

Описание генератора функций

Содержание

Введение	2
1 Описание основных файлов	4
1.1 Файл customOfficer.py и проверка входных данных	4
1.2 Файл equationParser.py и парсинг уравнений, начальных и граничных условий	4
1.3 Файлы funcGenerator.py, abstractGenerator.py, generator1D.py, generator2D.py, generator3D.py	5
1.4 Файл rhsCodeGenerator.py и генерирование правых частей уравнений, заданных пользователем	6
1.5 Файл derivCodeGenerator.py и генерирование производных	6
1.5.1 PureDerivGenerator	7
1.5.2 MixDerivGenerator	7
2 Конечно-разностные формулы, используемые при генерировании производных	8
2.1 Формулы для производных в центральных функциях	9
2.2 Формулы для производных в функциях расчета границ блока	9
2.2.1 Левая граница	9
2.2.2 Правая граница	10
2.3 Формулы для производных в функциях расчета вершин блока (в $2D$ и $3D$) и в функциях расчета ребер (в $3D$)	11

Введение. Возможности, файлы, идея

Сейчас (31.08.15) генератор умеет генерировать функции в таких случаях:

- одномерный случай с соединениями, ни в одном уравнении нет производных порядка выше второго;
- двумерный случай с соединениями, ни в одном уравнении не содержится смешанных производных и производных порядка выше второго;
- двумерный случай, в уравнениях могут содержаться смешанные производные второго порядка, ни в одном уравнении нет производных порядка выше второго — правильно может быть обработана только ситуация, когда нет соединяющихся блоков (т.е. при генерировании функций не приходится приближать смешанные производные в местах соединений).
- трехмерный случай с соединениями, ни в одном уравнении не содержится смешанных производных и производных порядка выше второго.

Для генерирования функций используются файлы, находящиеся в папке domain-model:

1. customOfficer.py;
2. equationParser.py;
3. funcGenerator.py;
4. abstractGenerator.py;
5. generator1D.py, generator2D.py, generator3D.py;
6. rhsCodeGenerator.py;
7. derivCodeGenerator.py;
8. someFuncs.py;
9. DerivHandler.py.

Файлы 8 и 9 используются для генерации, но функции, лежащие в них, могут использоваться и для других целей. Из файла 8 для генерации используются функции **NewtonBinomCoefficient()**, **generateCodeForMathFunction()**, **determineNameOfBoundary()**, **RectSquare()**, **determineCellIndexOfStartOfConnection2D()**, **getRanges()**. Функции **factorial()** и **getCellCountAlongLine()** из этого же файла используются функциями **NewtonBinomCoefficient()**, **determineCellIndexOfStartOfConnection2D()**, **getRanges()**. Файл 9 содержит функцию, которая находит порядок старшей производной.

Основная идея.

Количество и вид расчетных функций, которые надо сгенерировать, зависит от области, на которой задана система. Центральных функций для блока столько, сколько уравнений задано внутри блока. Сначала генерируются они. Потом генерируются граничные функции.

Сначала все границы каждого блока разбиваются на регионы, каждый из которых обладает уникальными по сравнению с другими регионами свойствами. Свойствами региона являются:

- система уравнений (т.к. в блоке может быть задано несколько систем),
- краевое условие или наличие соединения с другим блоком,

- границы

В зависимости от этих свойств регион может быть либо куском соединения с другим блоком, либо куском границы, на который наложено краевое условие. В первом случае регион будет экземпляром класса `Connection`, во втором случае – класса `BoundCondition`. Каждый из этих классов знает систему уравнений, которая задана пользователем на этом регионе, и границы этого региона. Также есть специфические поля. Для каждой границы блока составляется список таких регионов. Из этих списков составляется список, характерный для всего блока. Получилось, что каждому региону соответствует расчетная функция, которую предстоит сгенерировать. И никаким двум регионам не соответствуют одинаковые расчетные функции. Теперь выполняется проход по всем регионам в составленном списке, и для каждого региона генерируется соответствующая функция.

Затем генерирование сначала центральных, потом граничных функций повторяется для следующего блока.

В одномерном, двумерном и трехмерном случаях различаются способы обхода границ блоков, поэтому созданы отдельные классы для обработки 1D, 2D, 3D.

1D

Тут все просто, потому что каждая из границ каждого блока состоит из единственной клетки. Для каждой границы каждого блока сначала проверяется, есть ли в массиве интерконнектов подходящий интерконнект. Если есть, то сразу генерируется нужная расчетная функция, иначе генерируется функция с краевым условием (дефолтным или не дефолтным).

2D

Тут обход границ происходит в сторону возрастания координаты по оси, параллельной границе. Все регионы располагаются в массиве в таком же порядке. Для создания расчетных функций на вершины блока выбирается крайний регион с каждой стороны каждого массива регионов и создаются 4 пары вида (условие на стороне 0, условие на стороне 2), (условие на стороне 2, условие на стороне 1), (условие на стороне 1, условие на стороне 3), (условие на стороне 3, условие на стороне 0). Т.к. они знают информацию о своих соединениях или краевых условиях, то по ним генерируются функции на вершины.

1 Описание основных файлов

1.1 Файл customOfficer.py и проверка входных данных

Файл 2 (customOfficer.py) создан для проверки некоторых введенных в *.json данных на корректность перед запуском генерации функций. Этот файл содержит класс **Reviewer**, который связан с внешним миром методом **ReviewInput()**. В методе **createCPPandGetFunctionMaps()** класса **Model** создается экземпляр класса **Reviewer** и вызывается его метод **ReviewInput()**. Этот метод проверит правильность введения блоков и параметров.

Основные методы класса **Reviewer**:

- **ReviewParameters()**. Проверит, нет ли в списке параметров "Params" повторяющихся имен; совпадает ли множество ключей каждого из словарей в "ParamValues" с множеством элементов списка "Params"; правильно ли установлен "DefaultParamsIndex".
- **ReviewBlocks()**. Проверит каждый из блоков по таким критериям:
 - размеры блока ("Size") заданы неотрицательными числами;
 - индекс уравнения по умолчанию и индекс начального условия по умолчанию заданы корректно;
 - корректно заданы границы регионов уравнений, регионов начальных условий, регионов граничных условий (при этом нет контроля за наложением одного региона на другой, это остается на совести пользователя); этим будет заниматься метод **ReviewEqRegOrInitRegOrBoundReg()**;
 - одинаково количество уравнений в каждой системе, участвующей в задаче (система участвует в задаче, если она задана в списке "Equations" и при этом есть блок или часть блока, на котором задана именно эта система) (метод **ReviewEquations()**);
 - количество компонент для каждого начального условия совпадает с количеством уравнений в каждой системе (метод **ReviewInitials()**). То же самое и для граничных условий (метод **ReviewBounds()**).
- **ReviewInput()**. Вызывает методы **ReviewParameters()** и **ReviewBlocks()**.

Недостатки проверяльщика:

- Не определено до конца, какие данные нужно проверять на корректность, а какие нет. Поэтому некоторые проверки могут быть лишними, некоторые — отсутствовать.
- Корректность ввода интерконнектов пока что нигде не проверяется!

1.2 Файл equationParser.py и парсинг уравнений, начальных и граничных условий

Мозги парсера — библиотека `ruparsing`. Этот файл (equationParser.py) содержит три класса:

- **CorrectnessController**. Занимается проверкой уравнений и математических функций (например, используемых в качестве начальных или граничных условий) на корректность ввода (например, правильность расстановки скобок, правильность расстановки операторов $+$, $-$, $*$, $/$ и т.д.)

- **ParsePatternCreator**. Чтобы распарсить некое выражение средствами `ru parsing`, нужно составить подходящую под это выражение грамматику. Нам надо парсить уравнения (выделять их правые части) и отдельно функции. Для этого надо создать 2 разных (но очень похожих) грамматики. Еще надо получать из левых частей уравнений список компонент искомой функции. Надо поэтому уравнения парсить уже по-другому (выделять их левые части), т.е. есть необходимость создания третьей грамматики. Этот класс отвечает за создание этих грамматик.
- **MathExpressionParser**. С помощью созданной предыдущим классом грамматики либо парсит уравнение, либо математическую функцию, либо возвращает список компонент искомой функции.

Клиент использует только класс 1.2. Это происходит в методе `generateAllPointInitials()` класса `abstractGenerator` для того, чтобы парсить начальные условия; в методе `generateCentralFunctionCode()` того же класса для парсинга уравнений, необходимых для генерации центральных функций; в реализациях метода `generateBoundsAndIcs()` классов `generator1D` и `generator2D` (а в будущем и `generator3D`).

Недостатки парсера:

- Работает долго.
- Проверка на корректность ввода уравнений и математических функций (расстановка скобок и т.д.) сделана без использования средств `ru parsing`. Это порождает целый дополнительный класс, который занимается проверкой.

1.3 Файлы `funcGenerator.py`, `abstractGenerator.py`, `generator1D.py`, `generator2D.py`, `generator3D.py`

Класс `abstractGenerator` и его наследники `generator1D`, `generator2D` и `generator3D` выполняют почти всю работу, связанную с генерацией (оставшуюся, но все же весьма значительную часть работы выполняют классы, находящиеся в файлах 6, 7).

В методе `createCPPandGetFunctionMaps()` класса `Model` создается экземпляр класса `FuncGenerator`, описание которого находится в рассматриваемом файле 3. В конструкторе этого класса в зависимости от размерности задачи выбирается конкретная реализация генератора (т.е. полем этого класса становится экземпляр одного из трех классов `generator1D`, `generator2D`, `generator3D`). В дальнейшем метод `generateAllFunctions()` класса `FuncGenerator` работает именно с этой конкретной реализацией. Также этот метод формирует список словарей `functionMaps`, по которому формируется матрица пересчета и структура которого описана в файле `definition` в папке `doc`.

Вот полный список классов файла `newFuncGenerator.py` с их описанием:

- **FuncGenerator**. Опираясь на генератор для нужной размерности, определенная в нем функция `generateAllFunctions()` генерирует:
 - определения всех констант (дефайнов);
 - функции для работы с начальными условиями и параметрами;
 - для каждого блока — набор центральных функций, набор граничных, угловых и соединительных (интерконнектов) функций.

- **abstractGenerator**. Содержит общие для всех трех генераторов поля и методы. Например, в нем определены методы генерирования констант (дефайнов) (метод **generateAllDefinitions()**), функций для начальных условий (**generateAllPointInitials()**), параметров (**generateParamFunction()**); методы генерирования функций для граничных условий Дирихле (**generateDirichlet()**) или Неймана, а также интерконнектов (**generateNeumannOrInterconnect()**) (функция, генерирующая интерконнект, совпадает с функцией, генерирующей Неймана, просто ей передаются параметры с другим смыслом); метод генерирования центральных функций **generateCentralFunctionCode()**.
- **generator1D**, **generator2D**, **generator3D**. Содержат специфические методы и поля, нужные для обработки задачи указанной размерности. Генератор **generator3D** не работает и не изменялся очень очень давно. Важно то, что у этих классов есть общие методы **getBlockInfo()** и **generateBoundsAndIcs()**, которые вызываются в методе **generateAllFunctions()** класса **FuncGenerator**. В первом методе определяются все уравнения, заданные на блоке (т.е. копится информация для генерации центральных функций), и для каждой границы определяются граничные условия и интервалы в клетках, на которых они действуют. А также начинает формироваться словарь из списка **functionMaps**. Во втором методе генерируются граничные, угловые, соединительные функции и завершается формирование словаря из списка **functionMaps**.
- **InterconnectRegion**. Создан для того, чтобы унифицировать обработку границ двумерного (и может, трехмерного) блока, т.к. граничные условия и соединения с другими блоками для массива **functionMaps** надо представлять в одном и том же формате. Просто при создании экземпляра генератора для каждого блока создается список его соединительных регионов.
- **BoundCondition** и **Connection**. Метод **getBlockInfo()** в двумерном (и может, в трехмерном) случае составляет список элементов, которые есть экземпляры этих классов.

1.4 Файл `rhsCodeGenerator.py` и генерирование правых частей уравнений, заданных пользователем

Файл содержит класс **RHSCodeGenerator**, который отвечает за генерацию правой части одного уравнения системы, заданной пользователем, с учетом краевых условий или соединений. Пример возврата такой функции — строка:

```
result[idx + 0] = params[0] * ((2.0 * DXM2 * (
    source[idx - Block0StrideX * Block0CELLSIZE + 0] -
    source[idx + 0] + (0.0) * DX)))
```

Этим занимается метод **generateRightHandSideCode()**. Методы **generateDirichlet()** и **generateNeumannOrInterconnect()** класса **abstractGenerator** используют именно этот метод. Отдельная задача — сгенерировать производную с нужным конечно-разностным приближением. Подготовкой к такой генерации занимаются методы **callDerivGenerator()** и **callSpecialDerivGenerator()**. А саму производную генерируют уже методы одного из двух классов, описанных в файле 7.

1.5 Файл `derivCodeGenerator.py` и генерирование производных

Т.к. в уравнении могут встретиться и чистые и смешанные производные, а смешанные производные в случае соединения блоков порождают много разных видов функций,

которые необходимо сгенерировать, то удобно поручить генерирование чистых и смешанных производных разным классам. Эти классы:

- **PureDerivGenerator**;
- **MixDerivGenerator**.

1.5.1 PureDerivGenerator

Для центральной функции способен сгенерировать чистую производную любого порядка (потому что конечно-разностные приближения для них в этом случае содержат однотипные элементы, различно только их количество и коэффициенты перед слагаемыми). В зависимости от того, какими значениями был проинициализирован экземпляр этого класса, за генерацию производной отвечает одна из трех функций:

- **commonPureDerivativeAlternative()** — генерировать производную для центральной функции или для граничной в случае, когда граничное условие не влияет на производную (например, первая производная по y вдоль границы $x = 0$);
- **specialPureDerivativeAlternative()** — генерировать производную для граничной функции, когда граничное условие влияет на производную (например, производная по x вдоль границы $x = x_{max}$);
- **interconnectPureDerivAlternative()** — генерировать производную для функции-соединения (для интерконнекта).

1.5.2 MixDerivGenerator

Пока что способен генерировать смешанные производные только второго порядка для несоединенных блоков. Функции-генераторы:

- **commonMixedDerivativeAlternative()** — генерировать производную для центральной функции;
- **specialMixedDerivativeAlternative()** — генерировать производную для граничной функции.

Производные в углах двумерного блока генерируются по частям, а потом объединяются в одну строку в методе **callDerivGenerator()** класса **RHSCodeGenerator**.

2 Конечно-разностные формулы, используемые при генерировании производных

Расчетные функции (которые и генерирует генератор) отличаются друг от друга только выражениями, аппроксимирующими производные по пространственным переменным. Если рассматриваемая система уравнений n -мерна (т.е. искомая функция — это вектор-функция $u = (u_1, \dots, u_n)$, $u_k = u_k(t, x, y, z)$, $k = \overline{1, n}$) и ни одно из уравнений не содержит смешанных производных и производных порядка выше второго, то i -ое уравнение этой системы ($i = \overline{1, n}$) имеет вид:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = f \left(u_1, \frac{\partial u_1}{\partial x}, \frac{\partial u_1}{\partial y}, \frac{\partial u_1}{\partial z}, \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 u_1}{\partial y^2}, \frac{\partial^2 u_1}{\partial z^2}, \dots, u_n, \frac{\partial u_n}{\partial x}, \frac{\partial u_n}{\partial y}, \frac{\partial u_n}{\partial z}, \frac{\partial^2 u_n}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 u_n}{\partial y^2}, \frac{\partial^2 u_n}{\partial z^2} \right).$$

Для простоты записи можно считать, что система одномерна, т.е. есть всего одно уравнение:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = f \left(u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, \frac{\partial u}{\partial z}, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right). \quad (1)$$

Надо аппроксимировать все производные, стоящие в правой части (1). Нужны аппроксимации для:

1. центральных функций;
2. функций для расчета границ блока;
3. функций для расчета вершин блока (в двумерном и трехмерном случаях);
4. функций для расчета ребер блока (в трехмерном случае).

В 2. - 4. надо учитывать краевые условия (в случае краевых условий Неймана как раз и возникает необходимость аппроксимировать производные, а в случае условий Дирихле вместо правой части уравнения (1) просто подставляется значение производной функции, являющейся этим условием), соединения блоков и то, что на разных частях одного блока могут быть заданы разные уравнения. Для приближения производных во всех функциях используются центральные конечные разности.

Рассмотрим трехмерный блок — параллелепипед

$$\Pi = \{(x, y, z) \in R^3 | x \in [x_0, x_1], y \in [y_0, y_1], z \in [z_0, z_1]\}.$$

Пусть $m, n, p \in N$ и на Π введена сетка с шагами $\Delta x = (x_1 - x_0)/m$, $\Delta y = (y_1 - y_0)/n$, $\Delta z = (z_1 - z_0)/p$ по пространственным переменным x, y, z и введен шаг Δt по времени t . Значения функции u в узлах сетки далее обозначаются обычным образом:

$$u_{ijk}^\ell := u(\ell \Delta t, x_0 + i \Delta x, y_0 + j \Delta y, z_0 + k \Delta z),$$

а значения производных в узлах сетки пишутся похожим образом, например:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)_{ijk}^\ell := \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(\ell \Delta t, x_0 + i \Delta x, y_0 + j \Delta y, z_0 + k \Delta z).$$

Здесь $\ell = \overline{0, L}$, $i = \overline{0, m}$, $j = \overline{0, n}$, $k = \overline{0, p}$.

Замечание: т.к. генератор все-таки умеет генерировать функции для задачи, когда в уравнении есть смешанные производные и при этом рассматриваются блоки без соединений, то для этой ситуации ниже также описаны формулы, используемые генератором для аппроксимации смешанных производных. Для такой задачи уравнение (1) выглядит по-другому:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = f \left(u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, \frac{\partial u}{\partial z}, \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}, \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial z}, \frac{\partial^2 u}{\partial z \partial y}, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right). \quad (2)$$

2.1 Формулы для производных в центральных функциях

В центральных функциях для приближения производных используется самый обычный вид конечно-разностных формул.

Первая производная (например, по z):

$$\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{ijk}^{\ell} \approx \frac{u_{ijk+1}^{\ell} - u_{ijk-1}^{\ell}}{2\Delta z} \quad (3)$$

Вторая чистая производная (например, по yy):

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_{ijk}^{\ell} \approx \frac{u_{ij+1k}^{\ell} - 2u_{ijk}^{\ell} + u_{ij-1k}^{\ell}}{(\Delta y)^2} \quad (4)$$

Для центральных функций смешанные производные генерировать очень легко. Смешанная производная (например, по xz):

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial z}\right)_{ijk}^{\ell} \approx \frac{u_{i+1jk+1}^{\ell} - u_{i-1jk+1}^{\ell} - u_{i+1jk-1}^{\ell} + u_{i-1jk-1}^{\ell}}{4\Delta x \Delta z} \quad (5)$$

2.2 Формулы для производных в функциях расчета границ блока

2.2.1 Левая граница

Рассмотрим, например, границу $y = y_0$ блока. Пусть на каком-то куске

$$\Pi_0 = \{(x, y, z) \in \Pi \mid y = y_0; \quad x_0 \leq a \leq x \leq b \leq x_1; \quad z_0 \leq c \leq z \leq d \leq z_1\}$$

этой границы пользователь задал краевое условие Неймана:

$$\frac{\partial u}{\partial y}(t, x, y_0, z) = \varphi(t, x, z).$$

И пусть на Π_0 также задано уравнение (2). Тогда при аппроксимации производных в функциях для расчета куска Π_0 используются такие формулы.

Первая производная по y :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i0k}^{\ell} \approx \varphi_{ik}^{\ell} = \varphi(\ell\Delta t, x_0 + i\Delta x, z_0 + k\Delta z), \quad (6)$$

а первые производные по x и z будут выглядеть как в (3) (т.е. будут центральными).

Вторая производная по y :

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_{i0k}^{\ell} \approx \frac{2(u_{i1k}^{\ell} - u_{i0k}^{\ell} - \Delta y \varphi_{ik}^{\ell})}{(\Delta y)^2},$$

а вторые производные по x и z будут как в (4) (т.е. будут центральными).

Смешанная производная по xy :

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right)_{i0k}^{\ell} \approx \frac{\varphi_{i+1k}^{\ell} - \varphi_{i-1k}^{\ell}}{2\Delta x}, \quad (7)$$

смешанная производная по zy :

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial z \partial y}\right)_{i0k}^{\ell} \approx \frac{\varphi_{ik+1}^{\ell} - \varphi_{ik-1}^{\ell}}{2\Delta z}, \quad (8)$$

смешанная производная по xz будет как в (5) (т.е. будет центральной).

Предположим теперь, что область Π_0 является местом соединения рассматриваемого блока с каким-то другим. Это значит, что на Π_0 вообще не может быть задано краевых условий. Здесь генератор бессилён при генерировании смешанных производных, поэтому считаем, что на Π_0 задано уравнение (1). Формулы такие.

Первая производная по y :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i0k}^\ell \approx \frac{u_{i1k}^\ell - ic[idx1][idx2]}{2\Delta y},$$

а первые производные по x и z опять будут выглядеть как в (3). Тут ic – массив интерконнектов, передающийся в расчетную функцию, а $idx1$ и $idx2$ определяются генератором.

Вторая производная по y :

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_{i0k}^\ell \approx \frac{u_{i1k}^\ell - 2u_{i0k}^\ell + ic[idx1][idx2]}{(\Delta y)^2},$$

а вторые производные по x и z опять будут как в (4).

Формулы для границ $x = x_0$, $z = z_0$ строятся по аналогии.

2.2.2 Правая граница

Рассмотрим границу $y = y_1$ блока. Пусть на куске

$$\Pi_1 = \{(x, y, z) \in \Pi \mid y = y_1; \quad x_0 \leq A \leq x \leq B \leq x_1; \quad z_0 \leq C \leq z \leq D \leq z_1\}$$

этой границы пользователь задал краевое условие Неймана:

$$\frac{\partial u}{\partial y}(t, x, y_1, z) = \psi(t, x, z).$$

И пусть на Π_1 также задано уравнение (2). Формулы такие.

Для первых производных по x , z формулы будут такие же, как в (3), а по y — как в (6) с заменой функции φ на ψ и среднего индекса 0 на n в левой части. Для смешанной производной по xz формула как в (5), а для производных по xu и zu формулы как в (7), (8) с заменой функции φ на ψ и среднего индекса 0 на n в левой части.

Сильно изменяется вторая производная по y :

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_{ink}^\ell \approx \frac{2(u_{in-1k}^\ell - u_{ink}^\ell + \Delta y \psi_{ik}^\ell)}{(\Delta y)^2},$$

а вторые производные по x и z опять будут как в (4).

Если область Π_1 является местом соединения рассматриваемого блока с каким-то другим, то на Π_0 вообще не может быть задано краевых условий. Считаем, что на Π_1 задано уравнение (1). Формулы такие.

Первая производная по y :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{ink}^\ell \approx \frac{ic[idx1][idx2] - u_{in-1k}^\ell}{2\Delta y},$$

а первые производные по x и z опять будут выглядеть как в (3).

Вторая производная по y :

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_{ink}^\ell \approx \frac{ic[idx1][idx2] - 2u_{ink}^\ell + u_{in-1k}^\ell}{(\Delta y)^2},$$

а вторые производные по x и z опять будут как в (4).

2.3 Формулы для производных в функциях расчета вершин блока (в $2D$ и $3D$) и в функциях расчета ребер (в $3D$)

Здесь для производных формулы те же самые, что и в п. 2.1 и 2.2. Отличие только в том, что для граничных функций производные только по какому-нибудь одному аргументу будут приближены нецентральными формулами, а по всем остальным — центральными. Здесь же для вершин в двумерном случае производные по обоим аргументам будут приближены нецентральными формулами, а в трехмерном — по всем трем. Для ребер в $3D$ производные по двум аргументам будут приближены нецентральными формулами, а по третьему аргументу — центральными.

Особенность только в аппроксимации смешанных производных. Пусть рассматривается трехмерный блок Π (без соединений!) и в окрестности какого-то угла, например, $x = x_0$, $y = y_0$, $z = z_1$ задано уравнение (2) и заданы такие условия Неймана на соответствующие границы (можно сразу для простоты считать, что они заданы на каждой из границ полностью, а не на отдельных их частях):

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t, x_0, y, z) = f(t, y, z), \quad \frac{\partial u}{\partial y}(t, x, y_0, z) = g(t, x, z), \quad \frac{\partial u}{\partial z}(t, x, y, z_1) = h(t, x, y).$$

Тогда производные по xu , xz , yz в рассматриваемой вершине будут аппроксимироваться формулами:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \right)_{00p}^\ell &\approx \left(\frac{f_{j+1k}^\ell - f_{j-1k}^\ell}{4\Delta y} + \frac{g_{i+1k}^\ell - g_{i-1k}^\ell}{4\Delta x} \right) \Big|_{i=0, j=0, k=p}; \\ \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial z} \right)_{00p}^\ell &\approx \left(\frac{f_{jk+1}^\ell - f_{jk-1}^\ell}{4\Delta z} + \frac{h_{i+1j}^\ell - h_{i-1j}^\ell}{4\Delta x} \right) \Big|_{i=0, j=0, k=p}; \\ \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y \partial z} \right)_{00p}^\ell &\approx \left(\frac{g_{ik+1}^\ell - g_{ik-1}^\ell}{4\Delta z} + \frac{h_{ij+1}^\ell - h_{ij-1}^\ell}{4\Delta y} \right) \Big|_{i=0, j=0, k=p}. \end{aligned}$$

Проблема тут в том, что приходится считать, что нам известны значения функций f , g и h за пределами блока Π .

Формулы для производных на ребрах чуть-чуть отличаются. Ребро — это место пересечения двух границ. Рассмотрим какое-нибудь ребро, например, $x = x_1$, $z = z_0$. Пусть на соответствующих границах заданы условия Неймана:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t, x_1, y, z) = \xi(t, y, z), \quad \frac{\partial u}{\partial z}(t, x, y, z_0) = \eta(t, x, y).$$

Тогда формулы для аппроксимации производных на рассматриваемом ребре такие:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \right)_{mj0}^\ell &\approx \left(\frac{\xi_{j+1k}^\ell - \xi_{j-1k}^\ell}{2\Delta y} \right) \Big|_{k=0}; \\ \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial z} \right)_{mj0}^\ell &\approx \left(\frac{\xi_{jk+1}^\ell - \xi_{jk-1}^\ell}{4\Delta z} + \frac{\eta_{i+1j}^\ell - \eta_{i-1j}^\ell}{4\Delta x} \right) \Big|_{i=m, k=0}; \\ \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y \partial z} \right)_{mj0}^\ell &\approx \left(\frac{\eta_{ij+1}^\ell - \eta_{ij-1}^\ell}{4\Delta y} \right) \Big|_{i=m}. \end{aligned}$$