ТРУДЫ ИНСТИТУТА МАТЕМАТИКИ И МЕХАНИКИ УрО РАН

Том 30 № 4 2024

УДК 519.653

АНАЛИЗ ФОРМУЛ ЧИСЛЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ НА РАВНОМЕРНОЙ СЕТКЕ ПРИ НАЛИЧИИ ПОГРАНИЧНОГО СЛОЯ[1]

А. И. Задорин

Рассматривается вопрос численного дифференцирования функций с большими градиентами. Предполагается, что для исходной функции одной переменной справедлива декомпозиция в виде суммы регулярной составляющей и погранслойной составляющей, отвечающей за большие градиенты функции и известной с точностью до множителя. Такая декомпозиция справедлива, в частности, для решения сингулярно возмущенной краевой задачи. Проблема в том, что применение к функциям с большими градиентами классических полиномиальных формул численного дифференцирования может приводить к существенным погрешностям. Исследуются формулы численного дифференцирования, точные на погранслойной составляющей, и оценивается их погрешность. Обосновано, что при наличии у функции погранслойной составляющей такие формулы являются более точными в сравнении с классическими. Предложен подход к оцениванию погрешности предложенных формул, применимость которого показана в частных случаях. Приведены результаты численных экспериментов, согласующиеся с полученными оценками погрешностей и показывающие преимущество в точности предложенных формул.

Ключевые слова: функция одной переменной, большие градиенты, погранслойная составляющая, неполиномиальная формула численного дифференцирования, оценка погрешности.

A. I. Zadorin. Analysis of numerical differentiation formulas on a uniform grid in the presence of a boundary layer.

The issue of numerical differentiation of functions with large gradients is considered. It is assumed that there is a decomposition of a given function of one variable into the sum of a regular component and a boundary layer component; the latter is responsible for the large gradients of the function and is known up to a factor. This decomposition is valid, in particular, for a solution of a singularly perturbed boundary value problem. However, the application of the classical polynomial formulas of numerical differentiation to functions with large gradients may produce significant errors. Numerical differentiation formulas that are exact on the boundary layer component are studied, and their error is estimated. Such formulas are proved to be more exact than the classical ones in the case of the presence of a boundary layer component. An approach to estimating the error of the proposed formulas is suggested, and its applicability is shown in particular cases. The results of numerical experiments are presented. These results comply with the obtained error estimates and show the advantage in accuracy of the proposed formulas.

Keywords: function of one variable, large gradients, boundary layer component, nonpolynomial formula for numerical differentiation, error estimation.

MSC: 65D25

DOI: 10.21538/0134-4889-2024-30-4-106-116

Введение

Применение классических полиномиальных формул численного дифференцирования [1] при наличии пограничного слоя может приводить к значительным погрешностям [2]. В связи с этим возникает необходимость построения формул численного дифференцирования, погрешность которых не растет из-за больших градиентов функции в области пограничного слоя.

В [2] предложена интерполяционная формула с произвольно заданным числом узлов интерполяции для функции $u(x)$, представимой в виде суммы регулярной и погранслойной составляющих. Погранслойная составляющая отвечает за большие градиенты функции и известна с точностью до множителя. Такая декомпозиция решения сингулярно возмущенной краевой задачи применялась в работах [3; 4] для построения разностной схемы на основе подгонки

[1]Работа выполнена в рамках государственного задания ИМ СО РАН (проект FWNF-2022-0016).

к погранслойной составляющей. Доказано, что тогда оценка погрешности разностной схемы становится равномерной по малому параметру. Построенная в [2] интерполяционная формула является точной на погранслойной составляющей. Равномерная по погранслойной составляющей оценка погрешности этой интерполяционной формулы выведена в [5].

В [2] на основе дифференцирования построенного интерполянта получены новые формулы численного дифференцирования, точные на погранслойной составляющей функции. Однако погрешность построенных формул в [2] не оценена. В [6] рассмотрен случай, когда формула из [2] содержит k узлов в сеточном шаблоне для производной. В случае $n = k - 1$ и экспоненциального пограничного слоя дана оценка погрешности, равномерная по параметру ε, где n — порядок вычисляемой производной.

Отметим, что добиться равномерной по малому параметру ε оценки погрешности классических формул численного дифференцирования при наличии пограничного слоя можно сгущением сетки в области больших градиентов. В [7] это обосновано в случае сетки Шишкина [8], в [9] применена сетка Бахвалова [10] с модификацией из [11].

В данной работе при оценке погрешности формул численного дифференцирования на равномерной сетке, построенных в [2], рассмотрим случай, когда погранслойная составляющая $\Phi(x)$ является функцией общего вида. В частности, такая составляющая может соответствовать наличию экспоненциального [8] или степенного пограничного слоя [12].

Под C и C_j будем подразумевать положительные постоянные, не зависящие от функций $p(x)$, $\Phi(x)$, от их производных и от шага сетки h. В случае экспоненциального погранслоя эти постоянные не зависят от малого параметра ε. Различные величины будем ограничивать одной постоянной C_j, если это понятно по тексту. Будем подразумевать, что $f = O(g)$, если для некоторой постоянной C $|f| \le C|g|$; $f = O^*(g)$, если $f = O(g)$ и $g = O(f)$. Будем использовать постоянные D_k такие, что для некоторой постоянной C_1 выполнено ограничение $D_k \ge C_1 > 0$.

1. Постановка задачи

Пусть для достаточно гладкой функции $u(x)$ справедлива декомпозиция

$$u(x) = p(x) + \gamma\Phi(x), \quad x \in [0, 1], \tag{1.1}$$

где $p(x)$ — регулярная составляющая с ограниченными производными до некоторого порядка, $\Phi(x)$ — погранслойная составляющая, являющаяся функцией общего вида и отвечающая за большие градиенты функции $u(x)$. Функция $\Phi(x)$ предполагается известной, $p(x)$ и γ не заданы, $C_1 \le |\gamma| \le C_2$ для некоторых постоянных C_1, C_2.

В частности, рассмотрим случай экспоненциального пограничного слоя, когда функция $u(x)$ является решением сингулярно возмущенной краевой задачи [8]:

$$\varepsilon u''(x) + a_1(x)u'(x) - a_2(x)u(x) = f(x), \quad u(0) = A, \quad u(1) = B, \tag{1.2}$$

где $a_1(x) \ge \beta_0 > 0$, $a_2(x) \ge 0$, $\varepsilon \in (0, 1]$, функции a_1, a_2, f достаточно гладкие.

Согласно [4] для решения задачи (1.2) справедлива декомпозиция (1.1), для которой

$$\Phi(x) = e^{-\alpha x/\varepsilon}, \quad \alpha = a_1(0) > 0. \tag{1.3}$$

При наличии степенного пограничного слоя [12] декомпозиция (1.1) справедлива при задании

$$\Phi(x) = (x + \varepsilon)^{\beta}, \quad 0 < \beta < 1, \quad 0 < \varepsilon \le 1. \tag{1.4}$$

Зададим равномерную сетку интервала $[0, 1]$: $\Omega^h = \{x_j : x_j = jh, j = 0, 1, \ldots, N,\ Nh{=}1\}$. Предполагаем, что функция $u(x)$, обладающая декомпозицией (1.1), задана в узлах сетки Ω^h, $u_j = u(x_j)$. Рассмотрим вопрос численного дифференцирования функции $u(x)$ на произвольном интервале $[x_m, x_{m+k-1}]$ с k узлами в шаблоне для производной. Пусть $L_k(u, x)$ —

многочлен Лагранжа для функции $u(x)$ с k узлами интерполяции $x_m, \dots, x_{m+k-1}$. Классические формулы численного дифференцирования строятся на основе формулы [1]:

$$u^{(n)}(x) \approx L_k^{(n)}(u, x), \quad x \in [x_m, x_{m+k-1}]. \tag{1.5}$$

В соответствии с [13] справедлива оценка погрешности

$$|L_k^{(n)}(u, x) - u^{(n)}(x)| \le M_k (k-1)^{k-n} h^{k-n}/(k-n)!, \tag{1.6}$$

где $M_k = \max\limits_s |u^{(k)}(s)|,\ x, s \in [x_m, x_{m+k-1}]$.

Из (1.6) следует, что погрешность вычисления производных на основе формулы (1.5) является величиной порядка $O(h^{k-n})$, если постоянная M_k равномерно ограничена. Однако в случае экспоненциального пограничного слоя в соответствии с (1.3) $M_k = O^*(\varepsilon^{-k})$, значит, при малых значениях ε погрешность может быть существенной.

Покажем это на примере. Пусть $u(x) = e^{-x/\varepsilon}, x \in [0, 1]$. Выпишем формулу для производной:

$$u'(x) \approx L_2'(u, x) = \frac{u_{m+1} - u_m}{h}, \quad x \in [x_m, x_{m+1}]. \tag{1.7}$$

В данном случае производная $u'(x)$ в области пограничного слоя — порядка $O(1/\varepsilon)$, поэтому в соответствии, например, с [7; 14; 15] оценивается относительная погрешность при вычислении первой производной, получаемая умножением абсолютной погрешности на малый параметр ε. В случае формулы (1.7) на равномерной сетке при $\varepsilon = h$ имеем

$$\varepsilon \Big| \frac{u_1 - u_0}{h} - u'(0) \Big| = e^{-1}.$$

Таким образом, относительная погрешность формулы (1.7) значительна, если $\varepsilon = h$, несмотря на малость h. Задача построения формул численного дифференцирования для функций, имеющих представление (1.1), актуальна.

Предложенную в [2] интерполяционную формулу с k узлами интерполяции можно записать как

$$L_{\Phi,k}(u, x) = L_k(u, x) + \frac{[x_m, \dots, x_{m+k-1}]u}{[x_m, \dots, x_{m+k-1}]\Phi} \big[\Phi(x) - L_k(\Phi, x)\big], \quad x \in [x_m, x_{m+k-1}], \tag{1.8}$$

где $[x_m, \dots, x_{m+k-1}]u$ — разделенная разность [1] для функции $u(x)$, $k \ge 2$. Из (1.8) следует, что эта формула имеет узлы интерполяции $x_m, x_{m+1}, \dots, x_{m+k-1}$ и является точной на многочленах степени $(k-2)$ и на функции $\Phi(x)$.

Для корректного задания (1.8) зададим ограничение $\Phi^{(k-1)}(x) \ne 0,\ x \in (x_m,\ x_{m+k-1})$. Дифференцируя (1.8), получаем формулу численного дифференцирования, точную на погранслойной составляющей $\Phi(x)$. Эту формулу можно записать в виде

$$u^{(n)}(x) \approx L_{\Phi,k}^{(n)}(u, x) = L_k^{(n)}(u, x) + \frac{\Delta^{k-1} u_m}{\Delta^{k-1}\Phi_m} \big[\Phi^{(n)}(x) - L_k^{(n)}(\Phi, x)\big], \tag{1.9}$$

где $x \in [x_m, x_{m+k-1}],\ n < k,\ \ \Delta^{k-1} u_m$ — конечная разность для $u(x)$ [1], определяемая соотношениями $\Delta u_m = u_{m+1} - u_m, \Delta^j u_m = \Delta(\Delta^{j-1} u_m)$.

Если $n = k - 1$, то формула (1.9) принимает вид (см. [6])

$$u^{(n)}(x) \approx L_{\Phi,k}^{(n)}(u, x) = \frac{\Delta^n u_m}{\Delta^n \Phi_m} \Phi^{(n)}(x), \quad x \in [x_m, x_{m+n}]. \tag{1.10}$$

В [6] доказано, что в случае экспоненциального пограничного слоя, когда $\Phi(x)$ соответствует (1.3), при всех $n > 0$ и m справедлива следующая оценка погрешности:

$$\varepsilon^n \Big| \frac{\Delta^n u_m}{\Delta^n \Phi_m} \Phi^{(n)}(x) - u^{(n)}(x) \Big| \le Ch, \quad x \in [x_m, x_{m+n}].$$

В данной работе предложим подход к оценке погрешности формулы (1.9) в случае, когда погранслойная составляющая $\Phi(x)$ является функцией общего вида. На основе этого оценим погрешность формулы (1.9) при $k = 2$ и $k = 3$.

2. Сравнение погрешностей предлагаемой формулы и классической

Предполагаем, что для функции $u(x)$ справедлива декомпозиция (1.1). Проведем сравнение классической формулы численного дифференцирования (1.5) и построенной формулы (1.9).

Остановимся на формуле (1.5). В соответствии с оценкой (1.6) и примером (1.7) погрешность формулы (1.5) может быть значительной, если функция $\Phi(x)$ имеет большие градиенты.

В случае функции $u(x)$ с декомпозицией (1.1) погрешность формулы (1.5) можно записать как

$$L_k^{(n)}(u,x) - u^{(n)}(x) = \big(L_k^{(n)}(p,x) - p^{(n)}(x)\big) + \gamma\big(L_k^{(n)}(\Phi,x) - \Phi^{(n)}(x)\big).$$

Теперь рассмотрим формулу (1.9) для вычисления производной. Несложно показать, что погрешность формулы (1.9) представима в виде

$$L_{\Phi,k}^{(n)}(u,x) - u^{(n)}(x) = \big(L_k^{(n)}(p,x) - p^{(n)}(x)\big) - \frac{\Delta^{k-1}p_m}{\Delta^{k-1}\Phi_m}\big(L_k^{(n)}(\Phi,x) - \Phi^{(n)}(x)\big).$$

В соответствии с декомпозицией (1.1) и оценкой (1.6) основной вклад в погрешность исследуемых формул вносит погрешность $(L_k^{(n)}(\Phi,x) - \Phi^{(n)}(x))$, если функция $\Phi(x)$ имеет большие градиенты на интервале $[x_m, x_{m+k-1}]$. В этом случае $\left|\dfrac{\Delta^{k-1}p_m}{\Delta^{k-1}\Phi_m}\right| \ll |\gamma| = O(1)$, так как для некоторых $s, s_1 \in [x_m, x_{m+k-1}]$ справедливы соотношения (см. [1, гл. 2])

$$\Delta^{k-1}\Phi_m = h^{k-1}\Phi^{(k-1)}(s), \quad \Delta^{k-1}p_m = h^{k-1}p^{(k-1)}(s_1).$$

Например, в области экспоненциального пограничного слоя, когда $\Phi(x)$ соответствует (1.3), имеем $|\Delta^{k-1}\Phi_m| = O(h/\varepsilon)^{k-1}$, $|\Delta^{k-1}p_m| = O(h^{k-1})$, $\varepsilon \ll 1$.

Получаем, что независимо от k и n формула (1.9) является более точной в сравнении с классической формулой (1.5), если функция $\Phi(x)$ имеет большие градиенты на интервале $[x_m, x_{m+k-1}]$, на котором применяется формула.

3. Оценка погрешности формулы для производной

Лемма 1. *Пусть для функции $u(x)$ справедлива декомпозиция* (1.1), *величина D_k задана так, что для некоторой постоянной C_1 выполняется $D_k \geq C_1 > 0$ и для некоторой постоянной C_2 верна оценка*

$$G = \frac{h^{n-1}}{D_k}\frac{\big|L_k^{(n)}(\Phi,x) - \Phi^{(n)}(x)\big|}{|\Delta^{k-1}\Phi_m|} \leq C_2, \quad x \in [x_m, x_{m+k-1}]. \tag{3.1}$$

Тогда для некоторой постоянной C справедлива следующая оценка погрешности:

$$\frac{1}{D_k}\big|L_{\Phi,k}^{(n)}(u,x) - u^{(n)}(x)\big| \leq C\big[\max_s |p^{(k)}(s)| + \max_s |p^{(k-1)}(s)|\big]h^{k-n}, \quad x, s \in [x_m, x_{m+k-1}]. \tag{3.2}$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Формула (1.9) является точной на $\Phi(x)$, поэтому

$$\begin{aligned} \big|L_{\Phi,k}^{(n)}(u,x) - u^{(n)}(x)\big| &= \big|L_{\Phi,k}^{(n)}(p,x) - p^{(n)}(x)\big| \leq \big|L_k^{(n)}(p,x) - p^{(n)}(x)\big| \\ &+ \Big|\frac{\Delta^{k-1}p_m}{\Delta^{k-1}\Phi_m}\big(\Phi^{(n)}(x) - L_k^{(n)}(\Phi,x)\big)\Big|, \quad x \in [x_m, x_{m+k-1}]. \end{aligned} \tag{3.3}$$

Учитывая (3.1) в (3.3), получаем

$$\frac{1}{D_k}\big|L_{\Phi,k}^{(n)}(u,x) - u^{(n)}(x)\big| \leq \frac{1}{D_k}\big|L_k^{(n)}(p,x) - p^{(n)}(x)\big| + C_2\frac{|\Delta^{k-1}p_m|}{h^{n-1}}, \quad x \in [x_m, x_{m+k-1}]. \tag{3.4}$$

В соответствии с [1] для некоторого $s \in [x_m, x_{m+k-1}]$ имеем $\Delta^{k-1} p_m / h^{k-1} = p^{(k-1)}(s)$. Ввиду этого соотношения и (1.6) для некоторой постоянной C_0 получаем

$$\left|L_k^{(n)}(p,x) - p^{(n)}(x)\right| \le C_0 \max_s |p^{(k)}(s)| h^{k-n}, \quad |\Delta^{k-1} p_m| \le \max_s |p^{(k-1)}(s)| h^{k-1}. \tag{3.5}$$

Учитывая (3.5) в (3.4), приходим к требуемой оценке (3.2).

Лемма доказана.

Рассмотрим регулярный случай, когда производные функции $u(x)$ являются равномерно ограниченными. Тогда для выполнения условия (3.1) можно задать $D_k = 1$. В силу леммы 1 справедлива оценка (3.2), из которой следует, что порядок точности формулы (1.9) такой же, как при применении классической формулы (1.5). Как было показано выше, при наличии больших градиентов у функции $\Phi(x)$ формула (1.9) является более точной.

4. Применение леммы 1 для оценки погрешности

С применением леммы 1 оценим погрешность формулы (1.9) в случаях $k = 2,\ k = 3$.

4.1. Формула (1.9) в случае $k = 2,\ n = 1$

В соответствии с (1.10) при $k = 2,\ n = 1$ формула (1.9) может быть записана как

$$u'(x) \approx L'_{\Phi,2}(u,x) = \frac{u_{m+1} - u_m}{\Phi_{m+1} - \Phi_m} \Phi'(x), \quad x \in [x_m, x_{m+1}]. \tag{4.1}$$

Теорема 1. *Пусть для достаточно гладкой функции* $u(x)$ *справедлива декомпозиция* (1.1), *выполнено условие*

$$\Phi'(x) \ne 0, \quad x \in (x_m, x_{m+1}), \tag{4.2}$$

и для некоторой постоянной D_2 *верна оценка*

$$|\Phi''(x)| \le D_2 |\Phi'(x)|, \quad x \in [x_m, x_{m+1}]. \tag{4.3}$$

Тогда для формулы (4.1) *для некоторой постоянной* C *справедлива оценка*

$$\frac{1}{D_2}\left|\frac{u_{m+1} - u_m}{\Phi_{m+1} - \Phi_m} \Phi'(x) - u'(x)\right| \le C\big[\max_s |p''(s)| + \max_s |p'(s)|\big] h, \quad x \in [x_m, x_{m+1}]. \tag{4.4}$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Воспользуемся леммой 1 и остановимся на выполнении условия (3.1) в случае $k = 2, n = 1$. Из разложения в ряд Тейлора следует

$$\left|\frac{\Phi_{m+1} - \Phi_m}{h} - \Phi'(x)\right| \le \int\limits_{x_m}^{x_{m+1}} |\Phi''(s)|\, ds, \quad x \in [x_m, x_{m+1}].$$

Тогда из (3.1) имеем

$$G \le \frac{1}{D_2} \int\limits_{x_m}^{x_{m+1}} \frac{|\Phi''(s)|\, ds}{|\Phi_{m+1} - \Phi_m|}. \tag{4.5}$$

Учитывая (4.2), неравенство (4.5) представим в виде $G \le \dfrac{1}{D_2} \displaystyle\int_{x_m}^{x_{m+1}} |\Phi''(s)|\, ds \Big/ \int_{x_m}^{x_{m+1}} |\Phi'(s)|\, ds$. Исходя из (4.3), получаем, что $G \le 1$.

Итак, условие (3.1) выполнено при задании $C_2 = 1$. В соответствии с леммой 1 справедлива оценка (3.2), которая в случае $k = 2, n = 1$ соответствует оценке (4.4).

Теорема доказана.

Остановимся на примерах задания $\Phi(x)$.

В случае экспоненциального пограничного слоя в соответствии с (1.3) $\Phi(x) = e^{-\alpha x/\varepsilon}$. Тогда условие (4.2) выполнено, условие (4.3) выполнено при задании $D_2 = \alpha/\varepsilon$.

В случае степенного пограничного слоя согласно (1.4) $\Phi(x) = (x+\varepsilon)^\beta$. Условие (4.2) выполнено, условие (4.3) выполнено при задании $D_2 = (1-\beta)/\varepsilon$.

В обоих случаях оценка (4.4) принимает вид

$$\varepsilon\Big|\frac{u_{m+1}-u_m}{\Phi_{m+1}-\Phi_m}\Phi'(x) - u'(x)\Big| \le C\big[\max_s |p''(s)| + \max_s |p'(s)|\big]h, \quad x \in [x_m, x_{m+1}].$$

4.2. Формула (1.9) в случае $k=3,\ n=1$

При задании $k=3,\ n=1$ формула (1.9) принимает вид

$$u'(x) \approx L'_{\Phi,3}(u,x) = L'_3(u,x) + \frac{u_{m+2}-2u_{m+1}+u_m}{\Phi_{m+2}-2\Phi_{m+1}+\Phi_m}(\Phi'(x) - L'_3(\Phi,x)), \tag{4.6}$$

где $x \in [x_m, x_{m+2}]$,

$$L'_3(\Phi,x) = \frac{2x-x_{m+1}-x_{m+2}}{2h^2}\Phi_m - \frac{2x-x_m-x_{m+2}}{h^2}\Phi_{m+1} + \frac{2x-x_{m+1}-x_m}{2h^2}\Phi_{m+2}. \tag{4.7}$$

Теорема 2. *Пусть для достаточно гладкой функции* $u(x)$ *справедлива декомпозиция* (1.1), $\Phi''(x) \ne 0$ *при* $x \in (x_m, x_{m+2})$ *и выполняется оценка*

$$|\Phi^{(3)}(x)| \le D_3|\Phi^{(2)}(x)|, \quad x \in [x_m, x_{m+2}]. \tag{4.8}$$

Тогда для формулы (4.6) *для некоторой постоянной* C *верна оценка*

$$\frac{1}{D_3}\big|L'_{\Phi,3}(u,x) - u'(x)\big| \le C\big[\max_s |p^{(3)}(s)| + \max_s |p^{(2)}(s)|\big]h^2, \quad x,s \in [x_m, x_{m+2}]. \tag{4.9}$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Остановимся на выполнении условия (3.1). Для этого представим погрешность $|L'_3(\Phi,x) - \Phi'(x)|$ в интегральном виде.

Сначала получим выражение для $L'_3(\Phi,x)$ из (4.7), используя разложение $\Phi(x_m)$, $\Phi(x_{m+2})$ в ряд Тейлора около узла x_{m+1}, применяя формулу

$$\Phi(\eta) = \Phi(x_{m+1}) + (\eta - x_{m+1})\Phi'(x_{m+1}) + \frac{(\eta-x_{m+1})^2}{2}\Phi''(x_{m+1}) + \frac{1}{2}\int\limits_{x_{m+1}}^{\eta}(\eta-s)^2\Phi^{(3)}(s)\,ds$$

при задании $\eta = x_m$ и $\eta = x_{m+2}$.

Аналогично заменим $\Phi'(x)$ на основе формулы

$$\Phi'(x) = \Phi'_{m+1} + (x-x_{m+1})\Phi''_{m+1} + \int\limits_{x_{m+1}}^{x}(x-s)\Phi^{(3)}(s)\,ds.$$

Приводя подобные, в итоге получаем

$$\begin{aligned} L'_3(\Phi,x) - \Phi'(x) &= \frac{2x-x_{m+1}-x_{m+2}}{4h^2}\int\limits_{x_{m+1}}^{x_m}(x_m-s)^2\Phi^{(3)}(s)\,ds \\ &+ \frac{2x-x_{m+1}-x_m}{4h^2}\int\limits_{x_{m+1}}^{x_{m+2}}(x_{m+2}-s)^2\Phi^{(3)}(s)\,ds - \int\limits_{x_{m+1}}^{x}(x-s)\Phi^{(3)}(s)\,ds. \end{aligned} \tag{4.10}$$

Из (4.10) следует

$$
\begin{gathered}
\Big|L_3'(\Phi,x)-\Phi'(x)\Big| \le \frac{1}{4}\int\limits_{x_m}^{x_{m+1}}(s-x_m)|\Phi^{(3)}(s)|\,ds \\
+\frac{1}{4}\int\limits_{x_{m+1}}^{x_{m+2}}(x_{m+2}-s)|\Phi^{(3)}(s)|\,ds+\Big|\int\limits_{x_{m+1}}^{x}(x-s)\Phi^{(3)}(s)\,ds\Big|.
\end{gathered}
\tag{4.11}
$$

Из (4.11) вытекает

$$
\Big|L_3'(\Phi,x)-\Phi'(x)\Big| < \frac{5}{4}\int\limits_{x_m}^{x_{m+1}}(s-x_m)|\Phi^{(3)}(s)|\,ds+\frac{5}{4}\int\limits_{x_{m+1}}^{x_{m+2}}(x_{m+2}-s)|\Phi^{(3)}(s)|\,ds. \tag{4.12}
$$

Раскладывая $\Phi(x_{m+2}), \Phi(x_m)$ в ряд Тейлора около узла x_{m+1}, имеем

$$
\Delta^2\Phi_m=\Phi_{m+2}-2\Phi_{m+1}+\Phi_m=\int\limits_{x_m}^{x_{m+1}}(s-x_m)\Phi''(s)\,ds+\int\limits_{x_{m+1}}^{x_{m+2}}(x_{m+2}-s)\Phi''(s)\,ds. \tag{4.13}
$$

Учитывая соотношения (4.12), (4.13), (4.8), условие $\Phi''(s)\neq 0$ при $s\in(x_m,x_{m+2})$, получаем, что в случае $n=1, k=3$ оценка (3.1) справедлива при задании $C_2=5/4$.

Тогда в соответствии с леммой 1 справедлива оценка погрешности (3.2), откуда в рассматриваемом случае следует оценка (4.9).

Теорема доказана.

Остановимся на случае экспоненциального пограничного слоя, когда $\Phi(x)$ соответствует (1.3). Тогда условие (4.8) выполнено при задании $D_3=\alpha/\varepsilon$. При таком задании D_3 формула (4.9) переходит в оценку относительной погрешности.

4.3. Формула (1.9) в случае $k=3,\ n=2$

В соответствии с (1.10) в данном случае имеем

$$
u''(x)\approx L''_{\Phi,3}(u,x)=\frac{u_m-2u_{m+1}+u_{m+2}}{\Phi_m-2\Phi_{m+1}+\Phi_{m+2}}\Phi''(x),\quad x\in[x_m,x_{m+2}]. \tag{4.14}
$$

Теорема 3. *Пусть для достаточно гладкой функции* $u(x)$ *справедлива декомпозиция* (1.1), *выполнены условия*

$$
\Phi'(x)\neq 0,\quad \Phi''(x)\neq 0,\quad x\in(x_m,x_{m+2}), \tag{4.15}
$$

и справедливы ограничения

$$
|\Phi''(x)|\le D_2|\Phi'(x)|,\quad |\Phi^{(3)}(x)|\le D_3|\Phi''(x)|,\quad x\in[x_m,x_{m+2}]. \tag{4.16}
$$

Тогда для формулы (4.14) *для некоторой постоянной* C *верна оценка*

$$
\frac{1}{D_3D_2}\big|L''_{\Phi,3}(u,x)-u''(x)\big|\le C\big[\max_s|p^{(3)}(s)|+\max_s|p^{(2)}(s)|\big]h,\quad x,s\in[x_m,x_{m+2}]. \tag{4.17}
$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Остановимся на выполнении условия (3.1). Дифференцируя (4.10), получаем

$$
\begin{gathered}
L_3''(\Phi,x)-\Phi''(x)=\frac{1}{2h^2}\int\limits_{x_{m+1}}^{x_m}(x_m-s)^2\Phi^{(3)}(s)\,ds \\
+\frac{1}{2h^2}\int\limits_{x_{m+1}}^{x_{m+2}}(x_{m+2}-s)^2\Phi^{(3)}(s)\,ds-\frac{d}{dx}\int\limits_{x_{m+1}}^{x}(x-s)\Phi^{(3)}(s)\,ds.
\end{gathered}
\tag{4.18}
$$

Применяя для последнего интеграла в (4.18) формулу интегрирования по частям и дифференцируя, имеем

$$L_3''(\Phi,x)-\Phi''(x)=\frac{1}{2h^2}\int\limits_{x_{m+1}}^{x_m}(s-x_m)^2\Phi^{(3)}(s)\,ds+\frac{1}{2h^2}\int\limits_{x_{m+1}}^{x_{m+2}}(x_{m+2}-s)^2\Phi^{(3)}(s)\,ds-\int\limits_{x_{m+1}}^{x}\Phi^{(3)}(s)\,ds.$$

Делим это равенство на D_3, опираясь на (4.16), тогда получаем

$$\frac{1}{D_3}\Big|L_3''(\Phi,x)-\Phi''(x)\Big|\le\frac{1}{2h^2}\int\limits_{x_m}^{x_{m+1}}(s-x_m)^2|\Phi''(s)|\,ds$$
$$+\frac{1}{2h^2}\int\limits_{x_{m+1}}^{x_{m+2}}(x_{m+2}-s)^2|\Phi''(s)|\,ds+\Big|\int\limits_{x_{m+1}}^{x}|\Phi''(s)|\,ds\Big|,\quad x\in[x_m,x_{m+2}]. \tag{4.19}$$

Остановимся на случае, когда в (4.19) $x\in[x_m,x_{m+1}]$, случай $x\in[x_{m+1},x_{m+2}]$ рассматривается аналогично.

Учитывая (4.19), (4.13) в (3.1), при $k=3,\ n=2$ приходим к оценке

$$\frac{h}{D_3}\frac{\big|L_3''(\Phi,x)-\Phi''(x)\big|}{|\Delta^2\Phi_m|}\le\frac{1}{2}+\frac{h\int_{x_m}^{x_{m+1}}|\Phi''(s)|\,ds}{|\Phi_m-2\Phi_{m+1}+\Phi_{m+2}|},\quad x\in[x_m,x_{m+1}]. \tag{4.20}$$

Исходя из первой оценки в (4.16), из (4.20) имеем

$$G=\frac{h}{D_3D_2}\frac{\big|L_3''(\Phi,x)-\Phi''(x)\big|}{|\Delta^2\Phi_m|}\le\frac{1}{2D_2}+\frac{h|\Phi_{m+1}-\Phi_m|}{|\Phi_m-2\Phi_{m+1}+\Phi_{m+2}|}. \tag{4.21}$$

Согласно (4.15) получаем, что для некоторой постоянной C_3 справедлива оценка

$$\frac{h|\Phi_{m+1}-\Phi_m|}{|\Phi_m-2\Phi_{m+1}+\Phi_{m+2}|}\le C_3.$$

В силу условия $D_2\ge C_1>0$ приходим к заключению, что в (4.21) $G\le C_2$ при задании $C_2=1/(2C_1)+C_3$.

Итак, условие (3.1) в данном случае выполнено. Применяя лемму 1, для некоторой постоянной C получаем оценку (4.17).

Теорема доказана.

Рассмотрим случай экспоненциального пограничного слоя, когда $\Phi(x)$ соответствует (1.3). Тогда $1/(D_3D_2)=\varepsilon^2/\alpha^2$ и (4.17) является оценкой относительной погрешности.

5. Результаты численных экспериментов

На интервале $[0,1]$ зададим функцию

$$u(x)=\cos(\pi x)+e^{-x/\varepsilon},\quad x\in[0,1],\quad \varepsilon\in(0,1].$$

Такая функция соответствует (1.1) при задании $\Phi(x)=e^{-x/\varepsilon}$.

Приведем результаты численных экспериментов в случаях классической формулы (1.5) и формулы (1.9), точной на погранслойной составляющей, при $k=3,\ n=2$. В табл. 1, 2 $ae-j$ обозначает $a\times10^{-j}$. Классическая формула имеет вид

$$u''(x)\approx L_3''(u,x)=\frac{u_m-2u_{m+1}+u_{m+2}}{h^2},\quad x\in[x_m,x_{m+2}]. \tag{5.1}$$

Т а б л и ц а 1

Погрешность классической формулы (5.1)

ε	N					
	32	64	128	256	512	1024
1	$4.90e-1$	$2.41e-1$	$1.20e-1$	$5.96e-2$	$2.97e-2$	$1.49e-2$
16^{-1}	$2.26e-1$	$1.19e-1$	$6.10e-2$	$3.09e-2$	$1.55e-2$	$7.79e-3$
32^{-1}	$4.00e-1$	$2.23e-1$	$1.18e-1$	$6.07e-2$	$3.08e-2$	$1.55e-2$
64^{-1}	$6.35e-1$	$3.95e-1$	$2.22e-1$	$1.18e-1$	$6.06e-2$	$3.08e-2$
128^{-1}	$8.61e-1$	$6.30e-1$	$3.93e-1$	$2.21e-1$	$1.17e-1$	$6.06e-2$
256^{-1}	$9.77e-1$	$8.57e-1$	$6.27e-1$	$3.91e-1$	$2.21e-1$	$1.17e-1$
512^{-1}	$1.00e+0$	$9.77e-1$	$8.55e-1$	$6.26e-1$	$3.91e-1$	$2.20e-1$

Т а б л и ц а 2

Погрешность предложенной формулы (4.14)

ε	N					
	32	64	128	256	512	1024
1	$5.29e-1$	$2.59e-1$	$1.28e-1$	$6.39e-2$	$3.19e-2$	$1.59e-2$
16^{-1}	$1.15e-2$	$5.30e-3$	$2.55e-3$	$1.25e-3$	$6.20e-4$	$3.08e-4$
32^{-1}	$6.45e-3$	$2.78e-3$	$1.30e-3$	$6.26e-4$	$3.08e-4$	$1.53e-4$
64^{-1}	$4.21e-3$	$1.58e-3$	$6.87e-4$	$3.22e-4$	$1.56e-4$	$7.66e-5$
128^{-1}	$3.74e-3$	$1.03e-3$	$3.90e-4$	$1.71e-4$	$8.02e-5$	$3.88e-5$
256^{-1}	$6.48e-3$	$9.04e-4$	$2.54e-4$	$9.69e-5$	$4.26e-5$	$2.00e-5$
512^{-1}	$4.11e-2$	$1.53e-3$	$2.22e-4$	$6.30e-5$	$2.42e-5$	$1.06e-5$

В табл. 1 приведена погрешность $\Delta_{\varepsilon,N}$ при вычислении по формуле (5.1), где

$$\Delta_{\varepsilon,N} = \varepsilon^2 \max_m \max_i |L_3''(u, \tilde{x}_{i,m}) - u''(\tilde{x}_{i,m})|,$$

$\tilde{x}_{i,m}$ — узлы интервала $[x_m, x_{m+2}]$ сгущенной в четыре раза сетки. Согласно результатам вычислений погрешность не уменьшается с увеличением числа узлов N, если $\varepsilon = 1/N$. Результаты вычислений подтверждают, что применение формулы (5.1) может приводить к существенным погрешностям, если функция $u(x)$ имеет большие градиенты.

В табл. 2 аналогичным образом приведена погрешность $\Delta_{\varepsilon,N}$ при вычислении по формуле (4.14), точной на погранслойной составляющей, где

$$\Delta_{\varepsilon,N} = \varepsilon^2 \max_m \max_i |L_{\Phi,3}''(u, \tilde{x}_{i,m}) - u''(\tilde{x}_{i,m})|.$$

Как показывают приведенные в табл. 2 погрешности, порядок точности формулы (4.14) близок к первому, что соответствует оценке погрешности (4.17) в случае экспоненциального пограничного слоя, когда $1/(D_3 D_2) = \varepsilon^2/\alpha^2$.

Были проведены вычислительные эксперименты и при других значениях k, n. Полученные численные результаты согласуются с полученными оценками погрешностей.

Заключение

Рассмотрен вопрос численного дифференцирования функций с большими градиентами на равномерной сетке. Предполагается, что для исходной функции одной переменной справедлива декомпозиция в виде суммы регулярной и погранслойной составляющих. Погранслойная

составляющая отвечает за большие градиенты функции и задается как функция общего вида, известная с точностью до множителя. Такая декомпозиция справедлива для решения сингулярно возмущенной задачи. Предложен подход к оцениванию погрешности формул численного дифференцирования. Получены оценки погрешности построенных формул при вычислении первой и второй производных. Приведены результаты численных экспериментов, согласующиеся с полученными оценками погрешности. Показано преимущество формул численного дифференцирования, точных на погранслойной составляющей функции, в сравнении с классическими формулами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М.** Численные методы. М.: Наука, 1987. 598 с.
2. **Zadorin A.I., Zadorin N.A.** Interpolation formula for functions with a boundary layer component and its application to derivatives calculation // Sib. Electron. Math. Rep. 2012. Vol. 9. P. 445–455.
3. **Ильин А.М.** Разностная схема для дифференциального уравнения с малым параметром при старшей производной // Мат. заметки. 1969. Т. 6, №2. С. 237–248.
4. **Kellogg R.B., Tsan A.** Analysis of some difference approximations for a singular perturbation problems without turning points // Math. Comput. 1978. Vol. 32. P. 1025–1039. doi: 10.1090/S0025-5718-1978-0483484-9
5. **Задорин А.И., Задорин Н.А.** Неполиномиальная интерполяция функций с большими градиентами и ее применение // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2021. Т. 61, № 2. С. 179–188. doi: 10.31857/S0044466921020150
6. **Задорин А.И.** Формулы численного дифференцирования функций с большими градиентами // Сиб. журн. вычисл. математики. 2023. Т. 26, № 1. С. 17–26. doi: 10.15372/SJNM20230102
7. **Задорин А.И.** Анализ формул численного дифференцирования на сетке Шишкина при наличии пограничного слоя // Сиб. журн. вычисл. математики. 2018. Т. 21, № 3. С. 243–254. doi: 10.15372/SJNM20180301
8. **Шишкин Г.И.** Сеточные аппроксимации сингулярно возмущенных эллиптических и параболических уравнений. Екатеринбург: Изд-во УрО РАН, 1992. 233 с.
9. **Задорин А.И.** Анализ формул численного дифференцирования на сетке Бахвалова при наличии пограничного слоя // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2023. Т. 63, № 2. С. 218–226. doi: 10.31857/S0044466923020163
10. **Бахвалов Н.С.** К оптимизации методов решения краевых задач при наличии пограничного слоя // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1969. Т. 9, № 4. С. 841–890.
11. **Roos H.G.** Layer-adapted meshes: milestones in 50 years of history. 2019. 16 p. Preprint arXiv:1909.08273 . URL: https://arxiv.org/abs/1909.08273 . doi: 10.48550/arXiv.1909.08273
12. **Vulanović R.** On a numerical solution of a power layer problem // Proc. III Conf. on Numerical Methods and Approximation Theory / ed. G.V. Milovanovoć. University of Niš, 1988. P. 423–431.
13. **Даутов Р.З., Тимербаев М.Р.** Численные методы. Приближение функций: уч. пос. Казань: Изд-во Казан. ун-та, 2021. 122 с.
14. **Kopteva N.V., Stynes M.** Approximation of derivatives in a convection-diffusion two-point boundary value problem // Appl. Numer. Math. 2001. Vol. 39. P. 47–60. doi: 10.1016/S0168-9274(01)00051-4
15. **Shishkin G.I.** Approximations of solutions and derivatives for a singularly perturbed elliptic convection-diffusion equations // Math. Proc. Royal Irish Acad. 2003. Vol. 103A, no. 4. P. 169–201. doi: 10.1353/mpr.2003.0010

Поступила 4.04.2024
После доработки 10.05.2024
Принята к публикации 13.05.2024

Задорин Александр Иванович
д-р физ.-мат. наук, профессор
главный науч. сотрудник
Институт математики имени С.Л. Соболева СО РАН
г. Новосибирск
e-mail: zadorin@ofim.oscsbras.ru

REFERENCES

1. Bakhvalov N.S., Zhidkov N.P., Kobel'kov G.M. *Chislennyye metody* [Numerical Methods]. Moscow, Nauka Publ., 1987, 598 p.
2. Zadorin A.I., Zadorin N.A. Interpolation formula for functions with a boundary layer component and its application to derivatives calculation. *Sib. Electron. Math. Rep.*, 2012, vol. 9, pp. 445–455.
3. Il'in A.M. Difference scheme for a differential equation with a small parameter affecting the highest derivative. *Math. Notes*, 1969, vol. 6, iss. 2, pp. 596–602. doi: 10.1007/BF01093706
4. Kellogg R.B., Tsan A. Analysis of some difference approximations for a singular perturbation problems without turning points. *Math. Comput.*, 1978, vol. 32, pp. 1025–1039. doi: 10.1090/S0025-5718-1978-0483484-9
5. Zadorin A.I., Zadorin N.A. Non-polynomial interpolation of functions with large gradients and its application. *Comput. Math. Math. Phys.*, 2021, vol. 61, no. 2, pp. 167–176. doi: 10.1134/S0965542521020147
6. Zadorin A.I. Formulas for numerical differentiation of functions with large gradients. *Numer. Anal. Appl.*, 2023, vol. 16, no. 1, pp. 14–21. doi: 10.1134/S1995423923010020
7. Zadorin A.I. Analysis of numerical differentiation formulas in a boundary layer on a Shishkin grid. *Numer. Anal. Appl.*, 2018, vol. 11, no. 3, pp. 193–203. doi: 10.1134/S1995423918030011
8. Shishkin G.I. *Setochnyye approksimatsii singulyarno vozmushchennykh ellipticheskikh i parabolicheskikh uravneniy* [Grid approximations of singularly perturbed elliptic and parabolic equations]. Yekaterinburg, UrO RAN Publ., 1992, 233 p. ISBN: 5-7691-0159-8 .
9. Zadorin A.I. Analysis of numerical differential formulas on a Bakhvalov mesh in the presence of a boundary layer. *Comput. Math. Math. Phys.*, 2023, vol. 63, no. 2, pp. 175–183. doi: 10.1134/S0965542523020148
10. Bakhvalov N.S. The optimization of methods of solving boundary value problems with a boundary layer. *USSR Comput. Math. Math. Phys.*, 1969, vol. 9, no. 4, pp. 139–166. doi: 10.1016/0041-5553(69)90038-X
11. Roos H.G. *Layer-adapted meshes: milestones in 50 years of history.* Preprint arXiv:1909.08273 , 2019, 16 p. Available at: https://arxiv.org/abs/1909.08273 . doi: 10.48550/arXiv.1909.08273
12. Vulanovic R. On numerical solution of a power layer problem. In: *Proc. III Conf. "Numerical methods and approximation theory"*, ed. G.V. Milovanovoć, University of Niš, 1988, pp. 423–431.
13. Dautov R.Z., Timerbaev M.R. *Chislennyye metody. Priblizheniye funktsiy: uchebnoye posobiye* [Numerical methods. Function approximation: tutorial]. Kazan, Kazan Univ. Publ., 2021, 123 p.
14. Kopteva N.V., Stynes M. Approximation of derivatives in a convection-diffusion two-point boundary value problem. *Appl. Numer. Math.*, 2001, vol. 39, pp. 47–60. doi: 10.1016/S0168-9274(01)00051-4
15. Shishkin G.I. Approximations of solutions and derivatives for a singularly perturbed elliptic convection-diffusion equations. *Math. Proc. Royal Irish Acad.*, 2003, vol. 103A, no. 4, pp. 169–201. doi: 10.1353/mpr.2003.0010

Received April 4, 2024
Revised May 10, 2024
Accepted May 13, 2024

Funding Agency: The work was supported under state contract IM SB RAS no. FWNF-2022-0016.

Aleksander Ivanovich Zadorin. Dr. Phys.-Math. Sci., Prof., Sobolev Institute of Mathematics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, 630090 Russia,
e-mail: zadorin@ofim.oscsbras.ru .

Cite this article as: A. I. Zadorin. Analysis of numerical differentiation formulas on a uniform grid in the presence of a boundary layer. *Trudy Instituta Matematiki i Mekhaniki UrO RAN*, 2024, vol. 30, no. 4, pp. 106–116 .