Επιστημονικός Υπολογισμός Ι

Ενότητα **8** : Το Διακριτό Μοντέλο

Ευστράτιος Γαλλόπουλος
Τμήμα Μηχανικών Η/Υ & Πληροφορικής

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΑΤΡΩΝ
UNIVERSITY OF PATRAS
ΑΝΟΙΚΤΑ ακαδημαϊκά μαθήματα ΠΠ
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

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
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

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 το σφάλμα (επανάληψη)

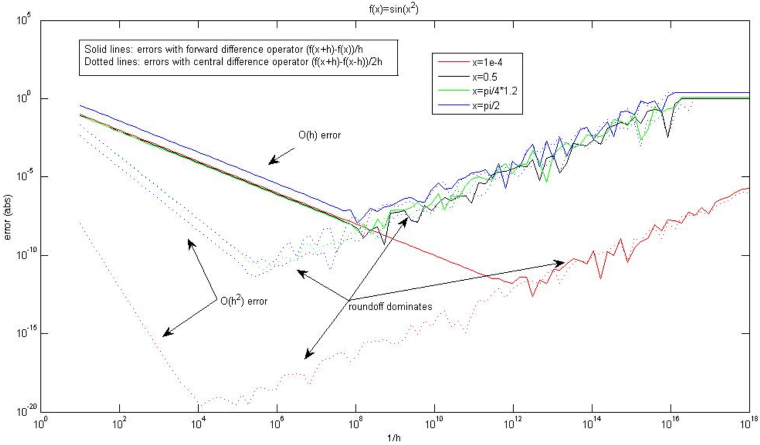
- Ποιά είναι η σχέση μεταξύ της λύσης του διακριτού συστήματος $A\hat{U}(h) = f$ και της λύσης της ΔΕ u;
- Προσέξτε υπάρχουν 2 ειδών σφάλματα! Αυτά που προκύπτουν από την επίλυση του γραμμικού συστήματος (στρογγύλευσης, βλ. ενότητες 4 και 5) και εκείνα που οφείλονται στο ότι αντικαταστήσαμε τις παραγώγους με πεπερασμένες διαφορές και λαμβάνουμε ως λύση τις τιμές που ικανοποιούν τις εξισώσεις πεπερασμένων διαφορών (αποκοπής).
- Όσον αφορά στις πεπερασμένες διαφορές, επιθυμούμε σύγκλιση: Δηλαδή, οι διαφορές $\max_j |U_j(h) - u(x_j)| \to 0$ καθώς $h \to 0$.
- ΠΡΑΚΤΙΚΑ επιθυμούμε το μέγιστο σφάλμα $\max_j |u(x_j) - \hat{U}_j|$ ή γράφοντας (καταχρηστικά) $\|u - \hat{U}\|_\infty$ να είναι μικρότερο από κάποιο αποδεκτό επίπεδο.
- Προσέξτε:

$$\|u - \hat{U}\|_\infty \leq \|u - U\|_\infty + \|U - \hat{U}\|_\infty$$

- δεξιά 1ος όρος: αφορά τη σύγκλιση της μεθόδου διακριτοποίησης και το σφάλμα αποκοπής. Με u συμβολίζουμε εδώ το διάνυσμα των τιμών $u(x_j)$ στους κόμβους του πλέγματος.
- δεξιά 2ος όρος: αφορά το εμπρός σφάλμα στη λύση του γραμμικού συστήματος.

Παράδειγμα: Σφάλματα εμπρος και κεντρισμένων διαφορών

Παραγώγιση της $\sin(x^2)$



Συζήτηση

όταν $-u''(x) = f(x)$: Χρησιμοποιούμε

$$\mathcal{L}u(x) = -\frac{d^2}{dx^2}u(x), \quad \mathcal{L}_h u(x_j) = -\frac{(u(x_j - h) - 2u(x_j) + u(x_j + h))}{h^2}$$

Σε αριθμητική άπειρης ακρίβειας, στους κόμβους του πλέγματος:

$$\mathcal{L}u = f, \quad \mathcal{L}_h u = f + T, \quad \mathcal{L}_h U = f$$

όπου $T = [\tau(x_1), \ldots, \tau(x_n)]^\top$ και $\tau(x_j) = \frac{h^2}{12}u^{(4)}(\xi_j)$ περιέχει το (άγνωστο) τοπικό σφάλμα αποκοπής στο x_j.
Από τα 2 τελευταία (οι τελεστές είναι γραμμικοί)

$$\mathcal{L}_h(u - U) = T$$

Επομένως

$$\|u - U\| = \|\mathcal{L}_h^{-1}T\| \leq \|\mathcal{L}_h^{-1}\|\|T\|$$

Παρατηρούμε ότι αν καθώς $h \to 0$, έχουμε

- $\|T\| \to 0$ (ΣΥΝΕΠΕΙΑ)
- $\|\mathcal{L}_h^{-1}\|$ να είναι φραγμένο (ΕΥΣΤΑΘΕΙΑ)

τότε έχουμε και ΣΥΓΚΛΙΣΗ.

Σχετικά με την ΕΥΣΤΑΘΕΙΑ:

Φαίνεται ότι $\mathcal{L}_h = \frac{1}{h^2} A_n$

Επομένως $\mathcal{L}_h^{-1} = h^2 A_n^{-1}$ άρα πρέπει να εξετάσουμε για μικρό $h = \frac{1}{n+1}$ το μέγεθος του

$$\|h^2 A_n^{-1}\| = h^2 \|A_n^{-1}\|$$

Πειραματική μελέτη για $n = 20, 40, 80, \ldots.$ υπολογίστε $\frac{1}{(n+1)^2} \|A_n^{-1}\|_\infty$

Αναλυτική απόδειξη: Το A_n είναι ΣΘΟ και οι ιδιοτιμές του είναι $\lambda_j = 2 - 2\cos(\frac{j\pi}{n+1})$ άρα η μικρότερη ιδιοτιμή είναι

$$\lambda_1 = 4\sin^2(\frac{\pi}{2(n+1)}) \approx \frac{\pi^2}{(n+1)^2}$$

Άρα

$$\frac{1}{(n+1)^2} \|A_n^{-1}\|_2 \approx \frac{1}{(n+1)^2} \frac{(n+1)^2}{\pi^2} = \frac{1}{\pi^2}$$

Βιβλιογραφική σημ. Η απόδειξη και οι τύποι για τα ιδιανύσματα υπάρχουν σε πολλά βιβλία. Δείτε (προαιρετικά) εδώ.

Παρατηρήσεις

$$\|u - \hat{U}\|_\infty \leq \|u - U\|_\infty + \|U - \hat{U}\|_\infty$$

δ. 1ος όρος: αφορά στη σύγκλιση της μεθόδου διακριτοποίησης και το σφάλμα αποκοπής. ΘΑ ΚΥΡΙΑΡΧΕΙ ΟΤΑΝ h ΜΕΓΑΛΟ.

δ. 2ος όρος: αφορά στο εμπρός σφάλμα στη λύση του γραμμικού συστήματος. ΘΑ ΚΥΡΙΑΡΧΕΙ ΟΤΑΝ h ΜΙΚΡΟ λόγω του ότι ο δ.κ. $\kappa_2(h^2 A_n) = O(n^2)$.

Ζητούμενο

Επιθυμούμε να επιλέξουμε τη διακριτότητα h και τον επιλυτή του γραμμικού συστήματος έτσι ώστε το συνολικό σφάλμα να παραμένει κάτω από ένα αποδεκτό επίπεδο και ισορροπημένα ώστε να επιτυγχάνεται εξοικονόμιση πόρων.

Γενικό πρόβλημα 2 συνοριακών τιμών

Έστω ότι η άγνωστη μεταβλητή $u(x)$ έχει πεδίο ορισμού το $\Omega = [X_L, X_U]$ και ότι ικανοποιεί τη ΔΕ

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

Γράφουμε

$$\mathcal{L}(u, b, c, d, x) = 0$$

Το πρόβλημα είναι να υπολογίσουμε το $u(x)$ στο $X_L < x < X_U$.
Συνοριακές τιμές/συνθήκες: τιμές για το u ή για τις παραγώγους στα «άκρα του χωρίου» X_L και X_U.

ΔΕ 2ης τάξης $\rightarrow$ πρόβλημα 2 συνοριακών τιμών

Συνοριακές συνθήκες

Κάθε συνοριακή συνθήκη, μπορεί

- να αναφέρεται στην τιμή της συνάρτησης (Dirichlet),
- ή στην τιμή παραγώγου της συνάρτησης (Neumann),
- ή συνδυασμό των παραπάνω (Robin),
- ή να διατυπώνει περιοδικότητα της λύσης.
- Κωδικοποιούμε ως $\mathcal{B}(u, x) = 0$ όπου $\mathcal{B}$ κάποιος τελεστής.
- Προσοχή: Οι συνοριακές συνθήκες επιδρούν στην ύπαρξη και μοναδικότητα της λύσης της ΔΕ.

Παράδειγμα π.χ. για το γραμμικό συνοριακό πρόβλημα 2 σημείων θα μπορούσαμε να έχουμε

- $u(X_L) = \gamma_1, u(X_U) = \gamma_2$
- $\frac{du}{dx}|_{X_L} = \gamma_1, \frac{du}{dx}|_{X_R} = \gamma_2$ ή και
- $\gamma_1 u(x_L) + \gamma_2 \frac{du}{dx}|_{X_L} = \gamma_1, \delta_1 u(x_U) + \delta_2 \frac{du}{dx}|_{X_U} = \gamma_2$,
- $u(X_L) = u(X_U) = \gamma$ (περιοδικές συνοριακές τιμές)

Διακριτοποίηση χωρίου

«Πλέγμα» Ω_h από $n+2$ ισαπέχοντες «κόμβους» στο $[X_L, X_U]$.

$$\Omega_h := \{x_j | x_j = X_L + jh, j = 0, \ldots, n+1, h = \frac{X_U - X_L}{n+1}\}.$$

$x_0 = X_L, x_{n+1} = X_U$ καλούνται ακραία ή συνοριακά σημεία.

$$\boxed{\text{Αντιστοιχία } u(x_j) \leftrightarrow U_j}$$

Η διακριτοποίηση χωρίου με κατάλληλο πλέγμα είναι σημαντικό θέμα.

- ιδιαίτερα για πολύπλοκα αντικείμενα.
- ώστε να αναπαραστώνται με τη δέουσα λεπτομέρεια περιοχές στις οποίες η λύση αναμένεται να μην είναι ομαλή, π.χ. περιοχές με ιδιαίτερα σημεία, γωνίες, κλπ.

Στο παρελθόν «με το χέρι», πολύ χρονοβόρα. π.χ. το πλέγμα για την αναπαράσταση ροής γύρω από αεροσκάφος απαιτούσε 6 μήνες, ενώ σήμερα ο χρόνος έχει μειωθεί στις 2-3 εβδομάδες.

Τα πλέγματα που χρησιμοποιούν οι κατασκευαστές αντικειμένων κάθε είδους (από αεροπλάνα μέχρι μικροεργαλεία) είναι συνήθως «απόρρητα».

Διακριτοποίηση ΔΕ

Χρησιμοποιούμε συνήθως κεντρισμένες προσεγγίσεις

$$\begin{aligned} \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h} &\approx u_j^{(1)} \\ \frac{u_{j-1} + u_{j+1} - 2u_j}{h^2} &\approx u_j^{(2)} \end{aligned}$$

Η ποιότητα της προσέγγισης εξαρτάται από

1. το μέγεθος του h
2. το μέγεθος των παραγώγων $u^{(3)}, u^{(4)}$.

Θεωρώντας τους όρους $O(h^2)$ αμελητέους γράφουμε n εξισώσεις πεπερασμένων διαφορών για τις αγνωστές τιμές U_j

$$\frac{-U_{j-1} - U_{j+1} + 2U_j}{h^2} + b_j \frac{U_{j+1} - U_{j-1}}{2h} + c_j U_j = f_j, j = 1, ..., n$$

- Αν έχουμε συνοριακές συνθήκες Dirichlet,

  $$U_0 = u(x_0), U_{n+1} = u(x_{n+1})$$

  τις αξιοποιούμε για τις εξισώσεις στους κόμβους x_1, x_n:

$$\begin{aligned}
\frac{-U_0 - U_2 + 2U_1}{h^2} + b_1 \frac{U_2 - U_0}{2h} + c_1 U_1 &= f_1 \\
\frac{-U_{n-1} - U_{n+1} + 2U_n}{h^2} + b_n \frac{U_{n+1} - U_{n-1}}{2h} + c_n U_n &= f_n
\end{aligned}$$

Συλλέγοντας όλες τις εξισώσεις

$$
\begin{aligned}
\frac{-U_2+2U_1}{h^2}+b_1\frac{U_2}{2h}+c_1U_1 &= f_1+\frac{u_0}{h^2}+b_1\frac{u_0}{2h}\\
\frac{-U_{j-1}-U_{j+1}+2U_j}{h^2}+b_j\frac{U_{j+1}-U_{j-1}}{2h}+c_jU_j &= f_j, j=2,\dots,n-1\\
\frac{-U_{n-1}+2U_n}{h^2}+b_n\frac{-U_{n-1}}{2h}+c_nU_n &= f_n+\frac{u_{n+1}}{h^2}-b_n\frac{u_{n+1}}{2h}
\end{aligned}
$$

και ομαδοποιώντας για κάθε άγνωστο, προκύπτουν n εξισώσεις:

$$
\begin{aligned}
(c_1+\frac{2}{h^2})U_1+(-\frac{1}{h^2}+\frac{b_1}{2h})U_2 &= f_1+\frac{u_0}{h^2}+b_1\frac{u_0}{2h}\\
-(\frac{1}{h^2}+\frac{b_j}{2h})U_{j-1}+(c_j+\frac{2}{h^2})U_j+(-\frac{1}{h^2}+\frac{b_j}{2h})U_{j+1} &= f_j, j=2,\dots,n-1\\
(-\frac{1}{h^2}-\frac{b_n}{2h})U_{n-1}+(c_n+\frac{2}{h^2})U_n &= f_n+\frac{u_{n+1}}{h^2}-b_n\frac{u_{n+1}}{2h}
\end{aligned}
$$

Γράφουμε συνοπτικά $AU = F$
<u>Χαρακτηριστικά:</u> Τριδιαγώνιο μητρώο με στοιχεία

$$\begin{pmatrix} \frac{2}{h^2}+c_1 & -\frac{1}{h^2}+\frac{b_1}{2h} & & \\ -\frac{1}{h^2}-\frac{b_2}{2h} & \frac{2}{h^2}+c_2 & -\frac{1}{h^2}+\frac{b_2}{2h} & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & -\frac{1}{h^2}-\frac{b_n}{2h} & \frac{2}{h^2}+c_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ U_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_1)+(\frac{1}{h^2}+\frac{b_1}{2h})u(x_0) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_n)+(\frac{1}{h^2}-\frac{b_n}{2h})u(x_{n+1}) \end{pmatrix}$$

Ακόμα πιο συνοπτικά μπορούμε να γράψουμε:

$$A = \mathrm{trid}_n[\gamma_j, \alpha_j, \beta_j]$$

όπου

$$\alpha_j = (\frac{2}{h^2}+c_j), \gamma_j = (-\frac{1}{h^2}-\frac{b_j}{2h}), \beta_j = (-\frac{1}{h^2}+\frac{b_j}{2h})$$

Σχετικά με το είδος του μητρώου

- τριδιαγώνιο
- συμμμετρικό; Όταν $b(x) = 0$.
- Toeplitz; Όταν $b(x)$ και $c(x)$ είναι σταθερές.

Προσοχή: Η ύπαρξη παραγώγων περιττής τάξης φαίνεται εμπόδιο στην παραγωγή συμμετρικών συστημάτων (εκφράζεται με ασσυμετρία των συντελεστών στους τύπους των πεπερασμένων διαφορών).
Αυτοσυζυγής μορφή Πολλές φορές η ΔΕ έχει την αυτοσυζυγή μορφή:

$$-(a(x)u_x)_x \quad = \quad f(x)$$

για συνάρτηση $a(x)$. Στη συνέχεια θα δούμε ότι μπορούμε να την διακριτοποιήσουμε ώστε το προκύπτον μητρώο να είναι συμμετρικό.

Κατασκευή συμμετρικών συστημάτων

$$-(a(x)u_x)_x \quad = \quad f(x)$$

Πώς διακριτοποιούμε;
Αν παραγωγίσουμε πρώτα:

$$-a(x)u_{xx} - a_x(x)u_x \quad = \quad f(x)$$

η εξίσωση είναι όπως η πριν και το σύστημα μη συμμετρικό.
Εναλλακτικά:

$$\begin{aligned}
-(a(x)u_x)_x &\approx -\frac{a(x_{i+\frac{1}{2}})u_x(x_{i+\frac{1}{2}}) - a(x_{i-\frac{1}{2}})u_x(x_{i-\frac{1}{2}})}{h} + O(h^2) \\
&\approx -\frac{a(x_{i+\frac{1}{2}})\frac{u(x_{i+1})-u(x_i)}{h} - a(x_{i-\frac{1}{2}})\frac{u(x_i)-u(x_{i-1})}{h}}{h} + O(h^2) \\
&\approx \frac{-a(x_{i-\frac{1}{2}})u(x_{i-1}) + (a(x_{i-\frac{1}{2}}) + a(x_{i+\frac{1}{2}}))u(x_i) - a(x_{i+\frac{1}{2}})u(x_{i+1})}{h^2} + O(h^2)
\end{aligned}$$

Συμμετρικό μητρώο!

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} a(x_{1/2})+a(x_{3/2}) & -a(x_{3/2}) & & \\ -a(x_{3/2}) & a(x_{3/2})+a(x_{5/2}) & -a(x_{5/2}) & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & -a(x_{n-1/2}) & a(x_{n-\frac{1}{2}})+a(x_{n+\frac{1}{2}}) \end{pmatrix}$$

$$F=\begin{pmatrix} f(x_1)+\frac{1}{h^2}a_(x_{1/2})u(x_0) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_n)+\frac{1}{h^2}a(x_{n+\frac{1}{2}})u(x_{n+1}) \end{pmatrix}$$

Παρατηρήσεις (προαιρετικά)

- Η ΣΔΕ

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[a(x)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right] + c(x)u = f(x)$$

  είναι αυτοσυζυγής.
- Οι ΣΔΕ 2ης τάξης μπορούν να μετατραπούν στην αυτοσυζυγή μορφή (θεωρία Sturm-Liouville)
- ... πολλαπλασιάζοντας με ολοκληρωτικού παράγοντα (integrating factor) $\exp(b(x)dx)$
- Δοθείσης μιας ΣΔΕ στη γενική μορφή, ένας τρόπος να διακριτοποιηθεί ώστε το μητρώο να είναι συμμετρικό είναι να την μετατρέψουμε πρώτα σε αυτοσυζυγή μορφή πριν διακριτοποιήσουμε.

Θέματα

$$A \quad = \quad \mathrm{trid}_n[\gamma_j, \alpha_j, \beta_j]$$

όπου

$$\gamma_j = (-\frac{1}{h^2} - \frac{b_j}{2h}), \alpha_j = (\frac{2}{h^2} + c_j), \beta_j = (-\frac{1}{h^2} + \frac{b_j}{2h})$$

- Είναι το μητρώο των συντελεστών αντιστρέψιμο;
- Αν ναι, πώς λύνουμε το σύστημα;
- Ποιά είναι η σχέση μεταξύ της λύσης του διακριτού συστήματος $A\hat{U}(h) = f$ και της λύσης της ΔΕ u;

Είναι το μητρώο αντιστρέψιμο;

- Εξετάζουμε μία σημαντική ειδική περίπτωση (και αποδεικνύουμε ΣΘΟ): $b_j = 0$, $c_j > 0 \quad \forall j$:

$$A = \frac{1}{h^2}\mathrm{trid}_n[-1, 2 + c_j h^2, -1]$$

- Η ΣΘΟ (και κατά μείζονα λόγο, η αντιστρεψιμότητα) αποδεικνύεται με πολλούς τρόπους (όλοι ενδιαφέροντες).
- Προσέξτε ότι $A = \tilde{A} + D$ όπου D είναι το διαγώνιο μητρώο με τιμές $\mathrm{diag}(c_1, \ldots, c_n)$ και $\tilde{A} = \frac{1}{h^2}\mathrm{trid}_n[-1, 2, -1]$ για το οποίο γνωρίζουμε ότι είναι ΣΘΟ (προηγούμενη συζήτηση).
- Επομένως τα $\tilde{A}$, D είναι αμφότερα ΣΘΟ επομένως αυτό ισχύει και για το άθροισμά τους, A.
- Μπορείτε επίσης να αποδείξετε ΣΘΟ με το θεώρημα Gerschgorin.

Αντιστρεψιμότητα διακριτού τελεστή μέσω θμ. Gerschgorin

Στόχος: Να δείξουμε αντιστρεψιμότητα του

$$A = \frac{1}{h^2}\mathrm{trid}_n[-1, 2 + c_j h^2, -1]$$

Θεώρημα G.: *Οι ιδιοτιμές του $[a_{ij}] = A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ βρίσκονται στην κλειστή περιοχή του μιγαδικού επιπέδου που ορίζεται από την ένωση των n δίσκων*

$$|z - \alpha_{ii}| \leq \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |\alpha_{ij}|, \qquad i = 1:n.$$

Εφαρμόζοντας το θεώρημα G.

$$\begin{gathered} \text{εφόσον } A = A^\top \Rightarrow \text{όλες οι ιδιοτιμές πραγματικές } \lambda(A) \in \mathbb{R} \\ \Rightarrow -2 \leq \lambda(A) - (2 + c_i h^2) < 2, i = 2, \ldots, n-1 \\ \Rightarrow c_i h^2 \leq \lambda(A) < 4 + c_i h^2 \\ \Rightarrow \text{αν } c_i > 0 \text{ έπεται ότι } \lambda(A) > 0. \end{gathered}$$

Στά άκρα $-1 \leq \lambda(A) - (2 + c_1 h^2) < 1$ και $-1 \leq \lambda(A) - (2 + c_n h^2) < 1$ επομένως

$$1 + c_1 h^2 \leq \lambda(A) \leq 3 + c_1 h^2, \quad 1 + c_n h^2 \leq \lambda(A) \leq 3 + c_n h^2,$$

και πάλι έπεται ότι αν $c_i > 0$, τότε $\lambda(A) > 0$, άρα ΣΘΟ και αντιστρέψιμο.

Πώς λύνεται το σύστημα;

$$-\frac{d^2u}{dx^2}(x) + b(x)\frac{du}{dx}(x) + c(x)u(x) = f(x),\, u(0) = g_1,\, u(1) = g_2$$

$$\boxed{A = \mathrm{trid}_n\left[-\frac{1}{h^2} - \frac{b_j}{2h}, \frac{2}{h^2} + c_j, -\frac{1}{h^2} + \frac{b_j}{2h}\right]}$$

Πρέπει να εκμεταλλευτούμε τη μορφή του μητρώου:

- Κεντρισμένες πεπερασμένες διαφορές 2ης τάξης

  $\Rightarrow$ τριδιαγώνιο $\rightarrow$ μέθοδος κόστους $\mathcal{O}(n)$.

- Συντελεστές και συνοριακές συνθήκες

  $\rightarrow$ συμμετρικό,

  $\rightarrow$ θετικά ορισμένο $\rightarrow$ Cholesky

  $\rightarrow$ Toeplitz

Συνοριακές συνθήκες Neumann

Έστω οι συνοριακές συνθήκες:

$$u_x(x_0) = g \text{ (Neumann)} \quad u(x_{n+1}) = h \text{ (Dirichlet)}$$

1) Γράφουμε μια ακόμα εξίσωση για το συνοριακό κόμβο x_0:

$$\frac{-U_{-1} - U_1 + 2U_0}{h^2} + b_0 \frac{U_1 - U_{-1}}{2h} + c_0 U_0 \quad = \quad f_0$$

όπου $U_{-1} \approx u(x_0 - h)$.
2) Διακριτοποιούμε τη συνθήκη Neumann και εκτιμούμε το U_{-1}:

$$\begin{aligned} g \quad &\approx \quad \frac{U_1 - U_{-1}}{2h} \\ &\Downarrow \\ U_{-1} \quad &= \quad U_1 - 2hg. \end{aligned}$$

3) Συνδυάζουμε τα παραπάνω και απαλείφουμε τον όρο U_{-1} από την εξίσωση

$$\frac{-(U_1 - 2hg) - U_1 + 2U_0}{h^2} + b_0 \frac{U_1 - (U_1 - 2hg)}{2h} + c_0 U_0 \quad = \quad f_0$$

Το διακριτό σύστημα είναι:

$$\begin{aligned}
(2+\frac{c_0}{h^2})U_0 - \frac{2}{h^2}U_1 &= f_0 - 2\frac{g}{h} + b_0 g \\
-(\frac{1}{h^2}+\frac{b_j}{2h})U_{j-1} + (c_j + \frac{2}{h^2})U_j + (-\frac{1}{h^2}+\frac{b_j}{2h})U_{j+1} &= f_j, j = 1, \ldots, n-1 \\
(-\frac{1}{h^2}-\frac{b_n}{2h})U_{n-1} + (c_n + \frac{2}{h^2})U_n &= f_n + \frac{u_{n+1}}{h^2} - b_n\frac{u_{n+1}}{2h}
\end{aligned}$$

Παρατήρηση: Το τελικό σύστημα έχει $n+1$ εξισώσεις και αγνώστους $\left(U_0, U_1, \ldots, U_n\right)^\top$. Για μια συνοριακή συνθήκη με παράγωγο στο ένα άκρο και πεπερασμένες διαφορές 2ης τάξης, είσαγαμε 1 εξίσωση επιπλέον.

Προσοχή: Αν ισχύουν συνθήκες Neumann και στα 2 άκρα, τότε θα υπήρχαν 2 επιπλέον εξισώσεις. Επίσης, το μητρώο δεν θα είναι αντιστρέψιμο.

Μορφή συστήματος για Poisson με Neumann-Neumann

Αν ακολουθήσουμε τα παραπάνω βήματα στην

$$-u_{xx} + b(x)u_x + c(x)u = f(x), x \in [X_L, X_U] \;\; u_x(x)|_{x=X_L} = g, u_x(x)|_{x=X_U} = h$$

το σύστημα θα έχει τη μορφή

$$A_{NN}U = F, \quad A_{NN} \in \mathbb{R}^{(n+2)\times(n+2)}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{2}{h^2}+c_0 & -\frac{2}{h^2} & & & & \\ -\frac{1}{h^2}-\frac{b_1}{2h} & \frac{2}{h^2}+c_1 & -\frac{1}{h^2}+\frac{b_1}{2h} & & & \\ & -\frac{1}{h^2}-\frac{b_2}{2h} & \frac{2}{h^2}+c_2 & -\frac{1}{h^2}+\frac{b_2}{2h} & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -\frac{1}{h^2}-\frac{b_n}{2h} & \frac{2}{h^2}+c_n & -\frac{1}{h^2}+\frac{b_n}{2h} \\ & & & & -\frac{2}{h^2} & \frac{2}{h^2}+c_{n+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_0 \\ U_1 \\ \vdots \\ U_n \\ U_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_0 \\ F_1 \\ \vdots \\ F_n \\ F_{n+1} \end{pmatrix}$$

<u>ΠΡΟΣΟΧΗ</u> Αν $c(x) = 0$ τότε το μητρώο δεν είναι αντιστρέψιμο: $A_{\mathrm{NN}}e = 0$ (ο μηδενόχωρος περιέχει το e) όπως και η ΔΕ δεν έχει μοναδική λύση. Η γενική λύση του συστήματος θα είναι $U + \gamma e$.

Παράδειγμα

$\mathcal{L}$: $-\frac{d^2u}{dx^2}(x) + xu(x) = (9+x)\sin 3x$

$\mathcal{B}$: $u(0) = 0, u(\pi/6) = 1$

Ω: $[0, \pi/6]$

- $h = \frac{\pi}{6(n+1)}, \Omega_h = \{x_j = jh | j = 0, ..., n+1\}$
-

$$
\begin{aligned}
(x_1 + \frac{2}{h^2})U_1 - \frac{1}{h^2}U_2 &= (9 + x_1)\sin 3x_1 \\
-\frac{1}{h^2}U_{j-1} + (x_j + \frac{2}{h^2})U_j - \frac{1}{h^2}U_{j+1} &= (9 + x_j)\sin 3x_j, j = 2, \ldots, n-1 \\
-\frac{1}{h^2}U_{n-1} + (x_n + \frac{2}{h^2})U_n &= (9 + x_n)\sin 3x_n + \frac{1}{h^2}
\end{aligned}
$$

$\hookrightarrow AU = F$ όπου

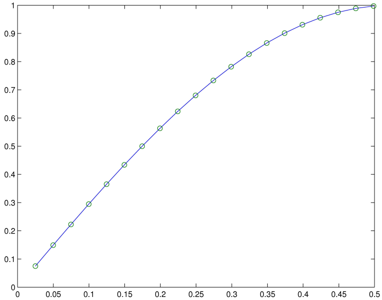
$$A = \mathrm{trid}_n[\gamma_j, \alpha_j, \beta_j]$$

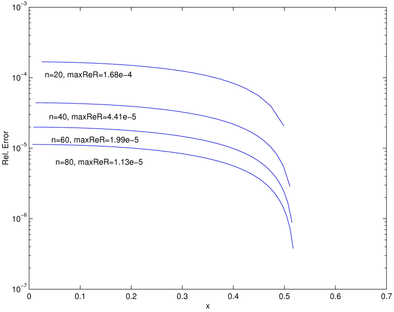
$$\alpha_j = (\frac{2}{h^2} + jh), \gamma_j = -\frac{1}{h^2}, \beta_j = -\frac{1}{h^2}$$

ενώ

$$\begin{aligned} F_j &= (9 + jh)\sin 3x_j, \qquad j = 1, ..., n-1 \\ F_n &= (9 + nh)\sin 3x_n + \frac{1}{h^2} \end{aligned}$$

Λύνουμε $AU = F$ χρησιμοποιώντας Cholesky για τριδιαγώνια συστήματα (κόστος $O(n)$) και συγκρίνουμε τις υπολογισμένες τιμές του U με τις τιμές της ακριβούς λύσης u.


0
0.05
0.1
0.15
0.2
0.25
0.3
0.35
0.4
0.45
0.5
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
0.6
0.7
0.8
0.9
1


10^{-3}
10^{-4}
10^{-5}
10^{-6}
10^{-7}
Rel. Error
x
0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
0.6
0.7
n=20, maxReR=1.68e−4
n=40, maxReR=4.41e−5
n=60, maxReR=1.99e−5
n=80, maxReR=1.13e−5

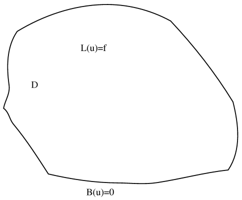
Εξίσωση Poisson σε 2 διαστάσεις

$\mathcal{L}$: $-(u_{xx} + u_{yy}) = f(x, y)$ (αποκαλείται εξίσωση Laplace αν $f \equiv 0$, και Poisson διαφορετικά.)

$\mathcal{B}$: $u(x, y)$ γνωστή στο σύνορο $\partial\Omega$.

Ω: $[0, a] \times [0, b]$.

Παρατήρηση: ΔΕ με μερικές παραγώγους (ΜΔΕ).



Έστω $h_x = \frac{a}{m+1}$, $h_y = \frac{b}{n+1}$:

$$\Omega \rightarrow \Omega_h \; = \{(x_i, y_j) | x_i = ih_x, y_j = jh_y; i = 0 : m+1, j = 0 : n+1\}$$

$\mathcal{L} \rightarrow \mathcal{L}_h$: διακριτοποίηση με κεντρισμένες διαφορές 2ης τάξης που εφόσον οι παράγωγοι $\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$, $\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}$ είναι συνεχείς στο κλειστό πεδίο ορισμού.

$$\begin{aligned} u_{xx}(x_i, y_j) &= \frac{u(x_{i-1}, y_j) - 2u(x_i, y_j) + u(x_{i+1}, y_j)}{h_x^2} + O(h_x^2) \\ u_{yy}(x_i, y_j) &= \frac{u(x_i, y_{j-1}) - 2u(x_i, y_j) + u(x_i, y_{j+1})}{h_y^2} + O(h^2) \end{aligned}$$

$$-(u_{xx}(x_i, y_j) + u_{yy}(x_i, y_j)) \approx \frac{-U_{i-1,j} + 2U_{i,j} - U_{i+1,j}}{h_x^2} + \frac{-U_{i,j-1} + 2U_{i,j} - U_{i,j+1}}{h_y^2}$$

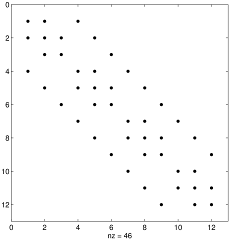
και στην περίπτωση $h_x = h_y$ και συνθηκών Dirichlet, οι εξισώσεις είναι

$$\frac{-U_{i-1,j} - U_{i,j-1} + 4U_{i,j} - U_{i+1,j} - U_{i,j+1}}{h^2} = F_{i,j}, \quad i = 1, \ldots, m; j = 1, \ldots, n$$

Τριδιαγώνιο $N \times N$ όπου $N = mn$ κατά πλοκάδες (μεγέθους m):

$$\begin{pmatrix} T & D & & & \\ D & T & D & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & D & T & D \\ & & & D & T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{1:m,1} \\ U_{1:m,2} \\ \vdots \\ \\ U_{1:m,n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_{1:m,1} \\ F_{1:m,2} \\ \vdots \\ \\ F_{1:m,n} \end{pmatrix}$$

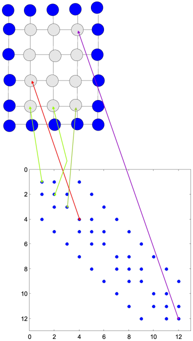
όπου $T = \mathrm{trid}_m[-\frac{1}{h_x^2}, \frac{2}{h_x^2} + \frac{2}{h_y^2}, -\frac{1}{h_x^2}]$ και $D = -\frac{1}{h_y^2} I_m$



Διάταξη κόμβων, αγνώστων

- Ως τώρα χαρακτηρίζαμε τους κόμβους και αγνώστους με ετικέτες (x_i, y_j) ή πιο απλά (i, j)
- Πολλοί τρόποι να διατάξουμε τους αγνώστους με βάση τις ετικέτες.
- Φυσική διάταξη:

$$(U_{1,1}, U_{2,1}, \ldots, U_{m,1}, U_{1,2}, \ldots, U_{m,2}, \ldots U_{m,n})^\top$$



Παράδειγμα

Πρόβλημα

$$-(u_{xx} + u_{yy}) = f(x, y), \quad (x, y) \in [0, 1] \times [0, 1],$$

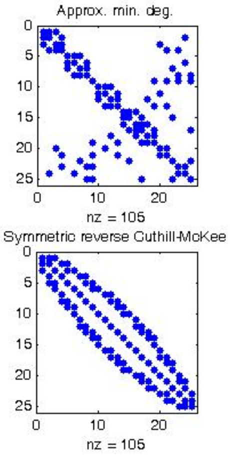
Συνθήκες Dirichlet: δίδονται τα $u(0, y), u(1, y), u(x, 0), u(x, 1)$

Διακριτοποίηση κεντρισμένες διαφορές με $m = 4, n = 3$.

$$A = \left(\begin{array}{cccc|cccc|cccc}
82 & -25 & 0 & 0 & -16 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-25 & 82 & -25 & 0 & 0 & -16 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -25 & 82 & -25 & 0 & 0 & -16 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -25 & 82 & 0 & 0 & 0 & -16 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
-16 & 0 & 0 & 0 & 82 & -25 & 0 & 0 & -16 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -16 & 0 & 0 & -25 & 82 & -25 & 0 & 0 & -16 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -16 & 0 & 0 & -25 & 82 & -25 & 0 & 0 & -16 & 0 \\
0 & 0 & 0 & -16 & 0 & 0 & -25 & 82 & 0 & 0 & 0 & -16 \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 & -16 & 0 & 0 & 0 & 82 & -25 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -16 & 0 & 0 & -25 & 82 & -25 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -16 & 0 & 0 & -25 & 82 & -25 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -16 & 0 & 0 & -25 & 82
\end{array}\right)$$

Εναλλακτικές διατάξεις: Μέσω εντολών που περιέχονται στη συλλογή sparfun της MATLAB.

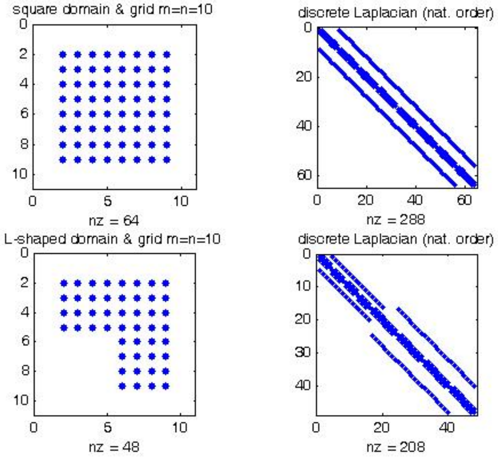
Πλέγματα και μητρώα ($m = n = 5$)



Χωρία, πλέγματα & μητρώα για Poisson

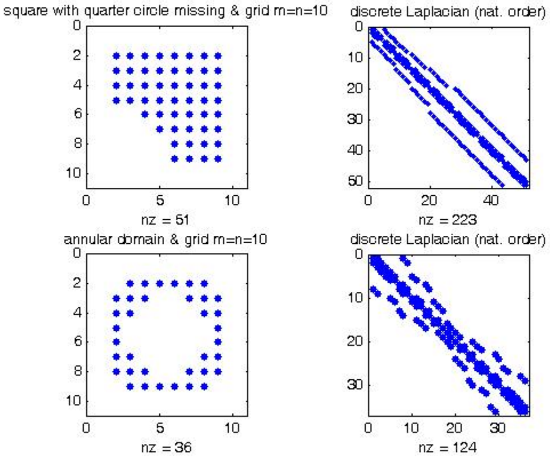
$(h_x = 2/11, h_y = 2/11$, φυσικ. αρίθμ.)

Παρατήρηση: Με τις εντολές MATLAB: `numgrid, delsq`



Χωρία, πλέγματα & μητρώα για Poisson

($h_x = 2/11$, $h_y = 2/11$, φυσικ. αρίθμ.)



Βιβλιογραφία I

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

Χρήση Έργου Τρίτων I

1. https://dl.dropboxusercontent.com/u/13035829/Teach/SC/GGnotes14.pdf (βλ. σελ 8)

Σημείωμα Αναφοράς

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

Τέλος Ενότητας

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
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ