

ARTUR KROWIAK*

LOKALNA APROKSYMACJA POCHODNYCH Z UŻYCIEM
NIEREGULARNIE ROZMIESZCZONYCH WĘZŁÓWLOCAL APPROXIMATION OF DERIVATIVES USING
SCATTERED NODES

Streszczenie

W artykule przedstawiono sposób aproksymacji pochodnych funkcji, której wartości są zadane lub poszukiwane w nieregularnie rozmieszczonych węzłach. Sposób ten wykorzystuje technikę kwadratur różniczkowych, gdzie jako funkcje próbne przyjęto radialne funkcje bazowe. Na tej podstawie dla wyselekcjonowanych węzłów tworzących gwiazdę różnicową wyznacza się odpowiednie wagi. W artykule przeprowadzono testy numeryczne ilustrujące dokładność omawianej metody w zależności od liczby węzłów gwiazdy, współczynnika kształtu funkcji radialnych, a także stopnia nieregularności siatki. We wspomnianych testach zwrócono również uwagę na uwarunkowanie układów równań pojawiających się w sformułowaniu metody.

Słowa kluczowe: aproksymacja pochodnych, metody bezsiatkowe, kwadratury różniczkowe

Abstract

The paper presents the method for approximation of derivatives, when the function is given or searched at scattered nodes. The method uses the differential quadrature technique, where radial basis functions are assumed as the trial functions. In this manner appropriate weights for selected difference stars are determined. On the base of numerical tests the dependence of the accuracy on the number of star nodes, shape parameter in the radial function and the degree of irregularity of the node distribution is shown. In these tests the attention is also focused on the conditioning of equation sets that arise from the formulation of the method.

Keywords: derivative approximation, meshless methods, differential quadrature

* Dr inż. Artur Krowiak, Instytut Informatyki Stosowanej, Wydział Mechaniczny, Politechnika Krakowska.

1. Wstęp

Problematyka przybliżania pochodnych funkcji zadanej w formie numerycznej ma zastosowanie w wielu dziedzinach nauki, m.in. w mechanice doświadczalnej. Zagadnienie to odgrywa kluczową rolę również w metodach przybliżonego rozwiązywania równań różniczkowych. Zastąpienie operatorów różniczkowych odpowiednimi wyrażeniami skończonymi (wzorami różnicowymi) przybliżającymi pochodne w określonych punktach redukuje równania różniczkowe do układów równań algebraicznych. Powszechnie znane są sposoby aproksymacji pochodnych funkcji w przypadku jednorodnego rozmieszczenia punktów węzłowych. Na takim sposobie dyskretyzacji opiera się klasyczne sformułowanie metody różnic skończonych, stosowanej często do rozwiązywania równań różniczkowych. Zdarza się jednak, że obszar rozwiązania równania różniczkowego nie ma regularnego kształtu i stosowanie regularnie rozmieszczonych węzłów jest kłopotliwe. Również w przypadku wyznaczania pochodnych z góry zadanej funkcji, np. otrzymanej na drodze odpowiednich pomiarów, może okazać się, że rozkład punktów węzłowych nie ma regularnego charakteru i klasyczne operatory różnicowe nie będą miały zastosowania. W takich przypadkach do rozwiązania wspomnianych problemów używa się metod bezsiatkowych [1, 2], których cechą charakterystyczną jest fakt, że opierają się na dowolnie rozmieszczonych węzłach, pomiędzy którymi nie ma żadnych zależności geometrycznych, jak to ma miejsce we wspomnianej metodzie różnic skończonych czy metodzie elementów skończonych.

W artykule [3] przedstawiono sposób wyznaczania wag dla globalnych wzorów różnicowych opartych na nieregularnie rozmieszczonych węzłach. Podejście to wykorzystuje technikę używaną w metodzie kwadratur różniczkowych [4], gdzie zamiast typowej bazy wielomianowej wprowadzono radialne funkcje bazowe. Stwierdzono bowiem, że funkcje te są szczególnie użyteczne w zagadnieniach aproksymacji z użyciem dowolnie rozmieszczonych węzłów [5]. Podejście globalne, które sprawdza się w konwencjonalnej metodzie kwadratur różniczkowych i daje bardzo dokładne wyniki już dla kilkunastu punktów węzłowych, w przypadku podejścia bezsiatkowego, wykorzystującego funkcje radialne, nie jest tak skuteczne. Układy równań, z których wyznacza się współczynniki wagowe, charakteryzują się w tym przypadku sporymi rozmiarami, a przede wszystkim złym uwarunkowaniem, utrudniającym proces rozwiązania. W związku z tym w niniejszym artykule przedstawiono koncepcję podejścia lokalnego, wykorzystującego do aproksymacji pochodnej tylko najbliższe punkty z otoczenia punktu centralnego (węzeł, w którym wyznacza się pochodną). Przeprowadzono testy numeryczne pokazujące wpływ liczby tych punktów na dokładność rozwiązania oraz uwarunkowanie zagadnienia. Ponadto za pracą [6] przyjęto kryterium nieregularności siatki i zbadano wpływ teje nieregularności na jakość wyników.

2. Lokalna aproksymacja pochodnych

Do przybliżania pochodnych w danym punkcie posłużono się, tak jak w [3], ważoną sumą wartości funkcji w węzłach obszaru. W tym przypadku zamiast wszystkich węzłów wzięto pod uwagę tylko określoną liczbę n węzłów leżących najbliżej węzła centralnego. Odpowiednie wyrażenie przybliżające pochodną funkcji $f(\mathbf{x}_j)$, zadanej w N węzłach $\mathbf{x}_j = (x_1^j, \dots, x_D^j)$, gdzie D oznacza wymiar zagadnienia, przyjmie zatem postać:

$$f^{(r)}(\mathbf{x}_i) = \sum_{k=1}^n c_k^{(r)}(\mathbf{x}_i) f(\mathbf{x}_k) = \sum_{k=1}^n c_{ik}^{(r)} f_k, \quad i = 1, \dots, N \quad (1)$$

We wzorze (1) $c_{ik}^{(r)}$ są poszukiwanymi współczynnikami wagowymi dla pochodnej r -tego rzędu w i -tym punkcie.

Aby wyznaczyć te współczynniki, funkcję $f(\mathbf{x})$ przybliżymy lokalnie kombinacją liniową radialnych funkcji bazowych $\varphi_j(\mathbf{x})$ z użyciem n wyselekcjonowanych węzłów. Odpowiednia formuła interpolacyjna przyjmie postać:

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^n a_j \varphi_j(\mathbf{x}) \quad (2)$$

Spośród wielu typów funkcji radialnych [7] w pracy wykorzystano funkcje multi-kwadratowe wyróżniające się szybkim tempem zbieżności [5]:

$$\varphi_j(\mathbf{x}) = \sqrt{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j)^2 + C^2}, \quad (3)$$

gdzie:

C – współczynnik kształtu dobierany przez użytkownika.

Wprowadzając zależność (2) do (1) oraz dokonując zmiany kolejności sumowania po prawej stronie równania, otrzymamy następujący związek:

$$\sum_{j=1}^n a_j \varphi_j^{(r)}(\mathbf{x}_i) = \sum_{j=1}^n a_j \sum_{k=1}^n c_{ik}^{(r)} \varphi_j(\mathbf{x}_k), \quad i = 1, \dots, N \quad (4)$$

Porównując wartości stojące przy odpowiednich współczynnikach a_j , otrzymamy:

$$\varphi^{(r)}(\mathbf{x}_i) = \sum_{k=1}^n c_{ik}^{(r)} \varphi_j(\mathbf{x}_k), \quad j = 1, \dots, n, \quad i = 1, \dots, N \quad (5)$$

Zależność (5) przedstawia liniowy układ n równań zawierający n niewiadomych współczynników wagowych, aproksymujących pochodną w i -tym węźle. Układ ten można przedstawić w zwartej formie stosując zapis macierzowy

$$\Phi_i \mathbf{c}_i = \varphi_i^{(r)}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (6)$$

gdzie:

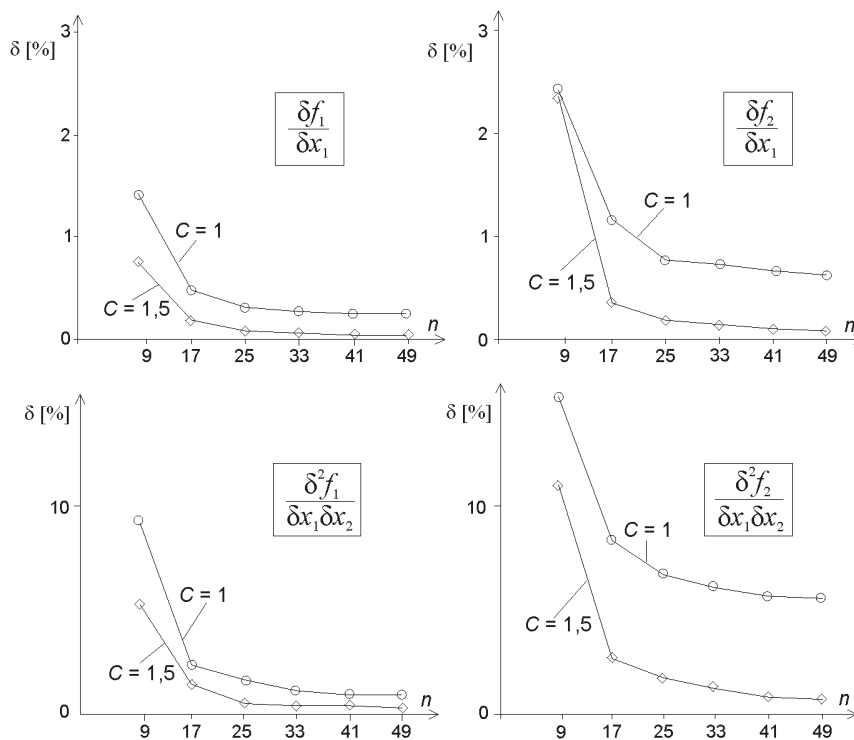
$$\Phi_i = \begin{bmatrix} \varphi_1(\mathbf{x}_1) & \cdots & \varphi_1(\mathbf{x}_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_n(\mathbf{x}_1) & \cdots & \varphi_n(\mathbf{x}_n) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{c}_i = \begin{bmatrix} c_{i1}^{(r)} \\ \vdots \\ c_{in}^{(r)} \end{bmatrix}, \quad \varphi_i^{(r)} = \begin{bmatrix} \varphi_1^{(r)}(\mathbf{x}_1) \\ \vdots \\ \varphi_n^{(r)}(\mathbf{x}_1) \end{bmatrix}$$

Dla współczynników kształtu C różnych od zera macierze Φ_i są nieosobliwe, co gwarantuje jednoznaczność otrzymanego rozwiązania. Różne wartości tego współczynnika wpływają na wskaźnik uwarunkowania układu równań (6) oraz na dokładność rozwiązania. Powiększając wartość C , poprawiamy dokładność wyników, pogarszając jednak

uwarunkowanie układu równań. Dobór optymalnych wartości tego współczynnika odbywa się zwykle na podstawie eksperymentów numerycznych. Nie przedstawiono bowiem do tej pory uniwersalnego sposobu doboru tegoż współczynnika. W niniejszym artykule, przy doborze wartości C kierowano się pracami [2, 3, 7]. Na dokładność i wskaźnik uwarunkowania ma również wpływ liczba węzłów n użyta do aproksymacji pochodnej we wzorze (1), a także sposób ich rozmieszczenia.

3. Testy numeryczne

Ocena dokładności aproksymacji pochodnej i wskaźnika uwarunkowania układu równań (6) w zależności od liczby punktów n może pomóc w odpowiednim doborze tej liczby pod kątem efektywności obliczeń. Biorąc pod uwagę brak teoretycznych prac pozwalających oszacować te zależności, w artykule przeprowadzono testy numeryczne



Rys. 1. Błąd aproksymacji pochodnej
Fig. 1. Error of derivative approximation

dla przykładowo przyjętych funkcji: $f_1 = \sin(x_1)\cos(x_2)$, $f_2 = \exp(-x_1^2 - x_2^2)$, których wartości wyznaczone w losowo wygenerowanych węzłach z przedziału $x_1, x_2 \in [0,3]$. Na rysunkach 1 i 2 przedstawiono zależność zmodyfikowanego względnego błędu procentowego:

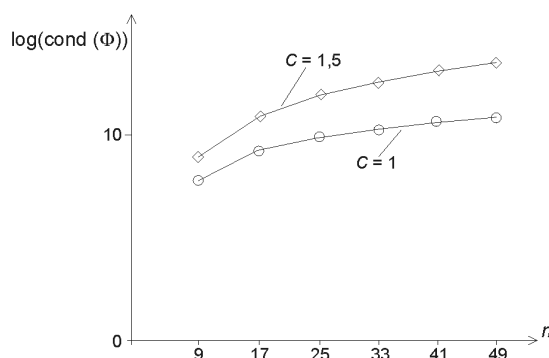
$$\delta = \sqrt{\sum_{i=1}^N (f_i^{(r)} - \bar{f}_i^{(r)})^2} / \sqrt{\sum_{i=1}^N (\bar{f}_i^{(r)})^2} \cdot 100\% \quad (7)$$

i maksymalnej wartości wskaźnika uwarunkowania:

$$\text{cond}(\Phi) = \max_i \left(\|\Phi_i\|_{\infty} \cdot \|\Phi_i^{-1}\|_{\infty} \right) \quad (8)$$

w zależności od przyjętej liczby punktów $n = 9, 17, 25, 33, 41, 49$ w wyrażeniu (1). Liczba wszystkich węzłów była ustalona i wynosiła $N = 225$. We wzorze (7) przez $f_i^{(r)}$ oznaczono przybliżoną wartość pochodnej r -tego rzędu po odpowiednich zmiennych w i -tym węźle, a przez $\bar{f}_i^{(r)}$ dokładną wartość tej pochodnej.

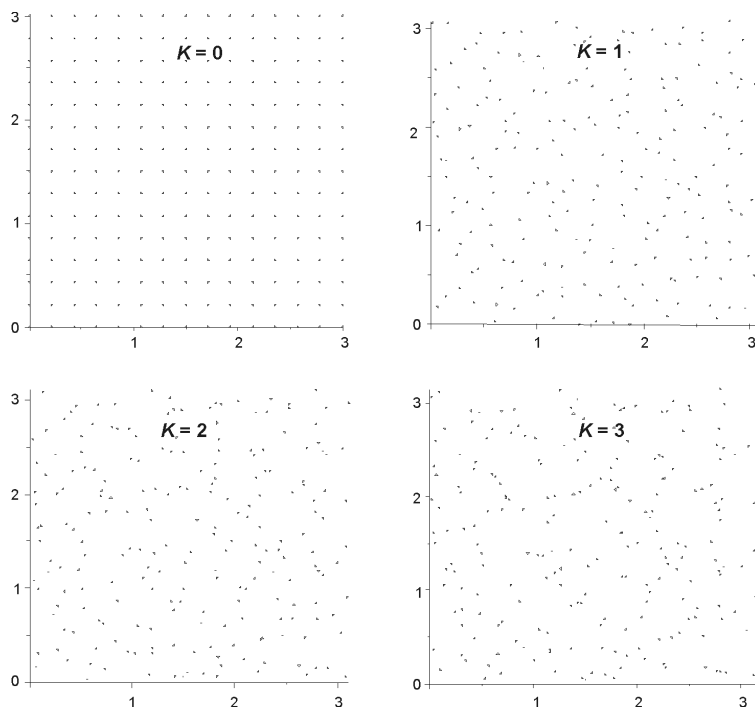
Wykresy z rys. 1 wskazują, że jest pewna liczba punktów n (w tym przypadku 25), po przejściu której znacznie spada tempo zbieżności. Biorąc pod uwagę względy efektywności obliczeń oraz problem uwarunkowania układu równań (rys. 2), można określić ją mianem optymalnej. Liczba ta zależy od wielkości obszaru, całkowitej liczby węzłów, a wpływ na nią może mieć również sposób ich rozmieszczenia. To ostatnie zagadnienie analizowano w dalszej części artykułu.



Rys. 2. Maksymalna wartość wskaźnika uwarunkowania macierzy Φ_i
Fig. 2. Maximal value of condition number for Φ_i matrices

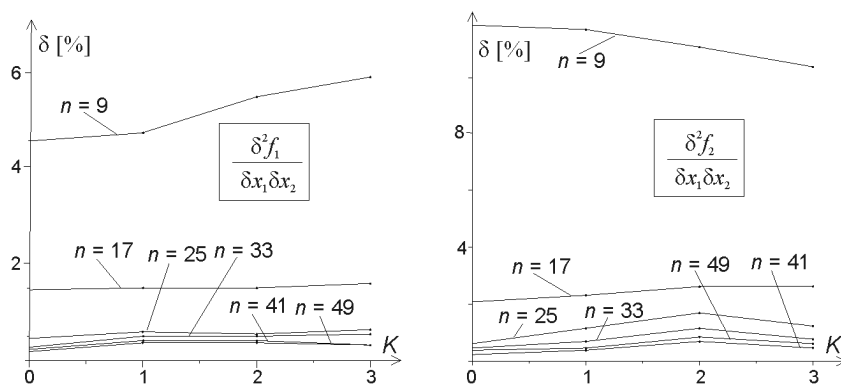
3.1. Wpływ nieregularności rozmieszczenia węzłów

W celu sprawdzenia zależności wyników od stopnia nieregularności rozmieszczenia węzłów przyjęto za pracę [6] kryterium nieregularności siatki. Wychodząc od siatki jednorodnej, każdy węzeł przemieszczany był w danym kierunku o losowo wybraną wartość podzieloną przez współczynnik skalujący dla tego kierunku $\alpha_x = k \cdot N_x$, $\alpha_y = k \cdot N_y$, gdzie N_x i N_y oznaczają liczby punktów względem odpowiednich osi układu współrzędnych. O stopniu nieregularności siatki K decydowała wartość parametru k . Stopień zerowy $K = 0$ odpowiadał wartości parametru $k = \infty$ i oznaczał jednorodny rozkład węzłów. Najwyższy, przyjęty w artykule, stopień nieregularności rozmieszczenia węzłów $K = 3$ odpowiadał parametrowi $k = 1$. Na rysunku 3 przedstawiono siatki węzłów, dla których przeprowadzono obliczenia.

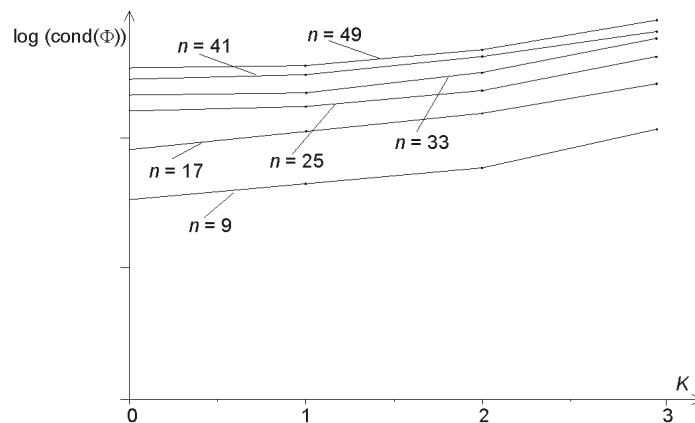


Rys. 3. Siatki używane do testów obliczeniowych
Fig. 3. Meshes used for numerical tests

Dla każdego przypadku rozmieszczenia węzłów przedstawionego na rysunku 3 dokonano aproksymacji pochodnych funkcji f_1 i f_2 . Uzyskane wyniki przedstawiono na rysunkach 4 i 5. Pierwszy z nich ilustruje zależność błędów (7) od stopnia nieregularności siatki, przy różnych wartościach n (liczba węzłów lokalnie aproksymujących pochodną). Drugi rysunek przedstawia zależność maksymalnego wskaźnika uwarunkowania od tych parametrów.



Rys. 4. Zależność błędów aproksymacji pochodnej od stopnia nieregularności siatki
Fig. 4. Error of approximation of derivative vs. degree of mesh irregularity



Rys. 5. Zależność maksymalnego wskaźnika uwarunkowania macierzy Φ_i od stopnia nieregularności siatki

Fig. 5. Maximal condition number for matrices Φ_i vs. degree of mesh irregularity

Rysunki 4 i 5 wskazują, że w przyjętym sformułowaniu stopień nieregularności siatki nie wpływa znacząco na wyniki obliczeń. Błąd aproksymacji pochodnej, jak i wskaźnik uwarunkowania, zależą głównie od liczby punktów przyjętych do lokalnej aproksymacji pochodnej.

4. Wnioski

W artykule pokazano sposób wyznaczania współczynników wagowych, używanych do lokalnej aproksymacji pochodnych. Sposób ten wykorzystuje technikę znaną z metody kwadratur różniczkowych, gdzie jako funkcje testowe przyjęto radialne funkcje bazowe. Użycie do aproksymacji pochodnych tylko lokalnego sąsiedztwa rozważanego punktu, inaczej niż to ma miejsce w klasycznej metodzie kwadratur różniczkowych, pozwala na efektywne analizowanie zadań dużej skali. Wykorzystanie multikwadratowych funkcji radialnych, szczególnie skutecznych w przypadku nieregularnie rozmieszczonych węzłów, minimalizuje wpływ sposobu ich rozmieszczenia na otrzymane wyniki. Na podstawie przeprowadzonych testów numerycznych stwierdzono, że dokładność aproksymacji pochodnych zależy przede wszystkim od liczby węzłów przyjętych do lokalnej jej aproksymacji i współczynnika kształtu funkcji radialnych. Z punktu widzenia ekonomii obliczeń liczba tych węzłów powinna być jak najmniejsza. Z drugiej jednak strony większa liczba węzłów daje dokładniejsze wyniki. Dla ustalonej liczby wszystkich węzłów w rozpatrywanym obszarze można znaleźć optymalną liczbę węzłów lokalnie przybliżających pochodną. Liczbę tę rozumie się jako wartość, powyżej której znacznie spada tempo zbieżności metody. Pomaga to w efektywnym rozwiązywaniu zagadnień, w których aproksymacja pochodnych odgrywa istotną rolę.

Literatura

- [1] Batytsko T., Krongauz Y., Organ D., Flrming M., Krysl P., *Meshless methods: an overview and recent developments*, Comp. Meth. Appl. Mech., 139, 1996, 3-47.
- [2] Liu G.R., *Mesh-free methods, moving beyond the finite element method*, CRC Press 2000.
- [3] Krowiak A., *Generation of the difference formulas for scattered nodes using radial basis functions*, Technical Transactions, 2-M/2012, 2010, 151-156.
- [4] Shu C., *Differential quadrature and its application in engineering*. Springer-Verlag, London 2000.
- [5] Hardy R.L., *Multiquadric equations of topography and other irregular surfaces*, J. Geophysics Res. 176, 1971, 1905-1915.
- [6] Leitao V.M.A., *An RBF-based Hermite Collocation Method for Kirchhoff Plates*, Electronic Journal of Boundary Elements, 1, 2002, 115-127.
- [7] Zhang X., Song K.Z., Lu M.W., Liu X., *Meshless methods based on collocation with radial basis functions*, Computational Mechanics, 26, 2000, 333-343.