

Применяя методы регуляризации [4–6] можно получить оценку \hat{z} этого точного решения z и оценку погрешности. Однако известные методы регуляризации требуют задания некоторой дополнительной априорной информации о неизвестных $\Delta(n_i)$ и, возможно, об искомым z , c_j . Оценки, полученные такими методами, зависят от этой дополнительной информации, поэтому их вряд ли можно рассматривать как оценки погрешности.

Во избежание некорректности предлагается разделить задачу на две: задачу идентификации математической модели по результатам численного эксперимента и задачу тестирования с помощью известных частных решений или других методов.

Первая задача заключается не в определении теоретических значений z , c_j , а в разложении z_n на составляющие (компоненты) по известному заранее или определяемому экспериментально базису, т.е. просто в представлении зависимости z_n в виде (1). Хотя математическая запись такой задачи по форме совпадает с (2), однако при этом $\Delta(n)$ и все другие входящие в (1) компоненты приобретают совершенно другой смысл, поскольку заведомо известно, что в $\Delta(n)$ не входят компоненты $f_j(n)$, $j = 1, \dots, L$ и константа.

Эту задачу можно решить приближенно с помощью фильтрации, т.е. получить эталон \hat{z} и оценку погрешности $\overline{\Delta}$. При этом полученный интервал неопределенности $[\hat{z} - \overline{\Delta}, \hat{z} + \overline{\Delta}]$ может не содержать точного значения z , например, из-за ошибки в программе.

Вторая задача — тестирование заключается в сравнении с известным частным точным решением (проверке попадания его в полученный интервал) или с приближенным решением, полученным независимо другим численным методом (проверке факта пересечения интервалов неопределенности). Этот способ использования дополнительной информации не влияет на оценки, полученные ранее независимым способом, а только подтверждает их или опровергает.

В [7] получена теоретическая оценка достоверности (доверительной вероятности) совместного результата решения этих двух задач.

3. Численная фильтрация

Численной фильтрацией [1, 2] называется последовательное устранение (подавление) компонент погрешности, т.е. определение отфильтрованных последовательностей $z_{n_i}^{(j)}$, $j=1, \dots, L$ (j — порядковый номер фильтрации). Для равенств (2) фильтрация сводится к линейной комбинации $z_{n_i}^{(j)} = \alpha_j z_{n_i}^{(j-1)} + \beta_j z_{n_{i-1}}^{(j-1)}$, причем α_j и β_j определяются

из решения системы двух уравнений

$$\alpha_j + \beta_j = 1, \quad \alpha_j f_j(n_{i-1}) + \beta_j f_j(n_i) = 0.$$

Отсюда получаем формулу фильтрации

$$z_{n_i}^{(j)} = z_{n_i}^{(j-1)} + \frac{z_{n_i}^{(j-1)} - z_{n_{i-1}}^{(j-1)}}{R_j - 1}, \quad R_j = \frac{f_j(n_{i-1})}{f_j(n_i)},$$

$$c_m^{(j)} = (\alpha_j R_m + \beta_j) c_m^{(j-1)} = c_m^{(j-1)} \frac{R_j - R_m}{R_j - 1},$$

$$m = j + 1, \dots, L.$$

В результате фильтрации получается новая последовательность, не содержащая компоненты $f_j(n)$, которая при условии сохранения вида остальных компонент (точнее, первой из оставшихся) может быть подвергнута повторной фильтрации для подавления следующей компоненты. Для сохранения вида компонент достаточно выполнение условия $R_j = \text{const}$. Для $f_j(n) = \lambda_j^n$ (для действительного или комплексного λ_j) из этого условия следует $n_i - n_{i-1} = \alpha = \text{const}_1$, $R_j = \gamma_j^{-\alpha}$, при этом каждая из показательных составляющих представляет собой геометрическую прогрессию.

4. Правило выбора эталона

Для формализации процедуры выбора эталона предлагается двухэтапный метод оценки погрешности. Повторяя фильтрацию, каждый раз приходим к последовательности вида (2), каждый член которой содержит, по крайней мере, два неизвестных: искомое z и погрешность.

Во избежание неопределенности предлагается разделить этапы оценки погрешности и определения искомого z . Для этого на первом этапе проводится фильтрация по формуле

$$z_{n_{i-1}}^{(0)} = z_{n_{i-1}} - z_{n_i}, \quad (4)$$

исключающая из последовательности z_{n_i} неизвестное искомое z . Тем самым, дальнейшая фильтрация по формуле (3) служит оценкой погрешности, независимой от выбора эталона z . Такая оценка лишена указанного в [2] недостатка правила Рунге и Ромберга («кажущегося уточнения»), вызванного зависимостью оценки от конкретной закономерности изменения погрешности, и субъективности, связанной «экспертным» выбором эталона.

Отметим, что преобразование (4) изменяет компоненты зависимости (1)

$$z_{n_{i-1}}^{(0)} = \dots + [1 - R_j^{-1}] c_j^{(j-1)} f_j(n_{i-1}) + \dots, \quad (5)$$

однако при $|R_j| \gg 1$ это изменение незначительно. Именно этим объясняется «привязка» результата фильтрации (4) к $n = n_{i-1}$.

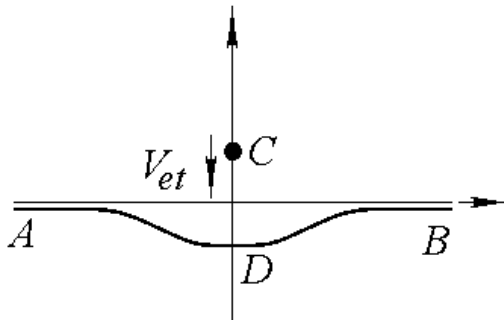


Рис. 1. Схема межэлектродного пространства

Полученная таким способом оценка позволяет выбрать наилучшие, с точки зрения минимума, погрешности (или комбинации близких по погрешности значений), соотношения n_i и $j = j_0$. Тем самым, мы приходим к задаче минимизации: при некотором постоянном $k = 0, 1, 2, \dots$ найти минимум $\bar{\Delta}$ по i и j при ограничениях

$$\begin{aligned} -\bar{\Delta} \leq z_{n_i}^{(j)} \leq \bar{\Delta}, \\ \dots \dots \dots \\ -\bar{\Delta} \leq z_{n_{i+k}}^{(j)} \leq \bar{\Delta}. \end{aligned} \quad (6)$$

Значения n_i и $j = j_0$, которые получаются при решении задачи минимизации, используются для определения значения $\hat{z} = z_{n_i}^{(j_0)}$ (эталона) путем фильтрации последовательности $z_{n_i}^{(0)} = z_{n_i}$ по формуле (3).

Тем самым, определена формальная процедура определения эталона $\hat{z} = z_{n_i}^{(j_0)}$. В совокупности с оценкой (6) определяется некоторое множество $[\hat{z} - \bar{\Delta}, \hat{z} + \bar{\Delta}]$ – интервал неопределенности.

Для определения других компонент зависимости (1) в [8] предложен метод идентификации, основанный на фильтрации, устраняющей из (1) константу и видоизменяющий (1) так, что на первом месте в разложении по очереди оказывается c_1 , c_2 и т.д. Тогда последовательное определение этих констант проводится рассмотренным выше двухэтапным методом фильтрации.

5. Применение методов фильтрации на примере задачи Хеле–Шоу

В работе [9] решена плоская нестационарная задача Хеле–Шоу применительно к электрохимической обработке точечным электродом-инструментом (ЭИ) C , движущимся со скоростью V_{et} к обрабатываемой поверхности ADB (см. рис. 1). Дальнейшее исследование было затруднено высоким уровнем нерегулярной погрешности. В данной работе были использованы те же самые ре-

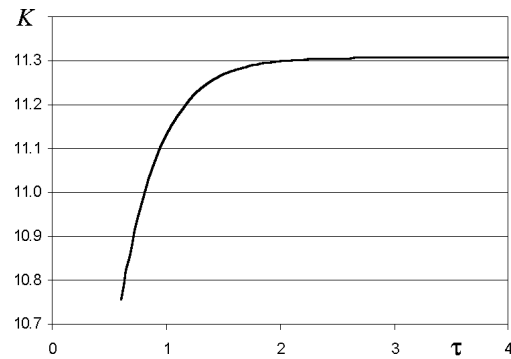


Рис. 2. Зависимость максимальной кривизны от времени

зультаты вычислений. Путем разработки усовершенствованных методов численной фильтрации результатов расчета удалось не только уточнить рассчитанные параметры, но также получить и оценить характеристики, которые ранее были недоступны из-за погрешности.

При решении нестационарной задачи Хеле–Шоу имеют место жесткие ограничения ресурсов, так как требуется многократное решение систем линейных алгебраических уравнений большой размерности. Исследование процесса установления предельных конфигураций и параметров зависимости по времени осложняется необходимостью выполнения вычислительных операций, приводящих к потере точности. Дополнительным источником нерегулярной погрешности является интерполяция, так как при измельчении сетки положение искомой точки относительно узлов может меняться трудно-предсказуемым способом. В качестве примера отметим, что при расчете координат поверхности с точностью 8–12 значащих десятичных цифр, параметры экспоненциальной зависимости $a + be^{-\lambda t}$ максимальной кривизны поверхности от времени могут иметь всего 1–3 точных знака.

В [9] были получены численные данные о зависимости максимальной кривизны обрабатываемой поверхности от времени (рис. 2). Вычисление кривизны требует вычисления второй производной от зависимостей координат от параметра, что может привести к потере примерно половины значащих цифр исходной зависимости. Кроме того, определение максимума требует интерполяции, а это приводит к появлению нерегулярной погрешности, связанной с переменностью положения точки максимума кривизны от ближайших узлов интерполяции при измельчении шага сетки.

Фильтрация этих данных обычными способами была затруднена в связи с наличием большой нерегулярной составляющей погрешности. Резуль-

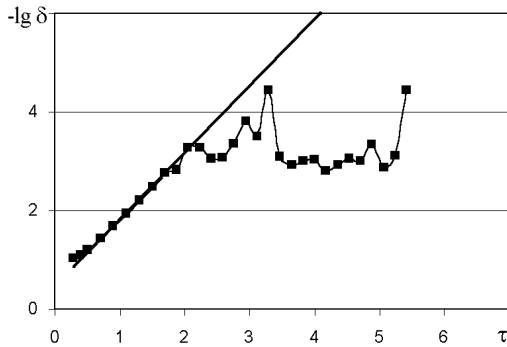


Рис. 3. Зависимости от времени погрешности кривизны нестационарной поверхности без дополнительной фильтрации

таты обычной фильтрации [10] приведены на рис. 3 в виде зависимости $y = -\lg \delta$ ($y = -\lg \delta$, $\delta = |\Delta K/K|$ — относительное отличие кривизны от эталонного значения $K \approx -11.306$) от времени τ . Значение ординаты представляет собой точность, выраженную в количестве точных значащих десятичных цифр. Применение специальных способов фильтрации [11] не привело к существенному уменьшению этой нерегулярной погрешности.

В данной работе применялась предварительная фильтрация на этапе интерполяции. В основе этого метода фильтрации заложена математическая модель погрешности, которая имеет следующий вид

$$P_m(x) - f(x) = c \prod_{l=k}^{k+m} (x - x_l) + \sum_{i=k}^{k+m} \Delta_i \prod_{\substack{l=k \\ l \neq i}}^{k+m} \frac{x - x_l}{x_i - x_l} + \Delta(m), \quad (7)$$

где $P_m(x)$ — интерполяционный многочлен степени m ; $f(x)$ — искомая функция; c — неизвестная константа; x_l — узлы сетки; Δ_i — погрешности узловых значений функции; $\Delta(m)$ — остаточная погрешность, содержащая погрешность округления; k — номер начального узла интерполяционного многочлена.

Фильтрация при интерполяции сводится к построению другого интерполяционного многочлена той же степени (например, путем изменения номера первого узла k) и составлению линейной комбинации значений двух многочленов с суммой коэффициентов равной 1, такой, чтобы уничтожалось первое слагаемое погрешности (7).

При применении метода коллокаций для решения задач возникает дополнительная погрешность

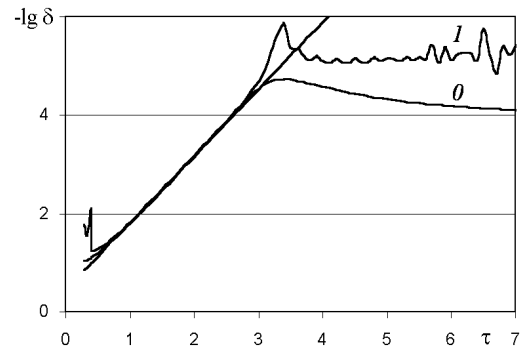


Рис. 4. Зависимости от времени погрешности кривизны нестационарной поверхности с дополнительной фильтрацией

интерполяции (второе слагаемое (7)), вызванная переменной погрешностью Δ_i значений кривизны в узловых точках. Для уменьшения влияния этой составляющей погрешности было предложено изменить способ вычисления кривизны. Если до этого узловые значения кривизны вычислялись при решении задачи, и далее по узловым значениям кривизны строился интерполяционный многочлен, то в предложенном способе интерполяционный многочлен строится по узловым значениям координат, а кривизна вычисляется с помощью дифференцирования интерполяционного многочлена. Выигрыш заключается в более высокой скорости убывания погрешностей координат Δ_i в узловых точках (эксперимент показывает 4-й порядок точности против 2-го в первом способе). Это усилило эффект обычной фильтрации по числу узлов n , что также уменьшило нерегулярную погрешность (см. рис. 4, кривая 1).

6. Результаты дополнительной фильтрации

Увеличение точности позволило обнаружить новый эффект, который не был обнаружен ранее из-за погрешности: кривизна вначале растет по модулю примерно до 11.306, а затем убывает до 11.304 (рис. 4, кривая 0). При этом характерная скорость убывания существенно меньше, чем возрастания, что обнаруживается с помощью попарного вычитания (рис. 4, кривая 1).

В этом случае изменение компонент погрешности (5) учтено за счет видоизменения преобразований (4), (3):

$$z_{n_i}^{(0)} = (z_{n_i} - z_{n_{i+1}}) / (1 - R_1^{-1}),$$

$$z_{n_i}^{(j)} = \left[z_{n_i}^{(j-1)} + \frac{z_{n_i}^{(j-1)} - z_{n_{i-1}}^{(j-1)}}{R_j - 1} \right] \frac{1 - R_j}{1 - R_{j+1}}, \quad (8)$$

$j = 1, 2, \dots$

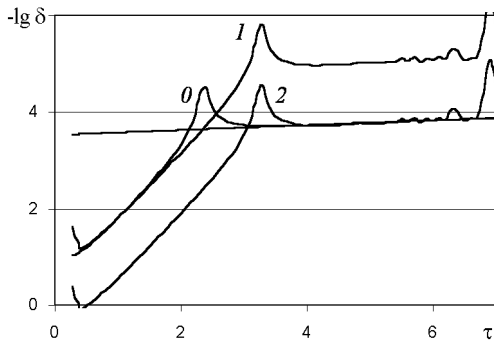


Рис. 5. Зависимости от времени погрешности кривизны нестационарной поверхности

На рис. 5 приведены результаты поправки (8) на быструю компоненту (кривая 1) и медленную компоненту (кривая 2). С помощью попарного сравнения был найден новый эталон ($K \approx -11.304$). Цифрой 0 обозначена исходная зависимость. Видно, что кривые 2 и 0 на участке, где преобладает медленная компонента, практически совпадают. На рисунок также нанесена прямая, полученная аппроксимацией методом наименьших квадратов участка кривой 0. Рассчитанный угловой коэффициент этой прямой имеет значение около 0.05 против 1.364, который имеет прямая на рис. 4, полученная тем же способом для другого участка кривой.

На рис. 6 представлены аналогичные зависимости, причем цифрой 1 обозначена зависимость, отфильтрованная от медленной составляющей. Видно, что первый участок приблизился к прямой, а точность, ограниченная нерегулярной погрешностью, увеличилась примерно на 1 значащую цифру. Цифрой 2 обозначена зависимость, отфильтрованная от составляющей с коэффициентом 1.364. Проявляется компонента с удвоенным угловым коэффициентом. Тонкими кривыми показаны результаты попарного вычитания.

Таким образом, как показывают численные исследования, с течением времени происходит установление значения максимальной кривизны на некотором предельном значении $K = -11.304 \pm 10^{-3}$. Интерес представляет определение закономерности установления предельного значения. Близость к прямым логарифмической зависимости $y = -\lg |\Delta K/K|$ говорит о том, что зависимость параметров формы (включая кривизну) от времени можно представить как сумму экспонент

$$z(\tau) = a + b_1 e^{-\lambda_1 \tau} + b_2 e^{-\lambda_2 \tau} + \dots + \Delta(\tau),$$

$$y(\tau) = -\lg \left| \frac{z(\tau) - a}{a} \right|.$$

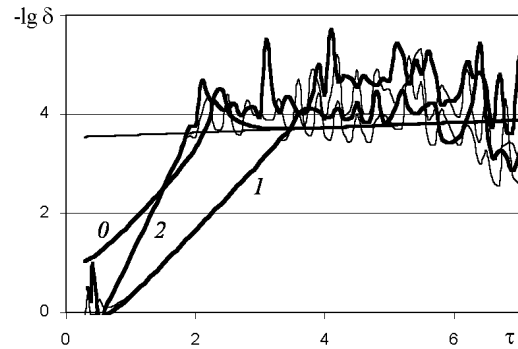


Рис. 6. Зависимости от времени погрешностей кривизны нестационарной поверхности, полученные с использованием различных способов фильтрации

Влияние нерегулярной составляющей $\Delta(\tau)$ погрешности этой зависимости можно оценить как

$$\Delta y = \lg \frac{b_1 e^{-\lambda_1 \tau} + b_2 e^{-\lambda_2 \tau} + \Delta(\tau)}{b_1 e^{-\lambda_1 \tau} + b_2 e^{-\lambda_2 \tau}} \approx \frac{1}{\ln 10} \frac{\delta_{irr}}{\delta},$$

$$\delta = \left| \frac{b_1 e^{-\lambda_1 \tau} + b_2 e^{-\lambda_2 \tau}}{a} \right|, \quad \delta_{irr} = \left| \frac{\Delta(\tau)}{a} \right|.$$

Уровень погрешности округления $-\lg \delta$ (порядка 5-й значащей цифры) отмечается (на рис. 6) колебательным хаотическим характером кривой 1 при $\tau > 4$. Для получения результатов с заданным числом значащих цифр k ($\Delta y = 10^{-k}$) придется ограничить исследуемую часть кривой ниже уровня $-\lg |\delta| \approx -\lg |\delta_{irr}| - k + \lg \ln 10$.

Угловой коэффициент зависимости $y(\tau)$ определяется через конечную разность

$$\frac{y(\tau + \varepsilon) - y(\tau - \varepsilon)}{2\varepsilon} \approx \lambda_1 + (\lambda_2 - \lambda_1) \frac{b_2}{b_1} \times e^{-(\lambda_2 - \lambda_1)\tau} + e^{\lambda_1 \tau} \frac{\Delta(\tau + \varepsilon) - \Delta(\tau - \varepsilon)}{2b_1 \varepsilon}. \quad (9)$$

Как следует из (9), погрешность содержит убывающее (при $\lambda_2 > \lambda_1$) и возрастающее при увеличении τ слагаемые. Это существенно ограничивает диапазон получения надежных оценок.

На рис. 7 цифрой 1 обозначена кривая, соответствующая отфильтрованной от медленной составляющей зависимости. Цифрой 2 обозначена повторно отфильтрованная методом (3) зависимость, цифрой 3 — еще раз отфильтрованная от составляющей с удвоенным коэффициентом. Для отфильтрованных зависимостей при $\tau > 1.5 - 2$ начинает преобладать возрастающая нерегулярная погрешность и максимально возможная точность ограничивается на уровне около 3 значащих цифр. Попарное вычитание (4) с поправкой (8) подтверждает полученные оценки (тонкие кривые).

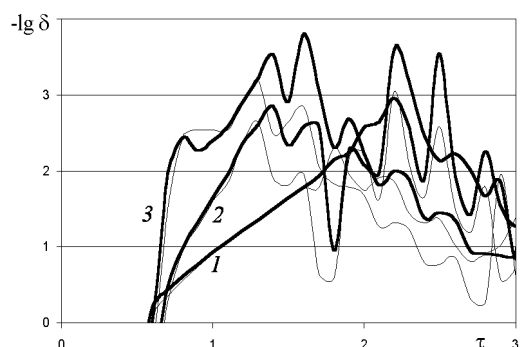


Рис. 7. Зависимости от времени погрешности углового коэффициента

Эффект медленного уменьшения модуля кривизны после возрастания можно объяснить особенностями нестационарного процесса. Но такое влияние может иметь также погрешность численного метода. Относительное изменение кривизны не превышает 2-х единиц в четвертом знаке, но делает невозможным оценку параметра λ_1 основной составляющей временной зависимости.

Фильтрация позволила обнаружить и устранить этот эффект и оценить показатели, характеризующие скорости протекания процессов.

7. Заключение

Таким образом, при решении задачи, рассмотренной в качестве примера, метод двухэтапной фильтрации данных со сравнением результатов двух этапов применялся как непосредственно при решении задачи (при численном интегрировании), так и для постпроцессорной обработки данных численного эксперимента. Это дало возможность получить достоверные оценки погрешности и существенно повысить эффективность численных алгоритмов. Проведенное тестирование с помощью точных частных решений подтвердило эти оценки.

С точки зрения практики при оценке погрешности могут быть полезны две задачи: первая — получение эталона с наибольшей возможной для данного эксперимента точностью, вторая — определение диапазона n и δ , в котором оценка погрешности по более простым правилам (типа Рунге и Ромберга) дает приемлемые результаты. Обе задачи решаются методами многокомпонентного анализа.

Список литературы

- [1] Житников В.П., Шерыхалина Н.М. Уточнение решений сложных вычислительных задач с помощью постпроцессорной обработки численных результатов // Вычисл. технологии. 2008. Т. 13, № 6. С. 61–65.
- [2] Житников В.П., Шерыхалина Н.М., Поречный С.С. Об одном подходе к практической оценке погрешностей численных результатов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. 2009. № 3(80). С. 105–110.
- [3] Амосов А.А., Дубинский Ю.А., Копченова Н.В. Вычислительные методы. М.: Изд. дом МЭИ, 2008. 672 с.
- [4] Тихонов А.Н., Леонов А.С., Ягола А.Г. Нелинейные некорректные задачи. М.: Наука, 1995. 312 с.
- [5] Федотов А.М. Некорректные задачи со случайными ошибками в данных. Новосибирск: Наука, 1990. 280 с.
- [6] Зверев Г.Н., Дембицкий С.И. Оценка эффективности геофизических исследований скважин. М.: Недра, 1982. 224 с.
- [7] Житников В.П., Шерыхалина Н.М. Оценка достоверности численных результатов при наличии нескольких методов решения задачи // Вычисл. технологии. 1999. Т. 4, № 6. С. 77–87.
- [8] Житников В.П., Шерыхалина Н.М., Поречный С.С. Решение задачи идентификации при оценке погрешностей численных результатов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. 2010. № 1(93). С. 105–110.
- [9] Zhitnikov V.P., Fedorova G.I., Sherykhalina N.M., Urakov A.R. Numerical investigation of non-stationary electrochemical shaping based on an analytical solution of the Hele–Shaw problem // Journ. Eng. Math. 2006. Vol. 55, Nos. 1-4. Pp. 255–276.
- [10] Житников В.П., Шерыхалина Н.М. Методы верификации математических моделей в условиях неопределенности // Вестник УГАТУ. 2000. № 2. С. 53–60.
- [11] Шерыхалина Н.М., Ошмарин А.А. Численная фильтрация данных, искаженных нерегулярной погрешностью // Вестник УГАТУ. 2006. Т. 8, № 1. С. 138–141.