Вычислительные технологии **Том 13, № 6, 2008**

Уточнение решений сложных вычислительных задач с помощью постпроцессорной обработки численных результатов

В. П. Житников, Н. М. Шерыхалина
Уфимский государственный авиационный технический университет, Россия
e-mail: zhitnik@ugatu.ac.ru, n_sher@mail.ru

Issues related to the more accurate determination of evolutionary characteristics of the non-stationary Hele—Shaw problem solutions are addressed. The improved methods for filtration of the numerical results are used. It allows increasing accuracy by several orders, thus some new effects and robust estimates of parameters of the process were obtained.

Введение

В работе [1] решена плоская нестационарная задача Хеле—Шоу применительно к электрохимической обработке точечным электродом-инструментом (ЭИ) C, движущимся со скоростью $v_{\text{ЭИ}}$ к обрабатываемой поверхности ADB (рис. 1). Дальнейшее исследование было затруднено высоким уровнем нерегулярной погрешности. В данной работе были использованы те же самые результаты вычислений. Разработкой усовершенствованных методов численной фильтрации результатов расчета удалось не только уточнить рассчитанные параметры, но и 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 зависимостей 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.

Вычисление кривизны требует вычисления второй производной от зависимостей координат от параметра, что может вызывать потерю примерно половины значащих цифр исходной зависимости. Кроме того, определение максимума требует интерполяции, а это

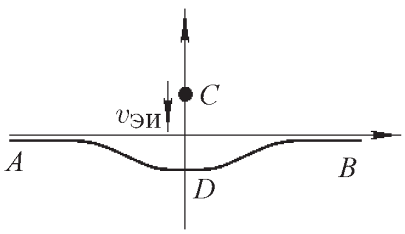


Рис. 1. Форма области, соответствующей межэлектродному пространству

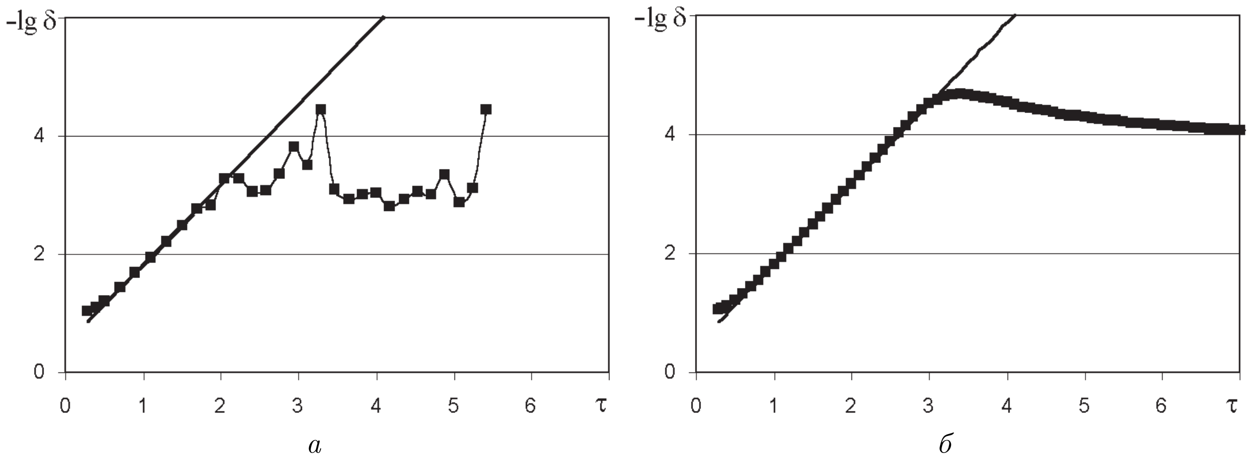


Рис. 2. Зависимости от времени погрешности кривизны нестационарной поверхности: *а* — без дополнительной фильтрации; *б* — с дополнительной фильтрацией

приводит к появлению нерегулярной погрешности, связанной с переменностью положения точки максимума кривизны от ближайших узлов интерполяции при измельчении шага сетки.

В [1] получены численные данные, фильтрация которых обычными способами была затруднена в связи с наличием большой нерегулярной составляющей погрешности. Результаты обычной фильтрации [2] приведены на рис. 2, *а* в виде зависимости $y = -\lg\delta$ (δ — относительное отличие кривизны от предельного значения $K = -11.306$) от времени τ. Значение ординаты представляет собой точность, выраженную в количестве точных значащих десятичных цифр. Применение специальных способов фильтрации [3] не привело к существенному уменьшению этой нерегулярной погрешности.

1. Фильтрация

Фильтрация предполагает использование математической модели погрешности, например, в виде суммы [2]:

$$z_n - z = c_1 n^{-k_1} + c_2 n^{-k_2} + \ldots + c_L n^{-k_L} + \Delta(n)\,, \tag{1}$$

где z — точное значение; z_n — приближенный результат, полученный при числе узловых точек, равном n; $k_1, \ldots, k_L$ — известные действительные числа ($k_1 < k_2 < \ldots < k_L$). В $\Delta(n)$ могут входить остаточный член, погрешность округления и многие другие составляющие, обусловленные как численным методом, так и конкретной программной реализацией.

Пусть известна конечная последовательность z_{n_i}, $i = 1, \ldots, M$, вычисленная при увеличении n в целое число раз Q $(Q > 1)$, т. е. $n_j = n_1 Q^{j-1}$. В этом случае задача фильтрации (устранения одного из слагаемых суммы $c_j n^{-k_j}$) может быть решена точно [1, 2] с помощью составления линейной комбинации пар чисел z_{n_i} такой, чтобы сумма коэффициентов при z в (1) была равна единице, а при слагаемом с $c_1 n^{-k_1}$ — нулю. Применяя фильтрацию ко всей последовательности z_{n_i}, получаем отфильтрованную один раз последовательность $z_{n_i}^{(1)}$. Если она содержит больше одного члена, то ее также можно отфильтровать, устранив степенную составляющую с n^{-k_2}. Операции фильтрации можно повторять последовательно для $n^{-k_1}, \ldots, n^{-k_L}$, если исходная последовательность содержит достаточное количество членов.

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

$$P_m(x) - f(x) = c \prod_{l=k}^{k+m} (x - x_l) + \sum_{i=k}^{k+m} \Delta_i \prod_{\substack{l=k \\ l \neq i}}^{k+m} \frac{x - x_l}{x_i - x_l} + \Delta(m), \tag{2}$$

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, изменением номера первого узла k) и составлению линейной комбинации значений двух многочленов с суммой коэффициентов, равной единице, — такой, чтобы уничтожалось первое слагаемое погрешности (2).

При применении метода коллокаций для решения задач возникает дополнительная погрешность интерполяции (второе слагаемое (2)), 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 [1], то в предложенном способе интерполяционный многочлен строится по узловым значениям координат, а кривизна вычисляется с помощью дифференцирования интерполяционного многочлена. Преимущество 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 (рис. 2, *б*).

2. Результаты дополнительной фильтрации

Увеличение точности позволило открыть 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. 2, *б*). При этом характерная скорость убывания существенно меньше, чем возрастания. На рис. 3, *а* представлены зависимости десятичного логарифма разности вычисленного значения максимальной кривизны с приближенным значением предела $K = -11.304$, $y = -\lg \delta$, $\delta = |\Delta K / K|$ от времени τ. Цифрой *0* обозначена исходная зависимость. На рисунке 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. 2, полученная тем же способом для другого участка кривой. Цифрой *1* обозначена отфильтрованная от медленной составляющей зависимость. Видно, что первый участок приблизился к прямой, а точность, ограниченная нерегулярной погрешностью, увеличилась примерно на одну значащую цифру. Цифрой *2* обозначена зависимость, отфильтрованная от составляющей с коэффициентом 1.364. Проявляется компонента с удвоенным угловым коэффициентом.

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

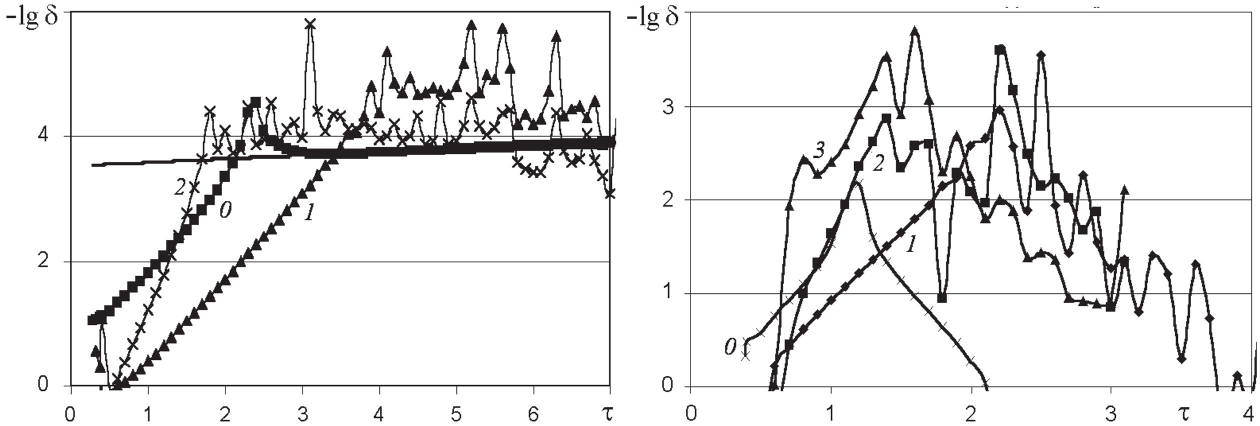
$$z(\tau) = a + b_1 e^{-\lambda_1 \tau} + b_2 e^{-\lambda_2 \tau} + \ldots + \Delta(\tau),$$

$$y(\tau) = -\lg\left|\frac{z(\tau) - a}{a}\right| = -\lg\left|\frac{b_1 e^{-\lambda_1 \tau} + b_2 e^{-\lambda_2 \tau} + \Delta(\tau)}{a}\right|.$$

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

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

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



а *б*

Рис. 3. Зависимости от времени погрешностей (полученные с использованием видоизмененных методов фильтрации): *а* — кривизны нестационарной поверхности; *б* — углового коэффициента λ_1

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

$$\frac{y(\tau+\varepsilon)-y(\tau-\varepsilon)}{2\varepsilon} \approx \lambda_1 + (\lambda_2-\lambda_1)\frac{b_2}{b_1}e^{-(\lambda_2-\lambda_1)\tau} + e^{\lambda_1\tau}\frac{\Delta(\tau+\varepsilon)-\Delta(\tau-\varepsilon)}{2b_1\varepsilon}. \tag{3}$$

Как следует из (3), погрешность содержит убывающее (при $\lambda_2 > \lambda_1$) и возрастающее при увеличении τ слагаемые. Это существенно ограничивает диапазон получения надежных оценок.

На рис. 3, *б* цифрой *0* обозначена кривая, соответствующая попытке определения углового коэффициента по неотфильтрованной последовательности, цифрой *1* — отфильтрованной от медленной составляющей зависимости. Цифрой *2* обозначена повторно отфильтрованная методом [2] зависимость, цифрой *3* — еще раз отфильтрованная от составляющей с удвоенным коэффициентом. Видно, что по неотфильтрованной зависимости оценить угловой коэффициент невозможно. Для отфильтрованных зависимостей при $\tau > 1.5$–2 начинает преобладать возрастающая нерегулярная погрешность и максимально возможная точность ограничивается на уровне около трех значащих цифр.

Заключение

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 двух 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.

Список литературы

[1] Житников В.П., Зиннатуллина О.Р., Федорова Г.И. Применение экстраполяции для оценки погрешности и уточнения численного решения нестационарных задач электрохимического формообразования // Вычисл. технологии. 2006. Т. 11. Спецвыпуск: Изб. докл. семинара по числ. методам и информ. технологиям Кем. гос. ун-та. С. 82–93.

[2] Житников В.П., Шерыхалина Н.М. Методы верификации математических моделей в условиях неопределенности // Вестн. УГАТУ. 2000. Т. 1, № 2. С. 53–60.

[3] Шерыхалина Н.М., Ошмарин А.А. Численная фильтрация данных, искаженных нерегулярной погрешностью // Вестн. УГАТУ. 2006. Т. 8, № 1. С. 138–141.

Поступила в редакцию 24 июня 2008 г.