

Znanstveno računanje 2

3. i 4. predavanje

Saša Singer

singer@math.hr

web.math.hr/~singer

PMF – Matematički odjel, Zagreb

Sadržaj predavanja

- **Primjer iz prakse** (nastavak):
 - Model hlađenja u pećima za prokaljivanje plinom.
 - Modelni problem — jednačba provođenja topline u 1D.
- **Parabolička jednačba u jednoj dimenziji:**
 - Linearni i nelinearni oblik problema.
 - Opći oblik rubnih uvjeta.
 - Numeričko deriviranje — osnovne formule za funkcije jedne varijable.
 - Formule za ODJ — po vremenu.
 - Diskretizacija paraboličke jednačbe i “mrežna” aproksimacija.

Sadržaj predavanja (nastavak)

- Razni oblici diskretizacija i numeričko rješavanje:
 - Eksplicitna metoda — linearni problem.
 - Stabilnost eksplicitne metode — problem izbora koraka.
 - Implicitna metoda — linearni problem.
 - Implicitna metoda — nelinearni problem.
 - Crank–Nicolson metoda — linearni problem.
 - Crank–Nicolson metoda — nelinearni problem.
 - Diskretizacija rubnih uvjeta — dodatne jednačbe.
 - Rješavanje tridijagonalnog linearnog sustava.
 - Metoda jednostavne iteracije za nelinearni problem.

Informacije

Konzultacije (trajno, nažalost):

🕒 utorak, 16–17 sati, petak, 19–20 sati.

Sljedeća dva petka — 10. 4. i 17. 4., **nema** konzultacija.

Promjena termina nastave — **sređeno**:

🕒 utorak, 14–16 sati, ovdje u **Praktikumu 1**.

Sljedeći tjedan **imamo** nastavu, da nadoknadimo prošli tjedan.

Primjer iz prakse

Sadržaj

- Primjer iz prakse (nastavak):
 - Model hlađenja u pećima za prokaljivanje plinom.
 - Modelni problem — jednažba provođenja topline u 1D.

Što se zbiva — osnovne stvari u modelu

Što se stvarno **zbiva**? **Komad** čelika ili legure

- **prvo** se termički obrađuje u peći na **visokoj** temperaturi,
- a **zatim prokaljuje** — naglo **hladi**, jakim puhanjem hladnog plina.
- Plin se posebno hladi u izmjenjivaču topline (IT).

Treba modelirati **drugu** fazu obrade — **prokaljivanje** komada.

Osnovne stvari u **modelu**:

- **Komad** je **prostorno** opisan/zadan područjem $\Omega \subset \mathbb{R}^3$.
- **Prokaljivanje počinje** u trenutku $t = 0$.
- U tom trenutku, **cijeli komad** ima **konstantnu početnu** temperaturu T_0 .

Osnovne stvari u modelu i što se traži

Pretpostavka $T_0 = \text{const}$ je **realistična** u konkretnoj situaciji, nakon termičke obrade komada, tik prije **prokaljivanja**.

- Tipične vrijednosti T_0 mogu **dostići** 1100°C .

Što se **traži**?

- Treba naći **raspodjelu temperature** T u **komadu** za vrijeme **prokaljivanja**,
- tj. naći T kao funkciju **položaja** $x \in \Omega$ i **vremena** $t > 0$.

Model:

- Raspodjela **temperature** u tom komadu **određena** je **jednadžbom** **provođenja topline**.

Model — jednađba provođenja topline

Jednađba provođenja topline (JPT) ima oblik

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} T),$$

uz oznake:

$x \in \Omega$ — prostorne koordinate, svaka u [m],

$t \geq 0$ — vrijeme [s],

$T = T(x, t)$ — temperatura [°C] ili [K].

Fizikalna svojstva materijala od kojeg je napravljen komad su:

ρ — gustoća [kg/m³],

c — specifična toplina [J/(kg K)],

λ — toplinska vodljivost [W/(m K)].

Nelinearnost modela — jednađbe

Napomena. Zbog **raspona** temperature u procesu, **sva** fizikalna svojstva

$$\rho, c, \lambda$$

izravno **ovise** o temperaturi T — **rješenju** jednađbe.

Ako želimo razumno **točan** model, ova svojstva

● **ne možemo** uzeti **konstantnima**, tj. neovisnim o T .

Zato cijeli problem postaje **nelinearan**!

Implicitno — preko T , “koeficijenti” ρ , c , i λ u jednađbi

● postaju **funkcije** od x i t .

Tako ih “**tretiramo**” kod numeričkog rješavanja jednađbe.

Početni i rubni uvjeti

Početni uvjet je konstantna raspodjela temperature

$$T(x, 0) = T_0, \quad x \in \Omega.$$

Ova pretpostavka nije naročito bitna.

☛ Funkcija T_0 smije ovisiti o položaju x .

To ništa ne mijenja u postupku rješavanja jednadžbe.

Rubni uvjeti trebaju reprezentirati prijelaz toplinske energije između

☛ površine komada ($\partial\Omega$) i

☛ okolnog medija prokaljivanja — to je hladni plin, koji se “upuhuje” velikom brzinom i pod velikim pritiskom.

Rubni uvjeti — Newtonov zakon hlađenja

Model ponašanja na rubu $\partial\Omega$ je Newtonov zakon hlađenja

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = -\alpha (T - T_x),$$

gdje je:

n — vanjski vektor normale na $\partial\Omega$,

T_x — temperatura okolnog hladnog plina [$^{\circ}\text{C}$] or [K],

α — Newtonov koeficijent površinskog prijenosa topline [$\text{W}/(\text{m}^2 \text{K})$].

Općenito, obje veličine — temperatura T_x i koeficijent α

ovise o (x, t) na rubu $\partial\Omega$.

Rubni uvjet — inverzni problem

U ovom modelu rubnih uvjeta

- vanjsku temperaturu T_x možemo smatrati poznatom (na primjer, izmjenom),
- ali, koeficijent α je nepoznat.

Drugim riječima, da bismo iskoristili ovaj model,

- prvo treba naći α ,

što znači da treba riješiti inverzni problem!

Kako izračunati α za dani komad, uz dane uvjete ohlađivanja?

Rješenje inverznog problema

Opći **numerički postupak** je:

- **mjeriti temperature pri**, ili **na rubu** komada,
- iskoristiti ta mjerenja kao **Dirichletove rubne uvjete** i riješi **jednadžbu provođenja topline**,
- **produljiti** ili **ekstrapolirati** rješenje prema rubu (ako treba),
- **izračunati α** numeričkim deriviranjem.

Nažalost, gotovo **nemoguće** je razumno točno **izmjeriti** bilo koji **rubni uvjet** u **3D** prostoru,

- na pr., temperaturu **pri rubu**, ili **vanjsku** temperaturu.

Tj., imamo **nerješivi model!**

Redukcija dimenzije u modelu

Dakle, prisiljeni smo na dodatno **pojednostavljenje**:

- **reducirati** nerješivi **3D** model na jedan od **standardnih** (i rješivih) **1D** modela.

Dvije osnovne **geometrije** koje dozvoljavaju **1D** model su:

- **beskonačna ploča**,
- **beskonačni cilindar**.

U nastavku slijedi opis **računanja** α za “**beskonačne**” ploče. Postupak za “**beskonačne**” **cilindre** je vrlo sličan.

Da ne bi bilo “**prejednostavno**”, gledamo

- **asimetrično** ili **dvostrano** hlađenje — tzv. **ležeća** ploča,
- za razliku od **simetričnog** hlađenja — tzv. **stojeća** ploča.

Model beskonačne ploče

U modelu **beskonačne ploče** imamo:

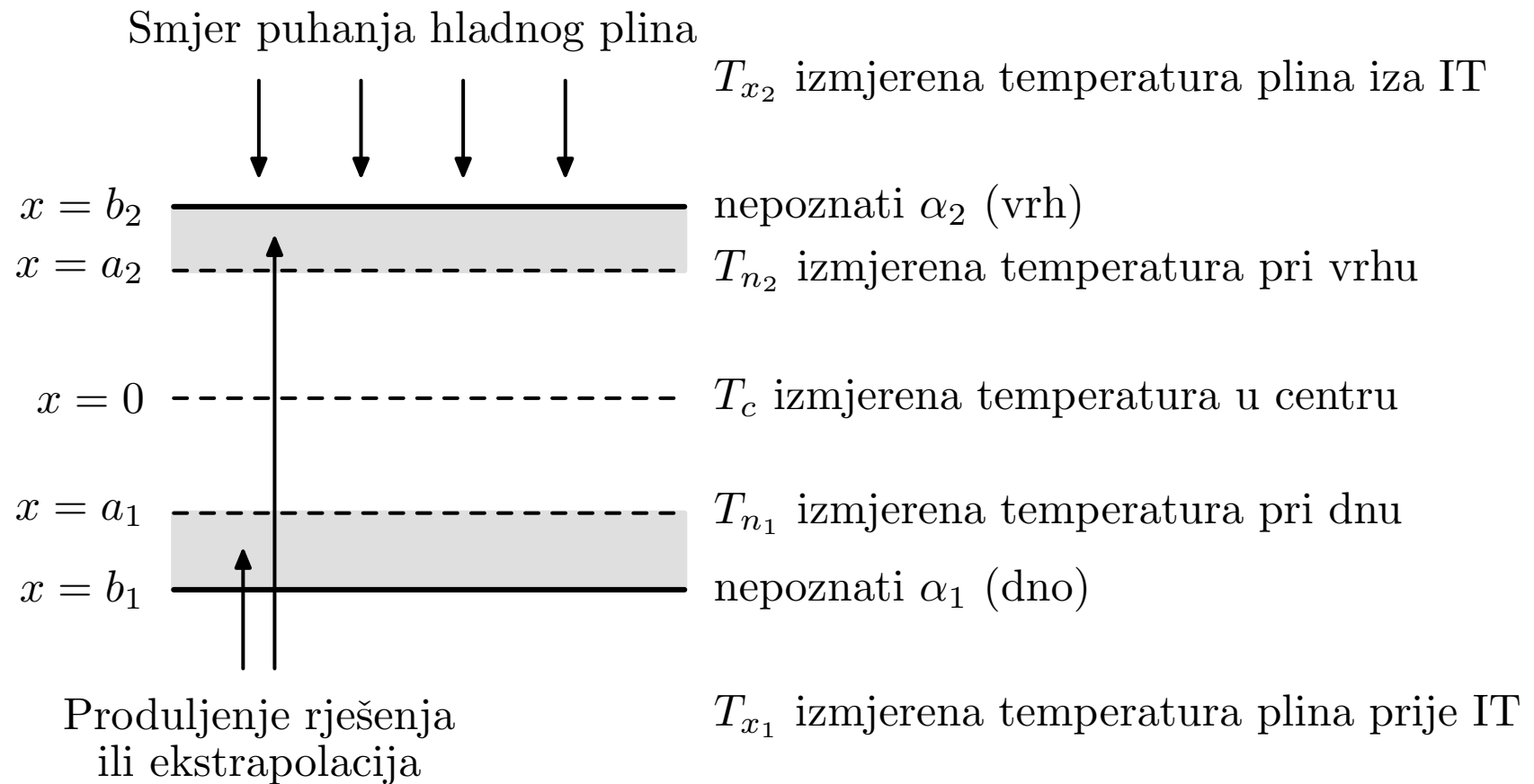
- tanku ležeću čeličnu ploču,
- inicijalno **zagrijanu** na uniformnu temperaturu T_0 ,
- **hlađenu** plinom koji puše **iznad** ploče.

Plin, zatim, prolazi kroz izmjenjivač topline (IT) i hladi se, prije nego što se opet upuhuje odozgo.

Modelna situacija je prikazana na sljedećoj slici, koja pokazuje

- **presjek** ploče, i
- **položaje termo-elemenata** za mjerenje temperature.

Model beskonačne ploče — slika



Izmjerene temperature

Model, za sebe, **zahtijeva** samo 4 izmjerene temperature

$$T_{n_1}, T_{n_2}, T_{x_1}, T_{x_2}.$$

U **praksi**, obično se još mjeri i T_c u **jezgri** (ili centru) ploče, koja služi kao **referentna** vrijednost, za **provjeru rezultata**.

Sve temperature se mjere u **diskretnim vremenskim** trenucima,

- obično **razmaknutim 1 s**, ali razmak može ići i do **10 s** u nekim slučajevima,
- do nekog **završnog trenutka** t_{final} , tipično **1800 s**,
- i **zaokružuju** na najbliži $^{\circ}\text{C}$.

Izmjerene temperature komada

U praksi je **točno** mjerenje **površinskih** temperatura (u b_1 i b_2) **gotovo nemoguće**.

Stvarna mjerenja se **vrše** u točkama a_1 i a_2 **ispod** površine, tako da je $b_1 < a_1$ i $a_2 < b_2$.

Zato **rješenje** problema treba “**produljiti**” s $[a_1, a_2]$ na $[b_1, b_2]$.
To se može napraviti

- metodom **kvazi-reverzibilnosti** (Lattès i Lions), ili
- **jednostavnom ekstrapolacijom**, ako su dubine $|b_i - a_i|$ relativno **male**, obzirom na ukupnu **debljinu** $b_2 - b_1$ ploče.

Eksperimenti pokazuju da je **jednostavna ekstrapolacija** dovoljna za dubine $\leq 10\%$ ukupne debljine. Radi i do **20%**.

Numeričko rješenje — 1. faza

Stvarni računanje se provodi u dvije faze.

Faza 1: Računanje α (inverzni problem), $t \in [0, t_{\text{final}}]$:

- riješi JPT na $[a_1, a_2]$ s izmjerenim temperaturama T_{n_1} i T_{n_2} kao rubnim uvjetima,
- produlji ili ekstrapoliraj rješenja na $[b_1, b_2]$,
- izračunaj α_1, α_2 , koristeći izmjerene temperature plina T_{x_1} i T_{x_2} , respektivno,
- provjeri greške u izračunatoj centralnoj temperaturi, obzirom na T_c (jedna referentna točka).

Numeričko rješenje — 2. faza

Faza 2: Verifikacija modela (direktni problem), $t \in [0, t_{\text{final}}]$:

- riješi JPT na $[b_1, b_2]$ s Newtonovim zakonom hlađenja kao rubnim uvjetom, koristeći izračunate α_1, α_2 (iz Faze 1),
- provjeri greške u izračunatim temperaturama u a_1 , centru i a_2 , obzirom na T_{n_1}, T_c i T_{n_2} (tri referentne točke).

U simetričnom problemu (stojeća ploča) je $T_{n_1} = T_{n_2}$ i $T_{x_1} = T_{x_2}$, pa je dovoljno

- riješiti “pola” problema na $[0, a_2]$, odnosno, $[0, b_2]$,
- a rubni uvjet u 0 je Neumannov (simetrija).

Numeričko rješenje — problemi i pristupi

Točna i efikasna **implementacija** obje faze sadrži nekoliko zanimljivih **numeričkih problema**.

- Sve **izmjerene temperature** (osim T_c) moraju biti **izgladene** prije korištenja. To se radi
 - **kubičnom splajn** aproksimacijom u smislu **najmanjih kvadrata** (Dierckx).
- **Isto** vrijedi i za sve **izračunate** vrijednosti $\alpha(t)$ (funkcije, a ne tablice).
- **Rješavanje** JPT se radi **nelinearnom implicitnom metodom** (u obje faze). **Nelinearnost** se rješava
 - **jednostavnom iteracijom** u svakom **vremenskom koraku**.

Numeričko rješenje — problemi i pristupi

Ključna stvar za **točnost**:

- **Numeričko deriviranje** — potrebno za α , bazirano je na
 - aproksimaciji **polinomima niskog stupnja** u smislu **najmanjih kvadrata**,
- a **ne** na interpolaciji (bilo koje vrste).

Modelni problem u 1D

“beskonačna” ploča

1D model za beskonačnu ploču

Nakon **redukcije** dimenzije problema na 1D, za ploču tražimo

- **raspodjelu** temperature T duž **poprečnog presjeka** ploče, tj. za **prostornu** koordinatu x vrijedi $x \in [a, b]$, gdje je

- $[a, b]$ = “**radna**” debljina ploče.

Ovisno o **fazi** rješavanja problema, **debljina** može **varirati**:

- U **fazi 1** je $[a, b] = [a_1, a_2]$, ili $[a, b] = [0, a_2]$ (za simetrični problem).
- U **fazi 2** je $[a, b] = [b_1, b_2]$, ili $[a, b] = [0, b_2]$ (za simetrični problem).

Molim oprost za **oznake**!

Model — jednačba provođenja topline u 1D

Jednačba provođenja topline (JPT) u 1D ima oblik

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right),$$

uz oznake:

$x \in [a, b]$ — prostorna koordinata [m],

$t \geq 0$ — vrijeme [s],

$T = T(x, t)$ — temperatura [°C] ili [K].

Fizikalna svojstva materijala od kojeg je napravljen komad su:

ρ — gustoća [kg/m³],

c — specifična toplina [J/(kg K)],

λ — toplinska vodljivost [W/(m K)].

Početni i rubni uvjeti za JPT u 1D

Početni uvjet je, općenito,

$$T(x, 0) = T_0(x), \quad x \in [a, b],$$

s tim da je $T_0(x) = T_0 = \text{const}$ u našem problemu.

Rubni uvjeti u fazi 1 za nesimetrični problem su Dirichletovi:

$$T(a, t) = T_{n_a}(t), \quad T(b, t) = T_{n_b}(t), \quad t > 0.$$

Za simetrični problem, rubni uvjet u lijevom rubu je uvijek Neumannov (u obje faze):

$$\frac{\partial T}{\partial x}(a, t) = 0, \quad t > 0,$$

Rubni uvjeti za JPT u 1D

Rubni uvjeti u fazi 2 su Newtonov zakon hlađenja.

U lijevom rubu — za nesimetrični problem:

$$-\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\right)(a, t) = -\alpha_1(t) (T(a, t) - T_{x_a}(t)), \quad t > 0,$$

U desnom rubu — za oba problema:

$$\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\right)(b, t) = -\alpha_2(t) (T(b, t) - T_{x_b}(t)). \quad t > 0,$$

Napomena. U fazi 1, nakon produljenja, iz ovih jednadžbi računamo funkcije α_1 i α_2 , numeričkim deriviranjem.

Poznate funkcije

U ovom “matematičkom” modelu, smatramo da su poznate:

- sve tri funkcije svojstava materijala

$$\rho, c, \lambda$$

kao funkcije temperature T ,

- funkcija početne temperature T_0 na segmentu $[a, b]$,

- sve 4 funkcije (temperature) koje ulaze u rubne uvjete

$$T_{n_a}, T_{x_a}, T_{n_b}, T_{x_b},$$

kao funkcije vremena $t > 0$, ili barem za sva “potrebna” vremena $t \leq t_{\text{final}}$.

U simetričnom modelu trebamo samo dvije funkcije T_{n_b} i T_{x_b} na desnom rubu.

Konstantni koeficijenti — linearni problem

Ako su sve tri funkcije svojstava materijala

$$\rho, c, \lambda$$

konstantne funkcije — tj. brojevi (“koeficijenti” materijala),
onda **jednadžbu provođenja** (JPT) u 1D možemo napisati u
obliku

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda}{\rho c} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}.$$

Ovo je **linearna** jednadžba. **Koeficijent** u jednadžbi

$$D := \frac{\lambda}{\rho c}$$

je **konstanta** — katkad se zove konstanta **difuzije**.

Standardni oblik jednadžbi

Odgovarajućom supstitucijom — “skaliranjem” vremena i/ili prostora (na pr., $t \mapsto Dt$ ili $x \mapsto x/\sqrt{D}$),

• koeficijent D se može eliminirati.

Uz oznaku $T \mapsto u$, jednadžba dobiva poznati jednostavni oblik **linearne parabolike** jednadžbe

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}.$$

Analogno, opća **nelinearna** varijanta problema ima oblik

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + f(x).$$

Ovo je **nelinearna** jednadžba **difuzije**. Ako je $f(x) = 0$, onda dobivamo jednadžbu **provođenja topline**.

Paraboličke jednađbe u 1D

Linearni i nelinearni oblik jednađbe

U nastavku, radi **jednostavnosti**, gledamo samo sljedeća dva standardna oblika **paraboličkih** jednađbi u **1D**. Kasnije ćemo se vratiti na modelni problem **ploče**.

Linearni oblik paraboličke jednađbe:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}.$$

Nelinearni oblik paraboličke jednađbe:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + f(x).$$

Smatramo da je problem **zadan** za $x \in (a, b)$ i $t > 0$.

Napomena. U primjerima često uzimamo da je $f(x) = 0$.

Opći matematički oblik problema

Uz jednadžbu, zadani su još i **početni** uvjet

$$u(x, 0) = v(x), \quad x \in (a, b),$$

te **rubni** uvjeti na **lijevom** i **desnom** rubu intervala.

Opći **mješoviti** oblik rubnih uvjeta je

$$g_{1,a}(t) u(a, t) - g_{2,a}(t) \frac{\partial u}{\partial x}(a, t) = g_{0,a}(t), \quad t > 0,$$

$$g_{1,b}(t) u(b, t) - g_{2,b}(t) \frac{\partial u}{\partial x}(b, t) = g_{0,b}(t), \quad t > 0,$$

gdje su $g_{i,a}$, $g_{i,b}$ **zadane** funkcije, za $i = 0, 1, 2$.

Posebni rubni uvjeti

Sve **standardne** oblike **rubnih** uvjeta možemo dobiti odgovarajućim izborom funkcija $g_{i,\cdot}$ (oznaka $\cdot = a$ ili b).

● Dirichletov:

$$g_{1,\cdot}(t) = 1, \quad g_{2,\cdot}(t) = 0.$$

● Neumannov:

$$g_{1,\cdot}(t) = 0, \quad g_{2,\cdot}(t) = 1.$$

● Newtonov ili Robinov:

$$g_{1,\cdot}(t) = -\alpha(t), \quad g_{2,\cdot}(t) = \lambda(t), \quad g_{0,\cdot}(t) = -\alpha(t)u_{\text{ext}}(t),$$

s tim da $\lambda(t)$ računamo iz pripadne vrijednosti **rješenja** $u(\cdot, t)$ na rubu, tj. $\lambda(t) = \lambda(u(\cdot, t))$.

Princip rješavanja

Za **numeričko** rješavanje **domena** problema je skup

$$\{ (x, t) \mid x \in [a, b], t \geq 0 \}.$$

U toj domeni uvodimo **diskretiziranu mrežu**, preko “**pravokutne**” (kartezijske) diskretizacije po svakoj varijabli,

• diskretizacija u **vremenu** \times diskretizacija u **prostoru**.

Jednadžbu zatim diskretiziramo (u odgovarajućim točkama)

• na primjer, **prvo** u **vremenu**, a **onda** i u **prostoru**.

Na isti način diskretiziramo **početni** uvjet i **rubne** uvjete.

Za diskretizaciju koristimo **diskretne** aproksimacije

• (parcijalnih) **derivacija** — preko **konačnih razlika**, tj. **numeričko deriviranje** (slijedi u nastavku).

Princip rješavanja (nastavak)

Na kraju, numerički rješavamo tako dobiveni diskretizirani model. Princip:

- u vremenu — napredujemo, kao za inicijalni problem za ODJ,
- u prostoru — kao u rubnom problemu za ODJ.

Napomena. Obično se uzima da je

- početni uvjet T_0 zadan na zatvorenom intervalu $[a, b]$,
- a rubni uvjeti djeluju tek za $t > 0$,

što dozvoljava prekide rješenja u točkama $(a, 0)$ i $(b, 0)$.

Numeričko deriviranje

Numeričko deriviranje

U praksi, često derivacije funkcije **nisu dostupne**, već

- treba **aproksimirati** derivaciju diferencijabilne funkcije f na nekom skupu točaka, korištenjem **samo** vrijednosti funkcije f u zadanim točkama.

Ideja. Aproksimacija derivacije = derivacija aproksimacije.

Koristimo interpolacijski polinom. Uz pretpostavku da je f klase $C^{n+1}[a, b]$, funkciju f možemo napisati

$$f(x) = p_n(x) + e_n(x),$$

gdje je $p_n(x)$ **interpolacijski** polinom

$$p_n(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) \\ + \cdots + f[x_0, x_1, \dots, x_n](x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}),$$

Derivacija funkcije = derivacija interp. polinoma

a $e_n(x)$ greška interpolacijskog polinoma

$$e_n(x) = \frac{\omega(x)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi).$$

Deriviranjem p_n , a zatim uvrštavanjem $x = x_0$ dobivamo aproksimaciju za $f'(x_0)$

$$p'_n(x_0) = f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_2] (x_0 - x_1) \\ + \cdots + f[x_0, x_1, \dots, x_n] (x_0 - x_1) \cdots (x_0 - x_{n-1}),$$

Ako f ima još jednu neprekidnu derivaciju, tj. ako je f klase $C^{n+2}[a, b]$, onda je pogreška aproksimacije

$$e'_n(x_0) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x_0 - x_1) \cdots (x_0 - x_n).$$

Greška = derivacija greške interp. polinoma

Dakle, $p'_n(x_0)$ je **aproksimacija** derivacije funkcije f u točki x_0 i vrijedi

$$f'(x_0) = p'_n(x_0) + e'_n(x_0).$$

Ako označimo s

$$H = \max_k |x_0 - x_k|,$$

onda je, za $H \rightarrow 0$, greška $e'_n(x_0)$ **reda veličine**

$$e'_n(x_0) \leq O(H^n).$$

To nam pokazuje da aproksimacijska formula za derivaciju može biti **proizvoljno visokog reda n** , ali takve formule s velikim n imaju **ograničenu praktičnu vrijednost**.

Numeričko deriviranje — linearni polinom

Pokažimo kako se ta formula ponaša za **niske** n .

$n = 1$.

Aproksimacija derivacije je

$$p'_1(x_0) = f[x_0, x_1] = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} = \frac{f_1 - f_0}{h},$$

pri čemu smo napravili **grešku**

$$e'_1(x_0) = \frac{f^{(2)}(\xi)}{2!} (x_0 - x_1) = -\frac{f^{(2)}(\xi)}{2} h,$$

uz pretpostavku da je $f \in C^3[x_0, x_1]$. Greška je **reda veličine** $O(h)$ za $h \rightarrow 0$.

Numeričko deriviranje — simetrična razlika

$n = 2$.

Za $n = 2$, točke x_1, x_2 možemo uzeti na više raznih načina.

1. Simetričan izbor točaka

Izaberemo x_1 i x_2 simetrično oko x_0

$$x_1 = x_0 + h, \quad x_2 = x_0 - h.$$

Sugestivnija oznaka je

$$x_{-1} := x_2,$$

jer se točke pišu u prirodnom redosljedu: x_{-1}, x_0, x_1 . U tom slučaju je

$$p'_2(x_0) = f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_{-1}] (x_0 - x_1).$$

Numeričko deriviranje — simetrična razlika

Izračunajmo potrebne **podijeljene** razlike.

t_k	$f[t_k]$	$f[t_k, t_{k+1}]$	$f[t_k, t_{k+1}, t_{k+2}]$
x_{-1}	f_{-1}	$\frac{f_0 - f_{-1}}{h}$	
x_0	f_0	$\frac{f_1 - f_0}{h}$	$\frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{2h^2}$
x_1	f_1		

Uvrštavanjem dobivamo

$$p_2'(x_0) = \frac{f_1 - f_0}{h} - h \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{2h^2} = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h}.$$

Numeričko deriviranje — simetrična razlika

Prethodnu formulu zovemo **simetrična (centralna) razlika**, jer su točke x_1 i x_{-1} **simetrične** obzirom na x_0 .

Takva aproksimacija derivacije ima **bolju ocjenu** greške nego obične podijeljene razlike, tj. vrijedi

$$e'_2(x_0) = \frac{f^{(3)}(\xi)}{6} (x_0 - x_1)(x_0 - x_{-1}) = -h^2 \frac{f^{(3)}(\xi)}{6}.$$

2. Slučaj x_1 i x_2 s iste strane x_0

Rasporedimo, na primjer, x_1 i x_2 desno od x_0 ,

$$x_1 = x_0 + h, \quad x_2 = x_0 + 2h.$$

Numeričko deriviranje — drugi izbor točaka

Iako su i u ovom slučaju točke ekvidistantne, deriviramo u najljevijoj, a ne u srednjoj točki.

Pripadna tablica podijeljenih razlika je

t_k	$f[t_k]$	$f[t_k, t_{k+1}]$	$f[t_k, t_{k+1}, t_{k+2}]$
x_0	f_0	$\frac{f_1 - f_0}{h}$	
x_1	f_1		$\frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{2h^2}$
x_2	f_2	$\frac{f_2 - f_1}{h}$	

Numeričko deriviranje — drugi izbor točaka

Konačno, aproksimacija derivacije u x_0 je

$$\begin{aligned} p_2'(x_0) &= f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_2] (x_0 - x_1) \\ &= \frac{f_1 - f_0}{h} - h \frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{2h^2} \\ &= \frac{-f_2 + 4f_1 - 3f_0}{2h}, \end{aligned}$$

dok je greška jednaka

$$e_2'(x_0) = \frac{f^{(3)}(\xi)}{6} (x_0 - x_1)(x_0 - x_2) = h^2 \frac{f^{(3)}(\xi)}{3},$$

tj. greška je istog reda veličine $O(h^2)$, međutim konstanta je **dvostruko** veća nego u prethodnom (simetričnom) slučaju.

Numeričko deriviranje — zaključci

Formula za derivaciju

- postaje sve **točnija** što su **bliže** točke iz kojih se derivacija aproksimira, tj. što je h manji.

To vrijedi samo **teoretski**.

U praksi, mnogi podaci su mjereni, pa nose neku **pogrešku**, u najmanju ruku zbog grešaka **zaokruživanja**.

Osnovu numeričkog deriviranja čine **podijeljene razlike**,

- ako su točke **bliske**, dolazi do **kraćenja**. Do kraćenja **mora** doći, zbog neprekidnosti funkcije f .

Problem je to **izrazitiji**, što su točke bliže, tj. što je h manji.

Dakle, imamo dva **oprečna** zahtjeva na veličinu h . Manji h daje bolju **ocjenu greške**, ali veću **grešku zaokruživanja**.

Numeričko deriviranje — ilustracija problema

Ilustrirajmo to analizom simetrične razlike,

$$f'(x_0) = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} + e'_2(x_0), \quad e'_2(x_0) = -h^2 \frac{f^{(3)}(\xi)}{6}.$$

Pretpostavimo da smo, umjesto vrijednosti f_{-1} i f_1 , uzeli malo perturbirane vrijednosti

$$\hat{f}_1 = f_1 + \varepsilon_1, \quad \hat{f}_{-1} = f_{-1} + \varepsilon_{-1}, \quad |\varepsilon_1|, |\varepsilon_{-1}| \leq \varepsilon.$$

Ako odatle izrazimo f_1 i f_{-1} i uvrstimo ih u formulu za derivaciju, dobivamo

$$f'(x_0) = \frac{\hat{f}_1 - \hat{f}_{-1}}{2h} - \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_{-1}}{2h} + e'_2(x_0).$$

Koliko malen smije biti h ?

Prvi član s desne strane je ono što smo mi **zaista** izračunali kao aproksimaciju derivacije, a ostalo je **greška**.

Zbog **jednostavnosti** analize pretpostavimo da je

- h prikaziv u računalu,
- greška pri računanju **kvocijenta** u podijeljenoj razlici zanemariva.

U tom je slučaju napravljena **ukupna greška**

$$err_2 = f'(x_0) - \frac{\hat{f}_1 - \hat{f}_{-1}}{2h} = -\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_{-1}}{2h} + e'_2(x_0).$$

Ogradimo err_2 po **apsolutnoj** vrijednosti. Greška u prvom članu je **najveća** ako su ε_1 i ε_{-1} **suprotnih** predznaka, maksimalne apsolutne vrijednosti ε .

Koliko malen smije biti h ?

Za drugi član koristimo ocjenu za $e'_2(x_0)$, pa zajedno dobivamo

$$|err_2| \leq \frac{\varepsilon}{h} + \frac{M_3}{6}h^2, \quad M_3 = \max_{x \in [x_{-1}, x_1]} |f^{(3)}(x)|.$$

Lako se vidi da je ocjena na desnoj strani najbolja moguća, tj. da se može dostići. Označimo tu ocjenu s $e(h)$

$$e(h) := \frac{\varepsilon}{h} + \frac{M_3}{6}h^2.$$

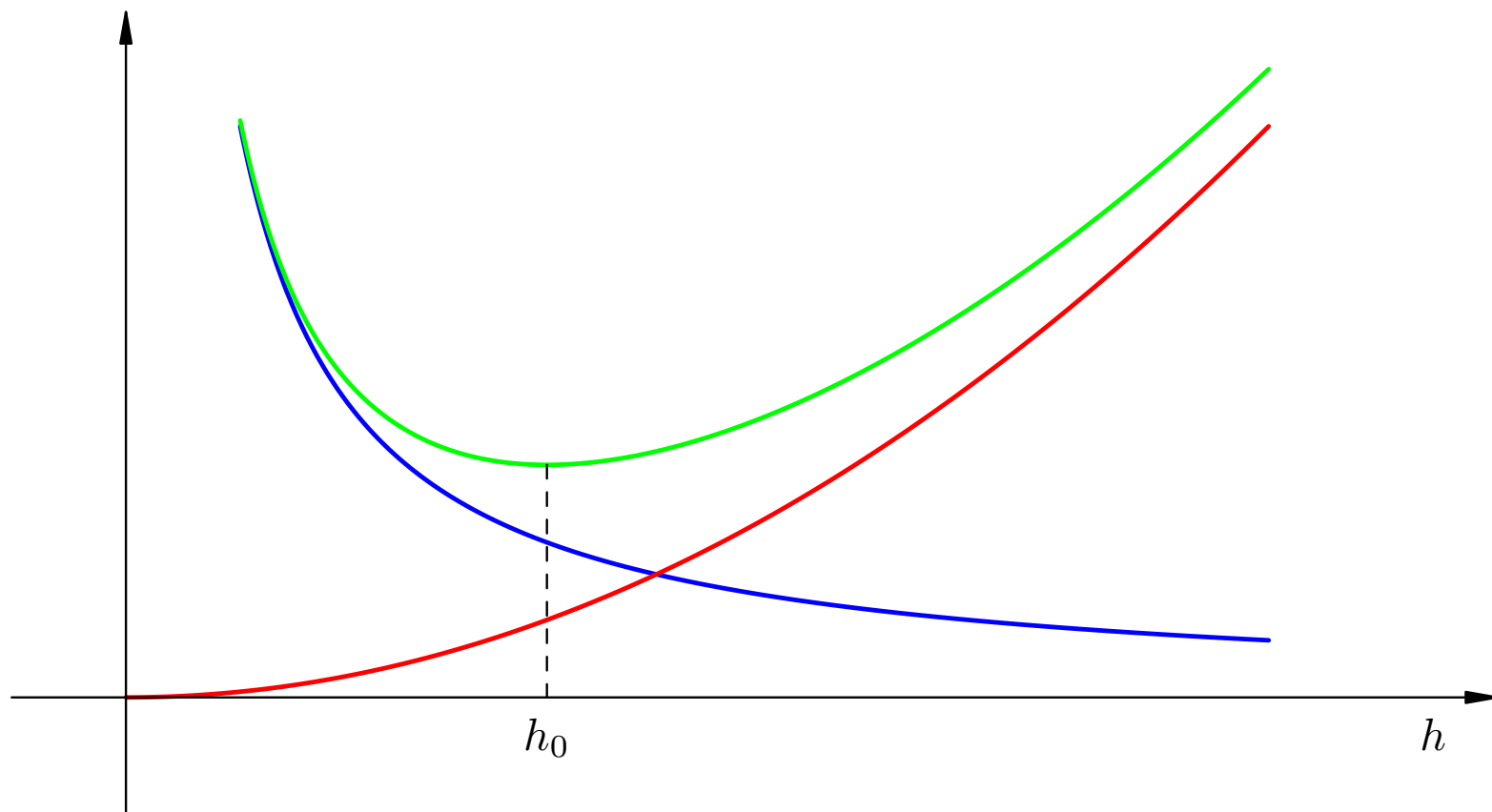
Ponašanje ove ocjene i njezina dva člana u ovisnosti od h možemo prikazati sljedećim grafom.

Koliko malen smije biti h ?

Legenda:

- plava boja — prvi član ε/h oblika hiperbole, koji dolazi od greške u podacima,
- crvena boja — drugi član oblika parabole, koji predstavlja maksimalnu grešku odbacivanja kod aproksimacije derivacije podijeljenom razlikom,
- zelena boja — označava zbroj grešaka $e(h)$.

Optimalni h_0



Optimalni h_0

Odmah vidimo da $e(h)$ ima **minimum** po h . Taj minimum se lako računa, jer iz

$$e'(h) = -\frac{\varepsilon}{h^2} + \frac{M_3}{3}h = 0$$

izlazi da se lokalni, a onda (zbog $e''(h) > 0$ za $h > 0$) i **globalni** minimum postiže za

$$h_0 = \left(\frac{3\varepsilon}{M_3} \right)^{1/3}.$$

Najmanja vrijednost funkcije je

$$e(h_0) = \frac{3}{2} \left(\frac{M_3}{3} \right)^{1/3} \varepsilon^{2/3}.$$

Ukupna greška koju ne očekujemo

To pokazuje da je čak i u **najboljem** slučaju,

- kad je **ukupna greška** najmanja, ona je **reda veličine** $O(\varepsilon^{2/3})$, a **ne** $O(\varepsilon)$, kao što bismo željeli.

To predstavlja **značajni gubitak točnosti**.

Posebno, **daljnje** smanjivanje koraka h samo **povećava** grešku!

Isti problem se javlja, i to u još **ozbiljnijem** obliku, u formulama **višeg** reda za aproksimaciju derivacija.

Metoda konačnih diferencija za prostorne varijable

Aproksimacije konačnim razlikama

Za funkciju $u(x)$ koristimo aproksimacije prostornih derivacija

$\frac{\partial u}{\partial x}$ i $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ i to

• podijeljenim razlikama **unaprijed**:

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

• podijeljenim razlikama **unazad**:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u(x) - u(x-h)}{h},$$

• **simetričnim** razlikama:

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

Lokalne greške diskretizacije

Korištenjem Taylorovog razvoja, za prethodne tri formule imamo sljedeće tri **lokalne greške diskretizacije**

- za podijeljene razlike **unaprijed**:

$$\delta(x) = -\frac{1}{2}h \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\xi), \quad \xi \in \langle x, x+h \rangle,$$

- za podijeljene razlike **unazad**:

$$\delta(x) = +\frac{1}{2}h \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\xi), \quad \xi \in \langle x-h, x \rangle,$$

- za **simetrične** razlike:

$$\delta(x) = -\frac{1}{6}h^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(\xi), \quad \xi \in \langle x-h, x+h \rangle.$$

Aproksimacija druge derivacije

Za drugu derivaciju, imamo sljedeću aproksimaciju **simetričnim razlikama**:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x) \approx \frac{2u(x - h_1)}{h_1(h_1 + h_2)} - \frac{2u(x)}{h_1 h_2} + \frac{2u(x + h_2)}{(h_1 + h_2)h_2}.$$

Razvojem u Taylorov red oko x dobivamo lokalnu grešku diskretizacije

$$\delta(x) = \frac{h_2 - h_1}{3} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x) - \frac{1}{12} \frac{h_1^3 + h_2^3}{h_1 + h_2} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\xi), \quad \xi \in \langle x - h_1, x + h_2 \rangle.$$

Ako je h_1 bitno različit od h_2 , imamo $\delta(x) = O(h)$,
 $h = \max\{h_1, h_2\}$, a ako je $h_1 = h_2 = h$, imamo $\delta(x) = O(h^2)$.

Derivacije u jednažbi difuzije

Ako uzmemo diferencijalnu jednažbu

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D(x) \frac{\partial}{\partial x} u \right)$$

onda dobivamo sljedeću aproksimaciju

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x) \frac{\partial}{\partial x} u \right) &\approx \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x) (u(x+h) - u(x)) \right) \\ &\approx \frac{1}{h^2} \left(D(x) (u(x+h) - u(x)) - D(x-h) (u(x) - u(x-h)) \right) \\ &\approx \frac{1}{h^2} \left(D(x) u(x+h) - (D(x) + D(x-h)) u(x) \right. \\ &\quad \left. + D(x-h) u(x-h) \right). \end{aligned}$$

Točnije derivacije u jednažbi difuzije

Korištenjem simetrične razlike dobivamo bolju aproksimaciju. Nadalje, možemo primijetiti da je **simetrična razlika** aritmetička sredina podijeljenih razlika **unaprijed** i **unazad**

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} \left(D(x) \frac{\partial}{\partial x} u \right) &\approx \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial x} \left(D \left(x + \frac{h}{2} \right) (u(x+h) - u(x)) \right) \\ &\approx \frac{1}{h^2} \left[D \left(x + \frac{h}{2} \right) (u(x+h) - u(x)) \right. \\ &\quad \left. - D \left(x - \frac{h}{2} \right) (u(x) - u(x-h)) \right] \\ &\approx \frac{1}{h^2} \left[D \left(x + \frac{h}{2} \right) u(x+h) - \left(D \left(x + \frac{h}{2} \right) + D \left(x - \frac{h}{2} \right) \right) u(x) \right. \\ &\quad \left. + D \left(x - \frac{h}{2} \right) u(x-h) \right].\end{aligned}$$