1}) + 2u(x_n) - u(x_{n+1})}{h^2} &= f(x_n) + \tau(x_n)
\end{aligned}
$$

όπου $\tau(x_j)$ είναι το τοπικό σφάλμα αποκοπής στον κόμβο x_j.

$$
\begin{aligned}
\frac{2U_1 - U_2}{h^2} &= f(x_1) + \frac{u(x_0)}{h^2} \\
\vdots \quad & \quad \vdots \\
\frac{-U_{j-1} + 2U_j - U_{j+1}}{h^2} &= f(x_j) \\
\vdots \quad & \quad \vdots \\
\frac{-U_{n-1} + 2U_n}{h^2} &= f(x_n) + \frac{u(x_{n+1})}{h^2}
\end{aligned}
$$

Παρατηρήσεις

Το παραπάνω είναι ένα γραμμικό σύστημα $n \times n$ όπου το μητρώο A είναι τριδιαγώνιο, συμμετρικό, Toeplitz.

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ U_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_1) + \frac{u(x_0)}{h^2} \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_n) + \frac{u(x_{n+1})}{h^2} \end{pmatrix}$$

Συνοπτικά γράφουμε

$$\frac{1}{h^2}AU = b.$$

Χαρακτηριστικά της ΔΕ και της διακριτοποίησης διαμορφώνουν το μητρώο

Προσοχή Η τριδιαγώνια δομή οφείλεται στην «τοπικότητα» της διακριτοποίησης με πεπερασμένες διαφορές: Η 2η παράγωγος σε κάθε σημείο x_j προσεγγίζεται με συνδυασμό των τιμών της συνάρτησης σε 2 γειτονικές θέσεις $x_{j\pm 1}$.
Προσοχή Η συμμετρία οφείλεται στο ότι δεν υπάρχουν παράγωγοι περιττής τάξης.
Προσοχή Η δομή Toeplitz οφείλεται στην κανονικότητα της διακριτοποίησης (ισαπέχοντες κόμβοι) και των συντελεστών (π.χ. δεν θα υπήρχε στην $-u_{xx} + e(x) = f(x)$ για μη σταθερά $e(x)$.)
Προσοχή Η θεωρία προβλέπει μοναδική λύση της ΔΕ, επομένως αν κάνουμε τα πράγματα σωστά, θα πρέπει να έχουμε μοναδική λύση και για το γραμμικό σύστημα, δηλ. να είναι αντιστρέψιμο.

Αποδεικνύεται ότι το A είναι και ΣΘΟ και επομένως αντιστρέψιμο.
Παρατήρηση Το σύστημα είναι τριδιαγώνιο, ΣΘΟ και Toeplitz. Η καλύτερη περίπτωση (η δομή μπορεί να αξιοποιηθεί για μείωση του κόστους).

$-u_{xx} = x,\ x \in D = [1,2],\ u(1) = 0, u(2) = 1, n = 4$ ισαπέχοντες εσωτερικούς κόμβους

Προσοχή: Με συνθήκες Dirichlet, $n = 4$ εξισώσεις, $h = 1/5$, $x_j = 1 + \frac{j}{5}$ και το σύστημα είναι

$$25 \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{6}{5} + \cancel{25u(1)} \\ \frac{7}{5} \\ \frac{8}{5} \\ \frac{9}{5} + 25u(2) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{6}{125} \\ \frac{7}{125} \\ \frac{8}{125} \\ \frac{134}{125} \end{pmatrix}$$

$-u_{xx} = x,\ x \in D = [1,2],\ u(1) = 0, u(2) = 1, n = 4$ ισαπέχοντες εσωτερικούς κόμβους

Προσοχή: Με συνθήκες Dirichlet, $n = 4$ εξισώσεις, $h = 1/5$, $x_j = 1 + \frac{j}{5}$ και το σύστημα είναι

$$25 \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{6}{5} + \cancel{25u(1)} \\ \frac{7}{5} \\ \frac{8}{5} \\ \frac{9}{5} + 25u(2) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{6}{125} \\ \frac{7}{125} \\ \frac{8}{125} \\ \frac{134}{125} \end{pmatrix}$$

Επίλυση;

Παράδειγμα

$$\begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{39}{125} \\ \frac{72}{125} \\ \frac{98}{125} \\ \frac{116}{125} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{4}{5} & \frac{3}{5} & \frac{2}{5} & \frac{1}{5} \\ \frac{3}{5} & \frac{6}{5} & \frac{4}{5} & \frac{2}{5} \\ \frac{2}{5} & \frac{4}{5} & \frac{6}{5} & \frac{3}{5} \\ \frac{1}{5} & \frac{2}{5} & \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{6}{125} \\ \frac{7}{125} \\ \frac{8}{125} \\ \frac{134}{125} \end{pmatrix}$$

Πώς συγκρίνεται με την αναλυτική λύση; Ακριβής λύση με ολοκληρώσεις $u(x) = -\frac{1}{6}(x^3 - 13x + 12)$ Αν $x = \begin{pmatrix} \frac{6}{5} & \frac{7}{5} & \frac{8}{5} & \frac{9}{5} \end{pmatrix}^\top$, τότε από $u(x_j) = -\frac{1}{6}(x_j^3 - 13x_j + 12)$ υπολογίζουμε ότι

$$\begin{pmatrix} u(x_1) \\ u(x_2) \\ u(x_3) \\ u(x_4) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{39}{125} \\ \frac{72}{125} \\ \frac{98}{125} \\ \frac{116}{125} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{pmatrix}$$

Παρατηρήσεις: Υπολογίστηκαν οι ακριβείς τιμές στους κόμβους!!!! Αιτιολόγηση; Δείτε την έκφραση για το σφάλμα στο θεώρημα. Προσοχή: προβλέπεται από το θεώρημα καθώς η αναλυτική λύση $u(x)$ ήταν κυβικό πολυώνυμο. Ήταν ειδική περίπτωση!

$$-u_{xx} = \sin(\pi x),\ x \in D = [1,2],\ u(1) = 0, u(2) = 1/\pi, n = 4$$

Ακριβής λύση

$$u(x) = \frac{\mathbf{x} + \frac{\sin(\pi\, \mathrm{x})}{\pi} - 1}{\pi}$$

Παρατηρήσεις: Όπως πριν $n = 4$, $h = 1/5$, $x_j = 1 + \frac{j}{5}$ άρα

$$25 \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin(\frac{6}{5}\pi) \\ \sin(\frac{7}{5}\pi) \\ \sin(\frac{8}{5}\pi) \\ \sin(\frac{9}{5}\pi) + \frac{25}{\pi} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{25} \begin{pmatrix} -0.5878 \\ -0.9511 \\ -0.9511 \\ 7.3700 \end{pmatrix} \Rightarrow U = \begin{pmatrix} 0.0021 \\ 0.0277 \\ 0.0914 \\ 0.1931 \end{pmatrix}^{\top}$$

x_j	$u(x_j)$	U_j	$\lvert u(x_j) - U_j \rvert$
$\frac{6}{5}$	0.0041	0.0021	0.0020
$\frac{7}{5}$	0.0310	0.0277	0.0032
$\frac{8}{5}$	0.0946	0.0914	0.0032
$\frac{9}{5}$	0.1951	0.1931	0.0020

Συγκρίνετε με το άνω φράγμα για το σφάλμα που αναφέρθηκε προηγουμένως

$$\frac{1}{96} h^2 \max_{x \in [1,2]} |u^{(4)}(x)| \le \frac{\pi^2}{96 \times 25} \approx 0.0041$$

Αν αυξήσουμε τη διακριτότητα (υποδιπλασιάζουμε το h)

$$-u_{xx} = \sin(\pi x), \; x \in D = [1,2], \; u(1) = 0, u(2) = 1/\pi, n = 9$$

Παρατηρήσεις: Όπως πριν $n = 9$, $h = 1/10$, $x_j = 1 + \frac{j}{10}$ άρα

$$100 \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ U_{10} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin(\frac{11}{10}\pi) \\ \sin(\frac{12}{10}\pi) \\ \vdots \\ \sin(\frac{19}{10}\pi) + \frac{100}{\pi} \end{pmatrix}$$

Λύνουμε και συγκρίνουμε τα αποτελέσματα και τα σφάλματα

		$n = 4$		$n = 9$	
x_j	$u(x_j)$	U_j	$\lvert u(x_j) - U_j\rvert$	U_j	$\lvert u(x_j) - U_j\rvert$
$\frac{11}{10}$	0.0005			0.0003	$0.2588e-3$
$\frac{12}{10}$	0.0041	0.0021	0.0020	0.0036	$0.4922e-3$
$\frac{13}{10}$	0.0135			0.0128	$0.6775e-3$
$\frac{14}{10}$	0.0310	0.0277	0.0032	0.0302	$0.7965e-3$
$\frac{15}{10}$	0.0578			0.0570	$0.8375e-3$
$\frac{16}{10}$	0.0946	0.0914	0.0032	0.0938	$0.7965e-3$
$\frac{17}{10}$	0.1408			0.1402	$0.6775e-3$
$\frac{18}{10}$	0.1951	0.1931	0.0020	0.1946	$0.4922e-3$
$\frac{19}{10}$	0.2552			0.2549	$0.2588e-3$

- Προσέξτε τον υποτετραπλασιασμό του σφάλματος στους κόμβους που είναι κοινοί: επιβεβαίωνει ότι το σφάλμα είναι $O(h^2)$.
- Μέγιστο σφάλμα όταν $h = 1/10$ είναι $0.8375e-3$. Συγκρίνουμε με την πρόβλεψη του θεωρήματος:

$$\frac{1}{96} h^2 \max_{x \in [1,2]} |u^{(4)}(x)| \le \frac{\pi^2}{96 \times 100} \approx 0.0010$$

Βιβλιογραφία I

A. Iserles.

A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations.

Cambridge University Press, Cambridge, 2nd edition, 2008.

Ε. Γαλλόπουλος.

Επιστημονικός Υπολογισμός I.

Πανεπιστήμιο Πατρών, 2008.

Χρήση Έργου Τρίτων Ι

1. http://en.wikipedia.org/wiki/Taylor's_theorem (βλ. σελ 9)

Σημείωμα Αναφοράς

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

Τέλος Ενότητας

BY NC ND

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
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης