3.1 Конечно-разностная аппроксимация

Метод конечных разностей (МКР, FDM) разработан А. Томом в 1920 г. под названием «Метод квадратов» для решения нелинейных уравнений гидродинамики. С тех пор метод нашел применение для решения задач из различных областей. Методы конечных разностей основаны на аппроксимациях, которые позволяют заменить дифференциальные уравнения уравнениями конечных разностей. Разностные уравнения имеют алгебраический вид. Они ставят в соответствие значению зависимой переменной в точке расчетной области значение в некоторой соседней точке. Решение методом конечных разностей в основном состоит из трех этапов: разделения области решения на сетку узлов; аппроксимации данного дифференциального уравнения разностным эквивалентом; решения разностных уравнений с учетом заданных граничных и начальных условий. Таким образом, при вычислениях МКР осуществляется аппроксимация производных функций одной или нескольких переменных значениями этой функции в дискретном множестве значений аргументов (в узлах). Совокупность узлов образует сетку, покрывающую расчетную область [32].

Пусть функция $f(x)$ дифференцируема на интервале $(x_0 - h_1, x_0 + h_2)$ и имеет производную в точке B $(x = x_0)$, равную тангенсу угла наклона касательной DE в этой точке (рисунок 3.1). Таким образом, существует предел отношения приращения функции к приращению аргумента:

$$f'_{FD}(x_0) = \lim_{x \to x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} =$$

$$= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} \approx \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}.$$

Ее можно вычислить в близко расположенной точке, например в точке C. Тогда $\Delta x = h_2$ и

$$f'_{FD}(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h_2) - f(x_0)}{h_2}.$$

Это так называемая правая или правосторонняя конечно-разностная формула (в англоязычной литературе ее часто называют forward-difference). Вычислим вторую производную:

$$f''_{FD}(x_0) \approx \frac{f'\left(x_0 + \frac{3}{2}h_2\right) - f'\left(x_0 + \frac{1}{2}h_2\right)}{h_2} =$$

$$= \frac{1}{h_2}\left[\frac{f(x_0 + 2h_2) - f(x_0 + h_2)}{h_2} - \frac{f(x_0 + h_2) - f(x_0)}{h_2}\right] =$$

$$= \frac{f(x_0 + 2h_2) - 2f(x_0 + h_2) + f(x_0)}{{h_2}^2}.$$

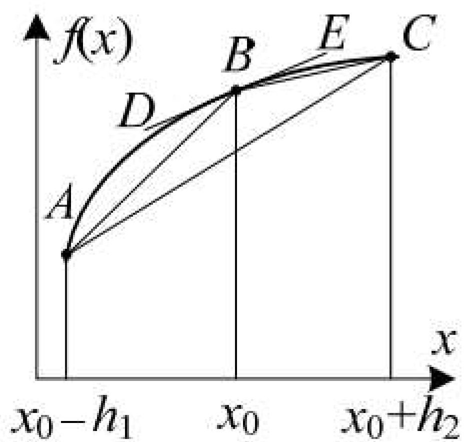

Рисунок 3.1 – Аппроксимация производной конечными разностями

С тем же успехом можно использовать левую или левостороннюю формулу (backward-difference):

$$f'_{BD}(x_0) = \lim_{x \to x_0} \frac{f(x_0) - f(x)}{x_0 - x} =$$

$$= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0) - f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x} \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x}.$$

Тогда в точке A $(x = x_0 - h_1)$ получим

$$f'_{BD}(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - h_1)}{h_1}. \tag{3.1}$$

Расстояние между точками, в которых вычисляются значения функции, называется шагом сетки (поэтому метод конечных разностей также называют методом сеток). В данном случае шаги отличаются по значению, т. е. используется неравномерная сетка. Вычислим вторую производную:

$$f''_{BD}(x_0) \approx \frac{f'\left(x_0 - \frac{1}{2}h_1\right) - f'\left(x_0 - \frac{3}{2}h_1\right)}{h_1} =$$

$$= \frac{1}{h_1}\left[\frac{f(x_0) - f(x_0 - h_1)}{h_1} - \frac{f(x_0 - h_1) - f(x_0 - 2h_1)}{h_1}\right] =$$

$$= \frac{f(x_0) - 2f(x_0 - h_1) + f(x_0 - 2h_1)}{h_1^{\,2}}.$$

Еще одним вариантом является использование центральной или двусторонней разностной формулы (central-difference)

$$f'_{CD}(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h_2) - f(x_0 - h_1)}{h_1 + h_2}.$$

Последняя формула дает более точное, чем предыдущие, решение, поскольку значение производной равно тангенсу угла наклона хорды AC, что ближе к точному решению.

При $h_2 = h_1 = h$ получим

$$f'_{CD}(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}. \quad (3.2)$$

Далее, используя центральные разности и полагая, что $h_2 = h_1 = h$, вычислим вторую производную:

$$f''_{CD}(x_0) \approx \frac{f'(x_0 + h/2) - f'(x_0 - h/2)}{h} =$$

$$= \frac{1}{h}\left[\frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}\right],$$

$$f''_{CD}(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2}. \qquad (3.3)$$

Эта формула называется второй разностной производной. В ней точка, в которой аппроксимируется производная, центральная среди точек, вовлеченных в аппроксимацию. Зависимость производной (3.3) от значений функции $f(x)$ в точках, используемых для аппроксимации, часто иллюстрируется «шаблоном» или «молекулой», как показано на рисунке 3.2.

Необходимо отметить важность правосторонних и левосторонних разностей.

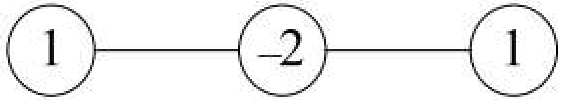

Рисунок 3.2 – Трехточечный шаблон для второй разностной производной (одномерный случай)

Так, на рисунке 3.3 схематично показана ситуация, когда неприменимы ни левосторонние, ни центральные разности, поскольку для их использования необходимо знать значение функции в точке x_{-1} $(x_0 - h)$.

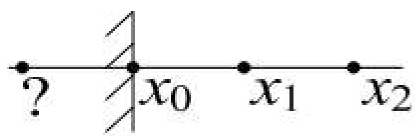

Рисунок 3.3 – Случай применимости только правосторонних разностей

Оценим количественно ошибку конечно-разностных аппроксимаций. Это можно сделать, используя разложение функции в ряд Тейлора:

$$FD: f(x_0+h_2) =$$

$$= f(x_0) + h_2 f'(x_0) + \frac{1}{2!} h_2^2 f''(x_0) + \frac{1}{3!} h_2^3 f'''(x_0) + ..., \tag{3.4}$$

$$BD: f(x_0-h_1) =$$

$$= f(x_0) - h_1 f'(x_0) + \frac{1}{2!} h_1^2 f''(x_0) - \frac{1}{3!} h_1^3 f'''(x_0) + ... \tag{3.5}$$

Видно, что оценки (3.4) и (3.5) имеют погрешность порядка $h_{1,2}$ (записывается как $O(h_{1,2})$), возникающую за счет отбрасывания высших членов ряда Тейлора. Вычтем (3.5) из (3.4):

$$f(x_0+h_2) - f(x_0-h_1) =$$

$$= (h_2+h_1) f'(x_0) + \frac{1}{2!}\left(h_2^2 - h_1^2\right) f''(x_0) + O(h^3). \tag{3.6}$$

Поделив левую и правую части выражения (3.6) на $h_2 + h_1$, получим

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h_2) - f(x_0 - h_1)}{h_2 + h_1} + O(h_2 - h_1), \qquad (3.7)$$

т.е. формулу, которая также имеет первый порядок погрешности. Однако при $h_1 = h_2 = h$ в формуле (3.6) исчезает член, содержащий вторую производную, и тогда получим формулу

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} + O\left(h^2\right), \qquad (3.8)$$

имеющую погрешность $O\left(h^2\right)$. Сложим (3.4) и (3.5):

$$f(x_0 + h) + f(x_0 - h) = 2f(x_0) + h^2 f''(x_0) + O\left(h^4\right). \qquad (3.9)$$

Поделив это выражение на h^2, получим производную (3.3), погрешность которой имеет порядок $O\left(h^2\right)$.

Таким образом, погрешность конечно-разностных формул определяется значением шага h. Чем меньше шаг, тем формула точнее. Однако при неограниченном уменьшении шага погрешность вычисления производных начинает увеличиваться, так как при этом разность между значениями функции в соседних узлах сетки уменьшается, что приводит к возрастанию влияния ошибок округления. Типовая зависимость погрешности конечно-разностной формулы от шага сетки показана на рисунке 3.4.

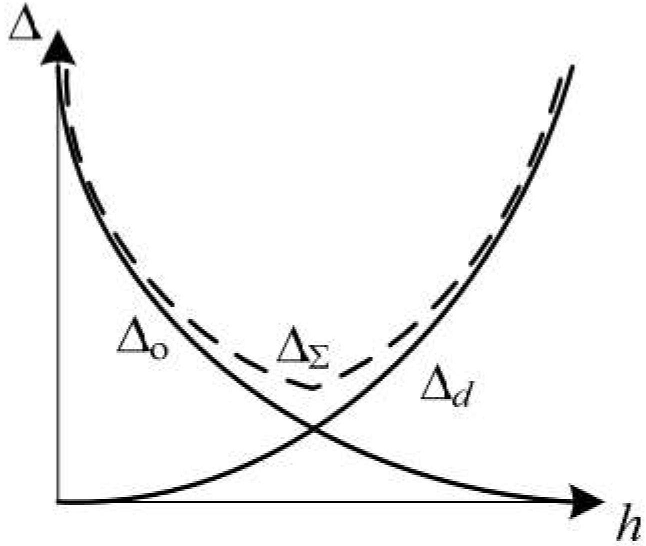

Рисунок 3.4 – Зависимость погрешности конечно-разностной аппроксимации от шага сетки: Δ_d – погрешность, вызванная отбрасыванием высших членов ряда Тейлора; Δ_o – погрешность, вызванная конечной точностью представления чисел; Δ_Σ – суммарная погрешность