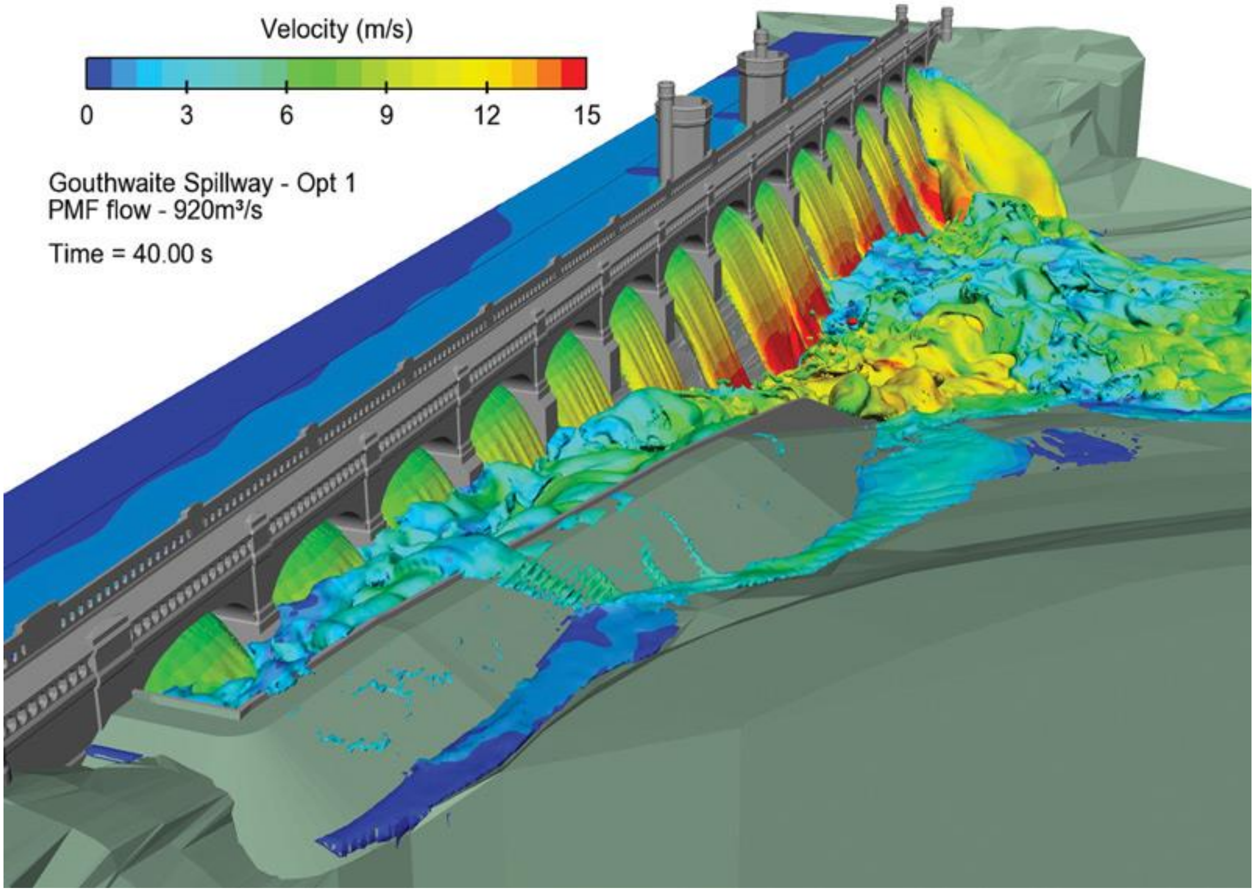
Εισαγωγικά στοιχεία υπολογιστικής ρευστομηχανικής



Ευάγγελος Π. Φινδανής
Τοπογράφος Μηχανικός MSc
www.vfindanis.com

Θεσσαλονίκη 2019

1. Διάκριση και συμπεριφορά των μερικών διαφορικών εξισώσεων

Η ροή των ρευστών διέπεται από διαφορικές εξισώσεις οι οποίες δεν έχουν γενική λύση για όλες τις πιθανές οριακές και αρχικές συνθήκες. Έτσι αναγκαζόμαστε να καταφύγουμε σε επιλύσεις αυτών των διαφορικών εξισώσεων κάνοντας χρήση αριθμητικών αλγορίθμων. Η αύξηση της υπολογιστικής ισχύος των υπολογιστών συνέβαλλε στην βελτίωση των αλγορίθμων αυτών, στην αύξηση της ακρίβειας τους και επομένως στην ευρύτερη χρήση τους. Στο παρόν άρθρο δίνονται ορισμένα θεωρητικά στοιχεία των μερικών διαφορικών εξισώσεων, παρουσιάζεται η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών η οποία είναι η απλούστερη μέθοδος επίλυσης διαφορικών εξισώσεων αλλά και η μέθοδος των χαρακτηριστικών.

Διάκριση των διαφορικών εξισώσεων

Αρχικά, οι διαφορικές εξισώσεις διακρίνονται σε συνήθεις και μερικές. Στις συνήθεις όλες οι παράγωγοι (ρυθμοί μεταβολής) που εμφανίζονται στην διαφορική εξίσωση είναι ως προς την ίδια ανεξάρτητη μεταβλητή ενώ στις μερικές διαφορικές εξισώσεις οι παράγωγοι είναι ως προς διαφορετικές ανεξάρτητες μεταβλητές. Παραδείγματος χάριν, η διαφορική εξίσωση

$$\frac{d^2f}{dx^2} + c_1\frac{df}{dx} + c_2 = 0 \tag{1.1}$$

είναι συνήθης με ανεξάρτητη μεταβλητή το x. Αντίθετα η διαφορική εξίσωση

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \tag{1.2}$$

είναι μερική με ανεξάρτητες μεταβλητές τα x και y.

Έπειτα, οι διαφορικές εξισώσεις μπορούν να διακριθούν σε γραμμικές ή μη γραμμικές. Στις γραμμικές εξισώσεις οι εξαρτημένες μεταβλητές και οι παράγωγοι τους δεν είναι υψωμένες σε κάποια δύναμη ή δεν πολλαπλασιάζονται μεταξύ τους. Έτσι η εξίσωση (1.2) είναι γραμμική ενώ η εξίσωση

$$\frac{\partial f}{\partial t} + f\,\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 0 \tag{1.3}$$

είναι μη γραμμική διότι η εξαρτημένη μεταβλητή f πολλαπλασιάζεται με την δεύτερη παράγωγο της ως προς x.

Σημειώνεται ότι η τάξη μίας διαφορικής εξίσωσης είναι η μεγαλύτερη τάξη των παραγώγων που εμφανίζονται στην εξίσωση. Οι εξισώσεις (1.1), (1.2) και (1.3) είναι 2ης τάξης λόγω των δεύτερων παραγώγων που εμφανίζονται σε αυτές. Αντίθετα, η εξίσωση

$$\frac{\partial f}{\partial t} + f = 0 \tag{1.4}$$

είναι πρώτης τάξης επειδή η μόνη παράγωγος που εμφανίζεται σε αυτήν είναι πρώτης τάξης.

Ελλειπτικές, Παραβολικές και Υπερβολικές διαφορικές εξισώσεις

Οι μερικές διαφορικές εξισώσεις δεύτερης τάξης είναι δυνατόν να γραφούν με την γενική μορφή

$$A\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + B\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + \Gamma\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \Delta\frac{\partial f}{\partial x} + E\frac{\partial f}{\partial y} + Zf + H = 0 \tag{1.5}$$

όπου οι συντελεστές Α, Β, Γ, Δ, Ε, Ζ και Η είναι δυνατόν να είναι συναρτήσεις της εξαρτημένης μεταβλητής f, των παραγωγών της ή να είναι σταθερές. Σημαντική παράμετρος για τον χαρακτηρισμό της διαφορικής εξίσωσης (1.5) είναι η διακρίνουσα

$$D = B^2 - 4A\Gamma \tag{1.6}$$

Εάν έχουμε D<0 σε ένα σημείο $\mathbf{x} \in \Omega$, όπου Ω το πεδίο ορισμού της διαφορικής εξίσωσης (1.5), λέμε ότι στο σημείο **x** η εξίσωση είναι ελλειπτική. Αλλιώς αν ισχύει D=0 στο σημείο $\mathbf{x} \in \Omega$, τότε σε αυτό το σημείο **x** η διαφορική εξίσωση είναι παραβολική. Τέλος, στην περίπτωση που έχουμε D>0 σε ένα σημείο $\mathbf{x} \in \Omega$, η διαφορική εξίσωση είναι υπερβολική σε αυτό το σημείο. Παρατηρούμε ότι η διάκριση των μερικών διαφορικών εξισώσεων δεύτερης τάξης σε υπερβολικές, παραβολικές και ελλειπτικές εξαρτάται μόνο από τους συντελεστές Α, Β και Γ των όρων δεύτερης τάξης. Επίσης, τονίζουμε ότι σε διαφορετικές περιοχές του πεδίου ορισμού Ω, η διακρίνουσα D μπορεί να λάβει διαφορετικές τιμές, αρνητικές, θετικές ή μηδενικές. Έτσι η ίδια διαφορική εξίσωση μπορεί σε άλλα σημεία να είναι ελλειπτική, σε άλλα υπερβολική και σε άλλα παραβολική.

Συμπεριφορά των μερικών διαφορικών εξισώσεων

Οι ελλειπτικές, παραβολικές και υπερβολικές εξισώσεις έχουν διαφορετική συμπεριφορά με αποτέλεσμα να εμφανίζονται σε διαφορετικού τύπου φυσικά προβλήματα. Οι υπερβολικές εξισώσεις γενικά διέπουν τα κυματικά φαινόμενα και τις ταλαντώσεις, οι ελλειπτικές εξισώσεις συνήθως περιγράφουν τα μόνιμα φυσικά φαινόμενα (που δεν εξαρτώνται από τον χρόνο t) και οι παραβολικές εξισώσεις κυρίως περιγράφουν τα μη μόνιμα φυσικά φαινόμενα τα οποία εξελίσσονται με το πέρασμα του χρόνου. Βέβαια δεν περιγράφονται όλα τα μόνιμα προβλήματα από ελλειπτικές εξισώσεις. Υπάρχουν περιπτώσεις μόνιμων προβλημάτων όπου η κατεύθυνση της ροής έχει χρονική συμπεριφορά και συνεπώς τέτοια προβλήματα μπορεί να διέπονται από παραβολικές ή υπερβολικές εξισώσεις.

Σημειώνεται ότι για την επίλυση ενός μόνιμου προβλήματος απαιτούνται οριακές συνθήκες, δηλαδή γνωστές τιμές της συνάρτησης f ή των παραγωγών της στα όρια του πεδίου ορισμού Ω.

Για την επίλυση ενός μη μόνιμου προβλήματος απαιτούνται και οριακές και αρχικές συνθήκες. Οι αρχικές συνθήκες είναι γνωστές τιμές της συνάρτησης f για δεδομένες χρονικές στιγμές. Δηλαδή, μία οριακή συνθήκη έχει την μορφή

$$f(x_0, y_0) = f_0 \tag{1.7}$$

ή την μορφή

$$\left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{(x_0, y_0)} = n_0 \tag{1.8}$$

όπου (x_0,y_0) ένα σημείο στο όριο του πεδίου ορισμού Ω, f_0 μία δεδομένη τιμή της συνάρτησης f και n_0 μία δεδομένη τιμή της παραγώγου της. Οι αρχικές συνθήκες έχουν την μορφή

$$f(x, t_0) = g(x) \tag{1.9}$$

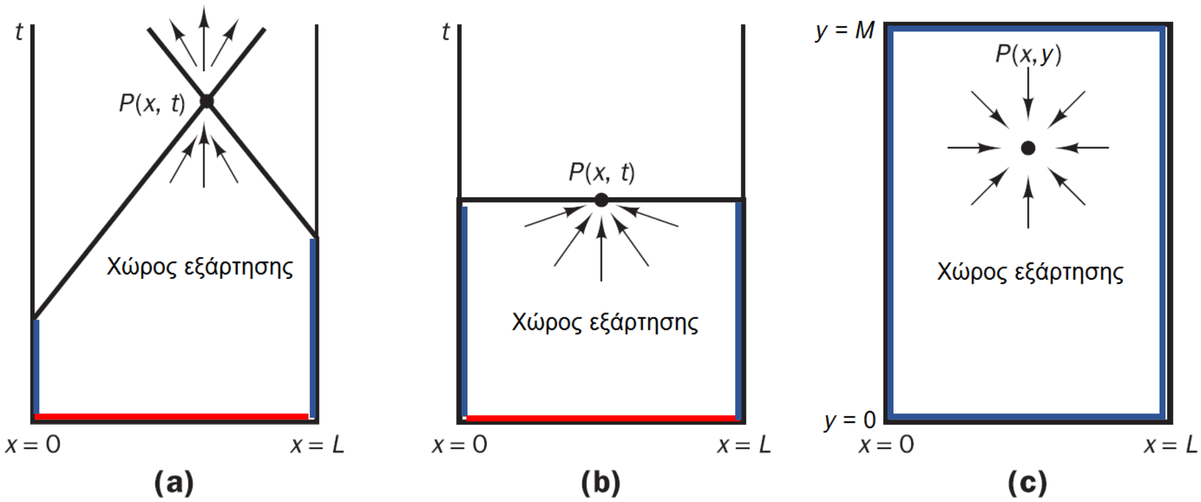
ή την μορφή

$$\left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{(x, t_0)} = h(x) \tag{1.10}$$

όπου t_0 μία δεδομένη χρονική στιγμή και g(x) και h(x) γνωστές συναρτήσεις του x. Οι συνθήκες (1.7) και (1.9) ονομάζονται συνθήκες Dirichlet ενώ οι (1.8) και (1.10)ονομάζονται συνθήκες Neumann. Αξίζει να ειπωθεί ότι οι οριακές και αρχικές συνθήκες, επί της ουσίας, χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό των σταθερών ολοκλήρωσης που προκύπτουν κατά την επίλυση των διαφορικών εξισώσεων.

Στο σχήμα 1 παριστάνεται η συμπεριφορά των μερικών διαφορικών εξισώσεων αναλόγως του εάν είναι υπερβολικές, παραβολικές και ελλειπτικές. Με μπλε χρώμα τονίζονται τα όρια του πεδίου ορισμού στα οποία πρέπει να υπάρχουν οριακές συνθήκες για να είναι δυνατή η επίλυση της διέπουσας διαφορικής εξίσωσης ενώ με κόκκινο χρώμα παριστάνονται τα όρια του πεδίου ορισμού όπου πρέπει να έχουν καθοριστεί αρχικές συνθήκες.

Ας εξετάσουμε πρώτα αναλυτικά τις ελλειπτικές εξισώσεις (σχήμα 1c). Η τιμή της συνάρτησης f σε ένα σημείο $P(x_0,y_0) \in \Omega$ εξαρτάται από την τιμή της ίδιας συνάρτησης σε όλα τα γειτονικά σημεία. Επομένως, ο χώρος εξάρτησης του P, δηλαδή ο χώρος του οποίου τα σημεία επηρεάζουν το P, είναι ολόκληρο το πεδίο ορισμού Ω. Άρα αφού το P δεν είναι κάποιο συγκεκριμένο σημείο, η μεταβολή της συνάρτησης f σε ένα σημείο του Ω επηρεάζει όλα τα υπόλοιπα σημεία του Ω. Αξίζει να σημειώσουμε ότι το πεδίο ορισμού Ω σε ένα μόνιμο πρόβλημα ελλειπτικών εξισώσεων είναι κλειστό, δηλαδή υπάρχουν δύο γνωστές τιμές L, M για τις οποίες ισχύει $x \in [0, L]$ και $y \in [0, M]$.



Σχήμα 1: Ο χώρος επιρροής προβλημάτων α) υπερβολικών, b) παραβολικών και c) ελλειπτικών εξισώσεων.

Έπειτα, ας αναλύσουμε την συμπεριφορά των παραβολικών μερικών διαφορικών εξισώσεων (σχήμα 1b). Η τιμή της συνάρτησης f σε ένα σημείο $P(x_0,t_0) \in \Omega$ εξαρτάται μόνο από τα σημεία με $t < t_0$. Άρα ο χώρος εξάρτησης του P είναι όλα τα σημεία που ανήκουν σε παρελθοντικές τιμές του t_0. Το πεδίο ορισμού σε ένα μη μόνιμο πρόβλημα είναι ανοικτό διότι μπορούν να υπολογιστούν λύσεις για οποιοδήποτε σημείο με $t>0$ (δεν υπάρχει άνω όριο στον άξονα του χρόνου).

Σειρά έχει η ανάλυση των υπερβολικών εξισώσεων (σχήμα 1a) η οποία είναι πιο περίπλοκη και θα παρουσιαστεί ξεχωριστά σε επόμενη ενότητα. Αυτό συμβαίνει διότι στην περίπτωση των παραβολικών και ελλειπτικών εξισώσεων, μία διαταραχή διαδίδεται με άπειρη ταχύτητα εντός του πεδίου ορισμού. Αντίθετα, σε ένα πρόβλημα υπερβολικών εξισώσεων, μία διαταραχή διαδίδεται με πεπερασμένη ταχύτητα c στο εσωτερικό του πεδίου ορισμού. Η ταχύτητα c είναι η ταχύτητα διάδοσης ενός κύματος.

Τέλος, παρατίθενται ορισμένες βασικές μερικές διαφορικές εξισώσεις. Η πρωτότυπη ελλειπτική εξίσωση είναι η εξίσωση Laplace η οποία περιγράφει την ροή δυναμικού των ρευστών και την μόνιμη ροή θερμότητας. Η δισδιάστατη μορφή της εξίσωσης Laplace γράφεται ως εξής:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 0 \tag{1.11}$$

Η πρωτότυπη παραβολική εξίσωση είναι η εξίσωση διάχυσης η οποία περιγράφει τις μη μόνιμες ροές πραγματικών ρευστών και τις μη μόνιμες ροές θερμότητας. Η εξίσωση διάχυσης για μονοδιάστατα προβλήματα γράφεται ως εξής:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = k \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \tag{1.12}$$

όπου k μία σταθερά. Τέλος, η πρωτότυπη υπερβολική εξίσωση είναι η κυματική εξίσωση η οποία, όπως προαναφέραμε, περιγράφει τα κυματικά φαινόμενα με αμελητέες απώλειες ενέργειες. Η κυματική εξίσωση για μονοδιάστατα προβλήματα έχει την ακόλουθη μορφή:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \tag{1.13}$$

Οι εξισώσεις (1.11), (1.12) και (1.13) για τρισδιάστατα προβλήματα γράφονται κατ' αντιστοιχία

$$\nabla^2 f = 0 \tag{1.14}$$

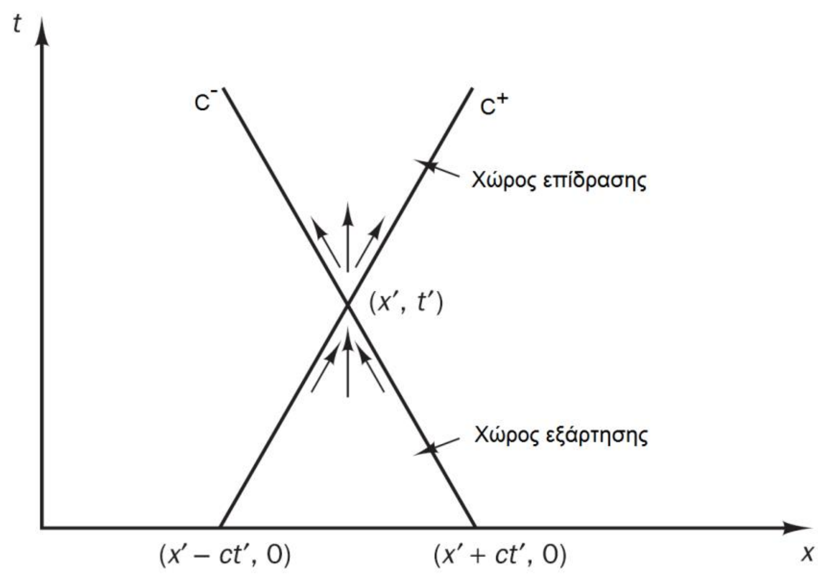
$$\frac{\partial f}{\partial t} = k\nabla^2 f \tag{1.15}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = c^2 \nabla^2 f \tag{1.16}$$

όπου ∇ ο τελεστής ανάδελτα.

Ο ρόλος των χαρακτηριστικών καμπυλών στις υπερβολικές εξισώσεις

Για να κατανοήσουμε την συμπεριφορά ενός φυσικού προβλήματος που διέπεται από υπερβολικές μερικές διαφορικές εξισώσεις ας υποθέσουμε πως έχουμε ένα νήμα άπειρου μήκους ($-\infty < x < +\infty$) το οποίο ταυτίζεται με τον άξονα των x του σχήματος 2. Έστω πως την χρονική στιγμή t=0 προκαλούμε δύο διαταραχές στα σημεία με $x=d_1$ και $x=d_2$ του νήματος έτσι ώστε η πρώτη να διαδίδεται προς τα θετικά x και η δεύτερη προς τα αρνητικά x.



Σχήμα 2: Ο χώρος εξάρτησης και επίδρασης ενός φυσικού φαινομένου υπερβολικών εξισώσεων.

Έτσι η θέση της πρώτης και της δεύτερης διαταραχής συναρτήσει του χρόνου δίνεται κατ' αντιστοιχία από τις σχέσεις

$$x_1 = d_1 + ct \tag{1.17}$$

$$x_2 = d_2 - ct \tag{1.18}$$

Προφανώς αυτές οι δύο διαταραχές θα συναντηθούν την χρονική στιγμή t=t΄ στο σημείο x=x΄ του νήματος. Άρα ισχύει

$$\begin{gathered} x_1 = x_2 = x' \ \Rightarrow \\ d_1 + ct' = d_2 - ct' = x' \end{gathered}$$

Από την παραπάνω σχέση λαμβάνουμε

$$\begin{gathered} d_1 = x' - ct' \\ d_2 = x' + ct' \end{gathered}$$

Επομένως, μία διαταραχή, η οποία την χρονική στιγμή t=0 δημιουργείται εντός του διαστήματος $\left[x'-ct', x'+ct'\right]$, θα έχει φτάσει στο σημείο x=x΄ μέχρι κάποια χρονική στιγμή t_0 με $t_0 \le t'$. Με άλλα λόγια, η περιοχή που οριοθετείται από τον άξονα των x και τις καμπύλες C^+ και C^- είναι ο χώρος εξάρτησης του σημείου P(x΄,t΄). Οι καμπύλες C^+ και C^- ονομάζονται χαρακτηριστικές καμπύλες και δίνονται από τις σχέσεις

$$C^+ :\ x - ct = (x' - ct') = \text{σταθερό} \tag{1.19}$$

$$C^- :\ x + ct = (x' + ct') = \text{σταθερό} \tag{1.20}$$

Στο επίπεδο x-t, η καμπύλη C^+ είναι μία ευθεία με κλίση $dt/dx = 1/c$ ενώ η καμπύλη C^- είναι μία ευθεία με κλίση $dt/dx = -1/c$.

Ως εκ τούτου, η τιμή μίας συνάρτησης f στο σημείο P(x΄,t΄) εξαρτάται μόνο από τις τιμές της ίδιας συνάρτησης στα σημεία εντός του χώρου εξάρτησης. Με την ίδια λογική προκύπτει ότι μία μεταβολή στο σημείο P(x΄,t΄) θα προκαλέσει μεταβολή μόνο στα σημεία του χώρου επίδρασης ο οποίος ορίζεται από τις καμπύλες C^+ και C^- και το ημιεπίπεδο t>t΄.

Απλές κυματικές λύσεις υπερβολικών προβλημάτων

Όπως προαναφέρθηκε η πρωτότυπη υπερβολική εξίσωση είναι η κυματική εξίσωση (1.13). Πραγματοποιώντας αλλαγή μεταβλητών έτσι ώστε $\zeta = x - ct$ και $\eta = x + ct$, η κυματική εξίσωση παίρνει την μορφή

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \zeta \partial \eta} = 0 \tag{1.21}$$

Πολύ εύκολα προκύπτει ότι λύση της διαφορικής εξίσωσης (1.21) είναι η συνάρτηση

$$f\left(\zeta,\eta\right)=F_1(\zeta)+F_2(\eta) \tag{1.22}$$

όπου F_1 και F_2 δύο συναρτήσεις των οποίων η μορφή εξαρτάται από τις αρχικές συνθήκες του προβλήματος. Εκφράζοντας την εξίσωση (1.22) ως προς τις αρχικές μεταβλητές x και t, γίνεται κατανοητό πως η λύση της κυματικής εξίσωσης (1.13) είναι η ακόλουθη:

$$f(x,t)=F_1(x-ct)+F_2(x+ct) \tag{1.23}$$

Η συνάρτηση F_1 έχει σταθερή τιμή, εάν η παράσταση x-ct είναι σταθερή. Ομοίως, η συνάρτηση F_2 έχει σταθερή τιμή, εάν η παράσταση x+ct είναι σταθερή. Επομένως, οι συναρτήσεις F_1 και F_2 παραμένουν αμετάβλητες κατά μήκος των χαρακτηριστικών καμπυλών C^+ και C^- αντίστοιχα. Οι συναρτήσεις F_1 και F_2 ονομάζονται απλές κυματικές λύσεις του φυσικού φαινομένου και περιγράφουν δύο κύματα που διαδίδονται με ταχύτητα c προς την θετική και αρνητική διεύθυνση των x αντίστοιχα χωρίς να αλλάζει η μορφή και το πλάτος τους.

Επιπλέον, ο τύπος και η μορφή των απλών κυματικών λύσεων F_1 και F_2 εξαρτάται από τις αρχικές συνθήκες και οριακές συνθήκες του εκάστοτε προβλήματος. Για να υποδείξουμε την εξάρτηση αυτή, ας εξετάσουμε ξανά το νήμα άπειρου μήκους του σχήματος 2 το οποίο ταυτίζεται με τον άξονα των x. Έστω πως το φυσικό πρόβλημα του σχήματος 2 διέπεται από τις αρχικές συνθήκες

$$f(x,0)=h(x) \tag{1.24}$$

και

$$\frac{\partial f}{\partial t}(x,0)=v(x) \tag{1.25}$$

Η συνάρτηση f(x,t) δίνει την απόσταση από την θέση ισορροπίας (f=0) του σημείου του νήματος με τετμημένη x για την χρονική στιγμή t. Επομένως, η αρχική συνθήκη (1.24) δίνει την αρχική (για t=0) απόσταση κάθε σημείου του νήματος από την θέση ισορροπίας. Δηλαδή, η γραφική παράσταση της συνάρτησης h(x) είναι η μορφή του νήματος για t=0. Η αρχική συνθήκη (1.25) δίνει την αρχική ταχύτητα v(x) του σημείου του νήματος με τετμημένη x. Ο σκοπός μας είναι να επιλύσουμε την κυματική εξίσωση (1.13) με τις αρχικές συνθήκες (1.24) και (1.25) ώστε να προσδιορίσουμε την συνάρτηση f(x,t).

Όπως εξηγήθηκε παραπάνω, η εξίσωση (1.23) αποτελεί λύση της κυματικής εξίσωσης. Έτσι ο προσδιορισμός της συνάρτησης f(x,t) ανάγεται στην εύρεση των απλών κυματικών λύσεων F_1 και F_2 που σχηματίζονται από τις αρχικές συνθήκες (1.24) και (1.25). Συνδυάζοντας τις σχέσεις (1.23) και (1.24) παίρνουμε

$$F_1(x)+F_2(x)=h(x) \tag{1.26}$$

Έπειτα, από τις σχέσεις (1.23) και (1.25) προκύπτει

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[F_2(x)-F_1(x)\right]=\frac{v(x)}{c} \tag{1.27}$$

Οι εξισώσεις (1.26) και (1.27) είναι ένα σύστημα 2 εξισώσεων με αγνώστους τα F_1 και F_2. Επιλύοντας το, έχουμε

$$F_1(\zeta)=\frac{h(\zeta)}{2}-\frac{1}{2c}\int_0^{\zeta} v(\omega)d\omega \tag{1.28}$$

$$F_2(\eta)=\frac{h(\eta)}{2}+\frac{1}{2c}\int_0^{\eta} v(\omega)d\omega \tag{1.29}$$

Προσθέτοντας τις εξισώσεις (1.28) και (1.29) ενώ ταυτόχρονα θέτοντας $\zeta = x - ct$ και $\eta = x + ct$, σχηματίζεται η λύση της κυματικής εξίσωσης για τις αρχικές συνθήκες (1.24) και (1.25), ήτοι

$$f(x,t)=\frac{h(x+ct)+h(x-ct)}{2}+\frac{1}{2c}\int_{x-ct}^{x+ct} v(\omega)d\omega \tag{1.30}$$

Από την εξίσωση (1.30) γίνεται φανερό ότι η τιμή της συνάρτησης f στο σημείο (x, t) είναι ανεξάρτητη από τις αρχικές συνθήκες εκτός του διαστήματος $\left[x-ct, x+ct\right]$. Αυτό το πόρισμα επαληθεύει με πιο αυστηρό μαθηματικό τρόπο ότι ο χώρος εξάρτησης του σημείου P(x΄,t΄) είναι αυτός που περικλείεται από τις καμπύλες C^- και C^+ και τον άξονα των x.

2. Η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών

Η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών είναι μέθοδος αριθμητικής επίλυσης διαφορικών εξισώσεων η οποία βασίζεται στην αντικατάσταση των παραγωγών που εμπεριέχονται σε αυτές με προσεγγιστικούς λόγους διαφορών. Για να αποδείξουμε τις σχέσεις που εφαρμόζονται κατά την χρήση της μεθόδου αυτής, θεωρούμε την συνάρτηση f(x) η οποία είναι παραγωγίσιμη στο πεδίου ορισμού της. Αναπτύσσοντας την συνάρτηση f(x) σε σειρά Taylor γύρω από το σημείο $x=x_0$ έχουμε,

$$f(x)=f(x_0)+(x-x_0)\left.\frac{df}{dx}\right|_{x=x_0}+\frac{1}{2!}(x-x_0)^2\left.\frac{d^2f}{dx^2}\right|_{x=x_0}+\ldots+R_n(x) \tag{2.1}$$

όπου $R_n(x)$ ένα πολυώνυμο το οποίο περιγράφει τους όρους της σειράς Taylor που παραλείπονται. Αν στην παραπάνω σχέση θέσουμε $x=x_0+\Delta x$ (με $\Delta x \in R$), παίρνουμε

$$f(x_0+\Delta x)=f(x_0)+\Delta x\left.\frac{df}{dx}\right|_{x=x_0}+\frac{1}{2}\Delta x^2\left.\frac{d^2f}{dx^2}\right|_{x=x_0}+\frac{1}{6}\Delta x^3\left.\frac{d^3f}{dx^3}\right|_{x=x_0}+\ldots \tag{2.2}$$

Επίσης, θέτοντας $x=x_0-\Delta x$ στην εξίσωση (2.1) προκύπτει

$$f(x_0-\Delta x)=f(x_0)-\Delta x\left.\frac{df}{dx}\right|_{x=x_0}+\frac{1}{2}\Delta x^2\left.\frac{d^2f}{dx^2}\right|_{x=x_0}-\frac{1}{6}\Delta x^3\left.\frac{d^3f}{dx^3}\right|_{x=x_0}+\ldots \tag{2.3}$$

Σε αυτό το σημείο σημειώνουμε ότι Δx είναι το βήμα διακριτοποίησης του πεδίου ορισμού Ω της συνάρτησης f. Δηλαδή, για να εκτιμήσουμε τις παραγώγους της συνάρτησης f, θεωρούμε ότι το x δεν μπορεί να παίρνει οποιαδήποτε τιμή παρά μόνο αυτές που δίνονται από την σχέση $x=c+i\Delta x$ όπου $c \in R$ μία σταθερά και $i \in Z$. Στα περισσότερα προβλήματα θέτουμε c=0.

Αφαιρούμε την εξίσωση (2.3) από την (2.2) ώστε να λάβουμε

$$f(x_0+\Delta x)-f(x_0-\Delta x)=2\Delta x\left.\frac{df}{dx}\right|_{x=x_0}+O(\Delta x^3) \tag{2.4}$$

όπου $O(\Delta x^3)$ μία παράσταση που περιλαμβάνει όρους τρίτης και ανώτερης τάξης του Δx. Η παραπάνω εξίσωση μπορεί να λυθεί ως προς την παράγωγο, ήτοι

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x=x_0}=\frac{f(x_0+\Delta x)-f(x_0-\Delta x)}{2\Delta x}+O(\Delta x^2) \tag{2.5}$$

Η εξίσωση (2.5) δίνει μία αριθμητική προσέγγιση της παραγώγου της συνάρτησης f. Ο όρος $O(\Delta x^2)$ δηλώνει ότι αν το Δx υποδιπλασιαστεί, το σφάλμα στην εκτίμηση της παραγώγου περίπου υποτετραπλασιάζεται. Επιπλέον, η εξίσωση (2.5) χαρακτηρίζεται ως κεντρική διαφορά διότι το σημείο x_0 στο οποίο εκτιμάται η τιμή της παραγώγου βρίσκεται στο κέντρο του διαστήματος [x_0-Δx,x_0+Δx].

Επίσης, προσθέτοντας τις εξισώσεις (2.2) και (2.3) προκύπτει η εκτίμηση για την $2^{η}$ παράγωγο της συνάρτησης f, δηλαδή

$$\left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x=x_0} = \frac{f(x_0+\Delta x) - 2f(x_0) + f(x_0-\Delta x)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \qquad (2.6)$$

Τέλος, αριθμητικές προσεγγίσεις για την $1^{η}$ παράγωγο της συνάρτησης f είναι δυνατόν να εξαχθούν απευθείας από τις εξισώσεις (2.2) και (2.3). Συγκεκριμένα αν αγνοήσουμε τους όρους $2^{ης}$ και ανώτερης τάξης στην εξίσωση (2.2) και λύσουμε ως προς την παράγωγο της f , προκύπτει η εμπρός διαφορά εκτίμησης της παραγώγου η οποία είναι η

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x=x_0} = \frac{f(x_0+\Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} + O(\Delta x) \qquad (2.7)$$

Αντίστοιχα από την εξίσωση (2.3) λαμβάνουμε την οπίσω διαφορά εκτίμησης της παραγώγου της συνάρτησης f:

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x=x_0} = \frac{f(x_0) - f(x_0-\Delta x)}{\Delta x} + O(\Delta x) \qquad (2.8)$$

Παρατηρούμε ότι η χρήση των κεντρικών διαφορών για την εκτίμηση της παραγώγου της f είναι ακριβέστερη από την χρήση εμπρός ή οπίσω διαφορών. Αυτό συμβαίνει διότι ο υποδιπλασιασμός του βήματος διακριτοποίησης Δx, στην περίπτωση των εξισώσεων (2.7) και (2.8), συνεπάγεται υποδιπλασιασμό και του σφάλματος εκτίμησης της παραγώγου στο σημείο x_0. Αντίθετα, όπως προαναφέραμε, υποδιπλασιαμός του βήματος διακριτοποίησης Δx, στην περίπτωση της εξίσωσης (2.5), προκαλεί υποτετραπλασιασμό του σφάλματος στην εκτίμηση μας.