Уфа : УГАТУ, 2007 Вестник УГАТУ • Математика Т. 9, № 3 (21). С. 71–79

Математическое моделирование

УДК 519.6

В. П. ЖИТНИКОВ, Н. М. ШЕРЫХАЛИНА

ОБОСНОВАНИЕ МЕТОДОВ ФИЛЬТРАЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Показано, что погрешность численных методов в различных случаях может быть представлена в виде суммы нескольких слагаемых степенного вида. Это может быть использовано для применения повторной фильтрации результатов численного дифференцирования и интегрирования. В приведенном примере интегрирования функции с особенностью в результате фильтрации погрешность была уменьшена на 8 порядков. *Численная фильтрация; экстраполяция; разложение в ряд*

ВВЕДЕНИЕ

Широкое применение математического моделирования привело к бурному развитию численных методов и программ их реализующих, появлению большой массы результатов вычислений. Однако, проведя анализ состояния дел, приходится признать, что достоверность этих результатов часто вызывает сомнения. Например, по одной из задач, решенной многими авторами, сравнительный анализ проведен в [1].

Существуют подходы к преодолению проблем, связанных с увеличением надежности результатов численных расчетов и их оценкой, например, интервальная математика [2]. Именно это и есть доведенная до математической строгости методика получения приближенных решений, находящихся в заданных пределах относительно точного. Однако аналитические подходы требуют больших вычислительных ресурсов для решения сложных задач.

Можно подойти к этой проблеме с другой стороны. Мы признаем, что численный эксперимент – это реальность, а математика дает приближенную модель этой реальности, которая в разных условиях может хорошо или плохо ей соответствовать. Но в этом случае возникает необходимость разработки методик проведения эксперимента и методов анализа его результатов. Необходимо также проведение математического обоснования для выяснения области применения этих методов, чему и посвящена данная работа.

1. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ФУНКЦИЙ

Рассмотрим функцию $f(x)$, имеющую непрерывную на отрезке $[c,H]$ $n+1$-ю производную. Тогда при $x \in [c,H]$ она представима в виде формулы Тейлора

$$f(x) = T_n(x-c) + R_n(x,\xi), \qquad (1)$$

где

$$T_n(x-c) = f(c) + \frac{f'(c)}{1!}(x-c) + \frac{f''(c)}{2!}(x-c)^2 + \ldots + \frac{f^{(n)}(c)}{n!}(x-c)^n,$$

$$R_n(x,\xi) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-c)^{n+1}, \quad \xi \in (c,x).$$

Изменяя x в диапазоне $[c,c+H]$ можно получить функцию $\xi = \varphi(c,x)$. Тогда сложная функция

$$r_n(x) = R_n[x,\varphi(c,x)] = f(x) - T_n(x-c)$$

имеет непрерывную $n+1$-ю производную на $[c,c+H]$ в силу аналогичных свойств $f(x)$ и непрерывности всех производных $T_n(x-c)$.

При этом производные

$$r_n^{(m)}(x) = \frac{f^{(n+1)}(\zeta_m)}{(n-m+1)!}(x-c)^{n-m+1}, \qquad (2)$$

$$c < \zeta_m < x, \quad m \le n,$$

$$r_n^{(n+1)}(x) = f^{(n+1)}(x). \qquad (3)$$

Отметим, что формулы (2), (3) справедливы и в более общих случаях, например, для кусочно-непрерывной n+1-й производной.

Функция $f(x)$, для которой справедливо (1), имеет первообразную $F(x)$ на отрезке $[c,c+H]$, поскольку она непрерывна на этом отрезке. Первообразная $F(x)$ может быть представлена разложением по формуле Тейлора до (n+1)-го члена. Следовательно, существует интеграл

$$\int_c^x r_n(x)\,dx = \int_c^x f(x)\,dx - \int_c^x T_n(x-c)\,dx =$$

$$= \frac{f^{(n+1)}(\zeta)}{(n+2)!}(x-c)^{n+2}, \quad \zeta \in (c,x). \qquad (4)$$

Для получения оценок при производной $f^{(n+1)}(x)$, не ограниченной в какой-либо точке отрезка $[c,c+H]$, в некоторых случаях можно использовать следующий подход. Допустим, функция имеет вид (c=0)

$$f(x) = F(x, x^{\alpha}), \quad \alpha > 0,$$

где α – любое положительное действительное число, а частные производные $\frac{\partial F^{i+j}(u,v)}{\partial u^i \partial v^j}$ непрерывны до (n+1)-го порядка включительно. В этом случае функция $F(x)$ в области непрерывности частных производных может быть представлена формулой Тейлора

$$F(u,v) = F(0,0) + dF(0,0) + \frac{1}{2!}d^2F(0,0) + \cdots$$

$$\cdots + \frac{1}{n!}d^nF(0,0) + \frac{1}{(n+1)!}d^{n+1}F(\theta u, \theta v),$$

где

$$d^jF(0,0) = \sum_{i=0}^{j} C_j^i \frac{\partial^j F}{\partial u^i \partial v^{j-i}}(0,0)\, u^i v^{j-i},$$

$$d^{n+1}F(\theta u, \theta v) =$$

$$= \sum_{i=0}^{n+1} C_{n+1}^i \frac{\partial^{n+1} F}{\partial u^i \partial v^{n+1-i}}(\theta u, \theta v)\, u^i v^{n+1-i},$$

$$0 < \theta < 1. \qquad (5)$$

Подставляя вместо u и v соответственно x и x^{α}, получим

$$F(x, x^{\alpha}) = F(0,0) +$$

$$+ \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{j!} \sum_{i=0}^{j} C_j^i \frac{\partial^j F}{\partial u^i \partial v^{j-i}}(0,0)\, x^{i+(j-i)\alpha} +$$

$$+ \sum_{i=0}^{n+1} \frac{C_{n+1}^i}{(n+1)!} \frac{\partial^{n+1} F}{\partial u^i \partial v^{n+1-i}}(\theta x, \theta x^{\alpha})\, x^{i+(n+1-i)\alpha}.$$

Перегруппировав слагаемые

$$F(x, x^{\alpha}) = \sum_{i=0}^{n} x^{i\alpha} \sum_{j=0}^{n-i} \frac{C_{j+i}^i}{(j+i)!} \frac{\partial^{j+i} F}{\partial u^j \partial v^i}(0,0)\, x^j +$$

$$+ r_{n\alpha}(x), \qquad (6)$$

$$|r_{n\alpha}(x)| \le Cx^{\beta}, \quad \beta = \min_{0 \le i \le n+1} [i + (n+1-i)\alpha],$$

нетрудно убедиться, что функция представима в виде суммы алгебраических многочленов, умноженных на $x^{i\alpha}$, где i – целые неотрицательные числа, и остаточного члена.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ПОГРЕШНОСТИ ИНТЕРПОЛЯЦИИ

Справедлива следующая теорема [3,4].

Пусть $P_n(x)$ – алгебраический многочлен степени n, интерполирующий функцию $f(x)$, имеющей непрерывную производную n+1-го порядка, (пусть $P_n(x_j) = f(x_j)$, $j = k,\ldots,k+n$). Тогда погрешность интерполяции может быть оценена следующей формулой

$$P_n(x) - f(x) = \frac{\prod_{j=k}^{k+n}(x - x_j)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi), \qquad (7)$$

где x_j – узлы сетки, $\xi \in (x_k, x_{n+k})$.

Погрешность интерполяции функции, обладающей избыточной степенью гладкости

Пусть $P_m(x)$ – алгебраический многочлен m-й степени ($m < n$), интерполирующий $f(x)$. Представим $P_m(x)$ в виде

$$P_m(x) = P_{m1}(x) + \sum_{j=m+1}^{n} \frac{f^{(j)}(c)}{j!} P_{mj}(x) + P_{mr}(x),$$

где $P_{m1}(x)$ – многочлен тождественно равный многочлену Тейлора степени m, $P_{mj}(x)$, $j = 1, \ldots, m$ – многочлены, интерполирующие степенные функции $(x-c)^j$, $P_{mr}(x)$ - алгебраический многочлен степени m, который интерполирует остаточный член $r_n(x) = f(x) - T_n(x-c)$.

Согласно (7) и (2), погрешность интерполяции остаточного члена равна

$$P_{mr}(x) - r_n(x) =$$

$$= -\frac{\prod\limits_{j=k}^{k+m}(x-x_j)}{(m+1)!} \left.\frac{d^{(m+1)}}{dy^{m+1}} r_n(y)\right|_{y=\eta} =$$

$$= -\frac{\prod\limits_{j=k}^{k+m}(x-x_j)}{(m+1)!} \frac{f^{(n+1)}(\zeta)}{(n-m)!} (\eta-c)^{n-m},$$

$$x_k < \zeta < x_{k+m}, \quad x_k < \eta < x_{k+m}.$$

Представим функцию $f(x)$ в виде

$$f(x) = T_n(x-c) + r_n(x) =$$

$$= T_m(x-c) + \sum_{j=m+1}^{n} \frac{f^{(j)}(c)}{j!} (x-c)^j + r_n(x).$$

Тем самым, общая погрешность интерполяции функции $f(x)$ равна

$$P_m(x) - f(x) = P_m(x) - T_n(x-c) - r_n(x) =$$

$$= \sum_{j=m+1}^{n} \frac{f^{(j)}(c)}{j!} \left(P_{mj}(x) - (x-c)^j\right) -$$

$$- \frac{\prod\limits_{j=k}^{k+m}(x-x_j)}{(m+1)!} \frac{f^{(n+1)}(\zeta)}{(n-m)!} (\eta-c)^{n-m},$$

$$x_k < \zeta < x_{k+m}, \quad x_k < \eta < x_{k+m}. \tag{8}$$

Следует отметить, что последнее слагаемое как функция x имеет n+1 непрерывных производных, так как является разностью алгебраического многочлена $P_{mr}(x)$ и функции $r_n(x)$. Тогда функция

$$\psi(x, \zeta, \eta) = \frac{f^{(n+1)}[\zeta(\eta)]}{(m+1)!\,(n-m)!} (\eta(x) - c)^{n-m} =$$

$$= -\frac{P_{mr}(x) - r_n(x)}{\prod\limits_{j=k}^{k+m}(x-x_j)} \tag{9}$$

как функция x имеет n непрерывных производных.

3. ПОГРЕШНОСТЬ ИНТЕРПОЛЯЦИИ ПРОИЗВОДНОЙ ФУНКЦИИ

Продифференцировав (8), с учетом (9) получим

$$P'_m(x) - f'(x) =$$

$$= \sum_{j=m+1}^{n} \frac{f^{(j)}(c)}{j!} \left(\sum_{i=k}^{k+m} (x_i - c)^j \sum_{\substack{q=k \\ q \neq i}}^{k+m} \frac{1}{x_i - x_q} \times \right.$$

$$\left. \times \prod_{\substack{l=k \\ l \neq i,q}}^{k+m} \frac{x-x_l}{x_i-x_l} - j(x-c)^{j-1} \right) -$$

$$- \prod_{j=k}^{k+m} (x_s - x_j) \frac{d}{dx} \psi(x, \zeta, \eta) -$$

$$- \psi(x_s, \zeta, \eta) \sum_{i=k}^{k+n} \prod_{\substack{j=k \\ j \neq i}}^{k+m} (x - x_j).$$

Если требуется оценка погрешности производной в одной из узловых точек $x = x_s$, то

$$P'_m(x_s) - f'(x_s) =$$

$$= \sum_{j=m+1}^{n} \frac{f^{(j)}(c)}{j!} \left(\sum_{i=k}^{k+m} \frac{(x_i - c)^j}{x_i - x_s} \times \right.$$

$$\left. \times \prod_{\substack{l=k \\ l \neq i,s}}^{k+m} \frac{x_s - x_l}{x_i - x_l} - j(x_s - c)^{j-1} \right) -$$

$$-\psi(x_s, \zeta, \eta) \prod_{\substack{j=k \\ j \neq s}}^{k+m} (x_s - x_j).$$

Если при этом $c = x_s$, то

$$P'_m(x_s) - f'(x_s) =$$

$$= - \prod_{\substack{j=k \\ j \neq s}}^{k+m} (x_s - x_j) \sum_{j=m+1}^{n} \frac{f^{(j)}(x_s)}{j!} \times$$

$$\times \left(\sum_{\substack{i=k \\ i \neq s}}^{k+m} (x_i - x_s)^{j-1} \prod_{\substack{l=k \\ l \neq i}}^{k+m} \frac{1}{x_i - x_l} \right) -$$

$$-\psi(x_s, \zeta, \eta) \prod_{\substack{j=k \\ j \neq s}}^{k+m} (x_s - x_j). \qquad (10)$$

Если $x_j = a + jh$, то $(x_s - x_j) = (s - j)h$, тогда

$$P'_m(x_s) - f'(x_s) =$$

$$= -h^m \prod_{\substack{j=k \\ j \neq s}}^{k+m} (s - j) \sum_{p=0}^{n-m-1} h^p \frac{f^{(m+1+p)}(x_s)}{(m+1+p)!} \times$$

$$\times \sum_{\substack{i=k \\ i \neq s}}^{k+m} (i - s)^p \prod_{\substack{l=k \\ l \neq i}}^{k+m} \frac{i - s}{i - l} -$$

$$-h^n \frac{f^{(n+1)}(\zeta)(\theta - s)^{n-m}}{(m+1)!(n-m)!} \prod_{\substack{j=k \\ j \neq s}}^{k+m} (s - j)$$

$$k < \theta < k + m. \qquad (11)$$

Первое слагаемое оценки представляет собой сумму степенных функций $a_j h^j$ для $j = m, \ldots, n\text{-}1$, вторая часть оценивается сверху по модулю величиной $a_n h^n$.

Утверждение. При симметричном расположении узлов (m – четное и $s = k + m/2$) слагаемые с нечетными степенями p в сумме (11) равны нулю.

Доказательство. Рассмотрим отношение

$$\frac{\prod\limits_{\substack{l=k \\ l \neq k+q}}^{k+m} (k + q - l)}{\prod\limits_{\substack{l=k \\ l \neq k+m-q}}^{k+m} (k + m - q - l)} =$$

$$= \frac{q \cdot (q-1) \cdot \ldots \cdot 2 \cdot 1 \cdot (-1)}{(m-q) \cdot (m-q-1) \cdot \ldots \cdot 2 \cdot 1} \times$$

$$\times \frac{(-2) \cdot \ldots \cdot (q-m-1) \cdot (q-m)}{(-1) \cdot (-2) \cdot \ldots \cdot (q-1) \cdot (-q)} = (-1)^m.$$

Отсюда следует, что если $s = k + m/2$, то при любых $m > 0$

$$\prod_{\substack{l=k \\ l \neq k+q}}^{k+m} \frac{k + q - s}{k + q - l} = \prod_{\substack{l=k \\ l \neq k+q}}^{k+m} \frac{q - m/2}{k + q - l} =$$

$$= \prod_{\substack{l=k \\ l\neq k+m-q}}^{k+m} \frac{m/2-q}{k+m-q-l} =$$

$$= \prod_{\substack{l=k \\ l\neq k+m-q}}^{k+m} \frac{k+m-q-s}{k+m-q-l}.$$

Тогда для нечетных p

$$(k+q-s)^p \prod_{\substack{l=k \\ l\neq k+q}}^{k+m} \frac{k+q-s}{k+q-l} =$$

$$= -(k+m-q-s)^p \times$$

$$\times \prod_{\substack{l=k \\ l\neq k+m-q}}^{k+m} \frac{k+m-q-s}{k+m-q-l}.$$

Поэтому слагаемые в (11) с $i = k+q$ и $i = k+m-q$ взаимно уничтожаются, т. е.

$$\sum_{\substack{i=k \\ i\neq s}}^{k+m} (i-s)^p \prod_{\substack{l=k \\ l\neq i}}^{k+m} \frac{i-s}{i-l} = 0. \qquad (12)$$

4. ПОГРЕШНОСТЬ ИНТЕРПОЛЯЦИИ ПРОИЗВОДНОЙ ВЫСШЕГО ПОРЯДКА

Продифференцировав (8) с учетом (2), получим

$$P_m^{(p)}(x) - f^{(p)}(x) =$$

$$= \sum_{j=m+1}^{n} \left(P_{mj}^{(p)}(x) - \frac{f^{(j)}(x_0)}{(j-p)!}(x-c)^{j-p} \right) +$$

$$+ P_{mr}^{(p)}(x) - r_n^{(p)}(x) =$$

$$= \sum_{j=m+1}^{n} \frac{f^{(j)}(c)}{j!} \left(\sum_{i=k}^{k+m} (x_i-c)^j \times \right.$$

$$\left. \times \frac{d^{(p)}}{dx^p} \prod_{\substack{l=k \\ l\neq i}}^{k+m} \frac{x-x_l}{x_i-x_l} - \frac{j!}{(j-p)!}(x-c)^{j-p} \right) +$$

$$+ \sum_{i=k}^{k+m} r_n(x_i) \frac{d^{(p)}}{dx^p} \prod_{\substack{j=k \\ j\neq i}}^{k+m} \frac{x-x_j}{x_i-x_j} -$$

$$- \frac{\tilde{f}^{(n+1)}(\zeta)}{(n-p+1)!}(x-c)^{n-p+1},$$

$$c < \zeta < x, \quad p \le m.$$

При $x = c = x_s$, $p \le m$

$$P_m^{(p)}(x_s) - f^{(p)}(x_s) =$$

$$= \sum_{j=m+1}^{n} \frac{f^{(j)}(x_s)}{j!} \left(\sum_{i=k}^{k+m} (x_i - x_s)^j \times \right.$$

$$\left. \times \frac{d^{(p)}}{dx^p} \prod_{\substack{l=k \\ l\neq i}}^{k+m} \frac{x-x_l}{x_i-x_l} \right|_{x=x_s} \Bigg) +$$

$$+ \sum_{i=k}^{k+m} r_n(x_i) \frac{d^{(p)}}{dx^p} \prod_{\substack{j=k \\ j\neq i}}^{k+m} \frac{x-x_j}{x_i-x_j} \Bigg|_{x=x_s}. \qquad (13)$$

Пусть $x_j = a + jh$, $\sigma = (x-a)/h$, тогда

$$P_m^{(p)}(x_s) - f^{(p)}(x_s) =$$

$$= h^{m+1-p} \sum_{j=m+1}^{n} h^{j-m-1} \frac{f^{(j)}(x_s)}{j!} \times$$

$$\times\left(\sum_{i=k}^{k+m}(i-s)^j\,\frac{d^{(p)}}{d\sigma^p}\prod_{\substack{l=k\\ l\neq i}}^{k+m}\frac{\sigma-l}{i-l}\Bigg|_{\sigma=s}\right)+$$

$$+h^{n+1-p}\sum_{\substack{i=k\\ i\neq s}}^{k+m}\frac{\tilde{f}^{(n+1)}\left[\zeta\left(x_i\right)\right]}{(n+1)\,!}\times$$

$$\times\,(i-s)^{n+1}\,\frac{d^{(p)}}{d\sigma^p}\prod_{\substack{j=k\\ j\neq i}}^{k+m}\frac{\sigma-j}{i-j}\Bigg|_{\sigma=s}. \qquad (14)$$

Первое слагаемое оценки (14) представляет собой сумму степенных функций $a_j h^j$ для $j = m{+}1{-}p,\dots,n{-}p$, второе слагаемое оценивается по модулю сверху величиной $a_n h^{n+1-p}$.

5. ПОГРЕШНОСТЬ КВАДРАТУРНЫХ ФОРМУЛ

Пусть квадратурная формула построена на основе интерполяционного алгебраического многочлена степени m. Допустим, также, что $f(x)$ имеет $(n{+}1)$ непрерывных производных, где $n \geq m$. Тогда $f(x)$ представима в виде формулы Тейлора (1). Поэтому

$$\Delta I=\int_a^b\left[P_m\left(x\right)-f\left(x\right)\right]dx=$$

$$=\int_a^b\left[P_{m1}\left(x\right)-T_m\left(x-c\right)\right]dx+$$

$$+\sum_{j=m+1}^{n}\frac{f^{(j)}\left(c\right)}{j!}\int_a^b\left[P_{mj}\left(x\right)-\left(x-c\right)^j\right]dx+$$

$$+\int_a^b\left[P_{mr}\left(x\right)-r_n\left(x\right)\right]dx. \qquad (15)$$

При этом $T_m(x)$ интерполируется точно, поэтому первое слагаемое (15) равно нулю.

Погрешность интегрирования дополнительных членов равна

$$\Delta I_{mj}\left[\frac{f^{(j)}\left(c\right)}{j!}\right]^{-1}=\int_a^b\left[P_{mj}\left(x\right)-\left(x-c\right)^j\right]dx=$$

$$=\int_a^b\left[\sum_{i=k}^{k+m}\left(x_i-c\right)^j\prod_{\substack{l=k\\ l\neq i}}^{k+m}\frac{x-x_l}{x_i-x_l}-\left(x-c\right)^j\right]dx=$$

$$=\left[\sum_{i=k}^{k+m}\left(x_i-c\right)^j\int_a^b\prod_{\substack{l=k\\ l\neq i}}^{k+m}\frac{x-x_l}{x_i-x_l}dx-\right.$$

$$\left.-\frac{(b-c)^{j+1}-(a-c)^{j+1}}{j+1}\right],$$

$$j=m+1,\dots,n. \qquad (16)$$

Погрешность интегрирования $r_n(x)$, согласно (4), представляется формулой

$$\Delta I_{mr}=\int_a^b P_{mr}\left(x\right)dx-\int_a^b r_n\left(x\right)dx=$$

$$=\sum_{i=k}^{k+m}r_n\left(x_i\right)\int_a^b\prod_{\substack{l=k\\ l\neq i}}^{k+m}\frac{x-x_l}{x_i-x_l}dx-$$

$$-\frac{f^{(n+1)}\left[\zeta\left(b\right)\right]}{(n+2)\,!}\left(b-c\right)^{n+2}+$$

$$+\frac{f^{(n+1)}\left[\zeta\left(a\right)\right]}{(n+2)\,!}\left(a-c\right)^{n+2}. \qquad (17)$$

При $x_j = x_k{+}(j-k)h$, $a = x_k + \alpha h$, $b = x_k + \beta h$, $c = x_k + \gamma h$, $\sigma{=}(x - x_k)/h$

$$\Delta I_{mj}=h^{j+1}\frac{f^{(j)}\left(c\right)}{j!}\left[\sum_{i=k}^{k+m}\left(i-k-\gamma\right)^j\times\right.$$

$$\times\int\limits_{\alpha}^{\beta}\prod_{\substack{l=k\\ l\neq i}}^{k+m}\frac{\sigma-l+k}{i-l}d\sigma-$$

$$\left.-\frac{(\beta-\gamma)^{j+1}-(\alpha-\gamma)^{j+1}}{j+1}\right], \quad (18)$$

$$\Delta I_{mr}=h^{n+2}\left[\sum_{i=k}^{k+m}r_n(x_i)\int\limits_a^b\prod_{\substack{l=k\\ l\neq i}}^{k+m}\frac{\sigma-l+k}{i-l}d\sigma-\right.$$

$$-\frac{f^{(n+1)}[\zeta(b)]}{(n+2)!}(\beta-\gamma)^{n+2}+$$

$$\left.+\frac{f^{(n+1)}[\zeta(a)]}{(n+2)!}(\alpha-\gamma)^{n+2}\right]. \quad (19)$$

Рассмотрим теперь задачу интегрирования с помощью формулы парабол [3,4] функции (6) $f(x)=F(x,x^{\alpha})$, $(\alpha>0)$ на отрезке $[0,2h]$. Согласно (6)

$$I_h=\frac{h}{3}\left[F(0,0)+4F(h,h^{\alpha})+F(2h,2^{\alpha}h^{\alpha})\right]=$$

$$=\frac{h}{3}F(0,0)+\frac{1}{3}\sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n-i}\frac{h^{j+i\alpha+1}}{(j+i)!}\times$$

$$\times C_{j+i}^{i}\frac{\partial^{j+i}F}{\partial u^j\partial v^i}(0,0)\ \left(4+2^{j+i\alpha}\right)+$$

$$+\frac{h}{3}\left[4r_{n\alpha}(h)+r_{n\alpha}(2h)\right].$$

Точное значение интеграла

$$I=\int\limits_0^{2h}F(x,x^{\alpha})\,dx=$$

$$=\sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n-i}\frac{1}{(j+i)!}C_{j+i}^{i}\frac{\partial^{j+i}F}{\partial u^j\partial v^i}(0,0)\frac{(2h)^{j+i\alpha+1}}{j+i\alpha+1}+$$

$$+\int\limits_0^{2h}r_{n\alpha}(x)\,dx.$$

Погрешность квадратурной формулы определяется выражением

$$I_h-I=\frac{h}{3}F(0,0)+$$

$$+\sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n-i}\frac{h^{j+i\alpha+1}}{(j+i)!}C_{j+i}^{i}\frac{\partial^{j+i}F}{\partial u^j\partial v^i}(0,0)\times$$

$$\times\left(\frac{4}{3}+2^{j+i\alpha}\left(\frac{1}{3}-\frac{2}{j+i\alpha+1}\right)\right)+$$

$$+\frac{h}{3}\left[4r_{n\alpha}(h)+r_{n\alpha}(2h)\right]-\int\limits_0^{2h}r_{n\alpha}(x)\,dx. \quad (20)$$

Формула (20) показывает, что погрешность численного интегрирования представляется суммой степенных функций от h и остаточного члена, оценка которого, в соответствии с (4), представляется в виде

$$\left|\frac{h}{3}\left[4r_{n\alpha}(h)+r_{n\alpha}(2h)\right]-\int\limits_0^{2h}r_{n\alpha}(x)\,dx\right|\leq C_1h^{\beta+1},$$

$$\beta=\min_{0\leq i\leq n+1}\left[i+(n+1-i)\,\alpha\right].$$

6. ФИЛЬТРАЦИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

В рассмотренных случаях математическую модель погрешности можно представить в виде [5]

$$z_n-z=c_1n^{-k_1}+c_2n^{-k_2}+\ldots+$$

$$+c_Ln^{-k_L}+\Delta(n)\,; \quad (21)$$

где z – точное значение; z_n – приближенный результат, полученный при числе узловых точек, равном n; $k_1,\ldots,k_L$ –действительные числа $(k_1<k_2<\ldots<k_L)$.

В $\Delta(n)$ могут входить не вошедшие в сумму слагаемые степенного вида, остаточный член, погрешность округления и многие другие составляющие, обусловленные как численным методом, так и конкретной программной реализацией. Основным условием применения методов фильтрации является то, что величина $\Delta(n)$ должна быть малой по сравнению с каждым из предыдущих слагаемых при тех значениях n, которые использовались в данных конкретных расчетах.

Пусть известна конечная последовательность z_{n_i}, $i = 1, \ldots, M$, вычисленная при увеличении n в целое число раз $Q \quad (Q > 1)$, 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 аналитически [5,6] с помощью применения экстраполяционной формулы Ричардсона [3,4] ко всей последовательности

$$z_{n_i}^{(1)} = z_{n_i} + \frac{z_{n_i} - z_{n_{i-1}}}{Q^{k_j} - 1}, \quad i = 2, \ldots, M. \quad (22)$$

Если полученная последовательность $z_{n_i}^{(1)}$ содержит больше одного члена, то ее также можно отфильтровать, устранив степенную составляющую с n^{-k_l}. Операции фильтрации можно повторять последовательно для $n^{-k_1}, \ldots, n^{-k_L}$, если исходная последовательность содержит достаточное количество членов.

Разработаны методы [1,6,7], позволяющие уменьшить влияние нерегулярной погрешности, не требующие информации о конкретных значениях k_j, однако они требуют бо́льших затрат ресурсов.

Рассмотрим в качестве примера интеграл

$$\int_0^1 \sqrt{1 + x^{\pi/6}}\sqrt{1 + x^2}dx. \quad (23)$$

Для применения метода парабол требуется непрерывность четвертой производной подынтегральной функции. В данном примере даже первая производная имеет разрыв второго рода в точке x=0. Поэтому порядок точности методов для таких функций не соответствует тому, который определен оценками для гладких функций. Эффективность метода в таких условиях очень низка, что заставляет искать пути усовершенствования процедуры численного интегрирования.

В данном примере замена переменной не решает вопроса, так как после замены переменной подынтегральная функция также будет иметь особенности.

В качестве другого способа численного интегрирования функций с особенностями можно использовать неравномерное разбиение отрезка интегрирования. Экономия машинного времени достигается за счет того, что на частичных отрезках, далеких от особой точки, шаг интегрирования может быть существенно большим. Эта процедура численного интегрирования является достаточно общей, но и несколько громоздкой.

Третьим способом численного интегрирования функций, имеющих особенности является повторная фильтрация.

Результаты фильтрации удобно представлять визуально в виде графика (рис. 1), где по оси абсцисс даны значения десятичного логарифма n $(x = \lg n = -\lg h)$, по оси ординат - десятичного логарифма относительной погрешности $y = -\lg\delta$, т. е. точности, выраженной в количестве точных десятичных знаков. Для получения δ проводилось сравнение с эталоном, т. е. с числом, полученным после последней фильтрации.

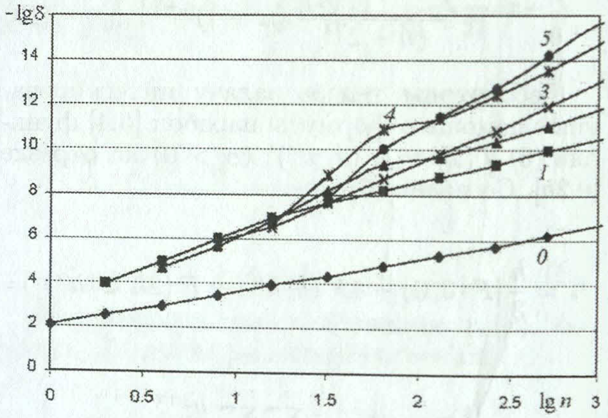

Рис. 1. Результаты повторной фильтрации

Результаты применения фильтрации приведены на рис. 1. Видно, что повторная фильтрация позволяет существенно уменьшить погрешность и получить результат с точностью порядка 10^{-14}. Сравнение полученного путем фильтрации значения со значением, вычисленным методом неравномерного разбиения отрезка, подтвердило эту оценку.

ВЫВОДЫ

Представление погрешности в виде суммы степенных функций (20) позволило применить формулу (22) для повторной численной фильтрации результатов вычисления интеграла (23).

По сравнению с другими методами вычисления сингулярных интегралов метод, использующий прямое применение квадратурной формулы для получения грубых результатов с последующим их уточнением путем фильтрации, показал существенные преимущества. Эти преимущества заключаются и в меньших затратах ресурсов и в возможности получения надежных оценок погрешности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Sherykhalina, N. M.** Application of extrapolation methods of numerical results for improvement of hydrodynamics problem solution / V. P. Zhitnikov, N. M. Sherykhalina // Computational Fluid Dynamics Journ. 2002. V. 11, N 2. P. 155–160.
2. **Кулиш, У.** Достоверные вычисления. Базовые численные методы: пер. с англ. / У. Кулиш, Д. Рац, Р. Хаммер, М. Хокс // Москва-Ижевск: РХД, 2005. 495 с.
3. **Бахвалов, Н. С.** Численные методы / Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков // М.: Наука, 2004. 636 с.
4. **Волков, Е. А.** Численные методы / Е. А. Волков // М.: Наука, 1982. 256 с.
5. **Житников, В. П.** Применение численной фильтрации как средства уточнения результатов вычисления и оценки погрешности / В. П. Житников, О. Р. Зиннатуллина, Н. М. Шерыхалина, А. А. Ошмарин /Матер. 3-й летн. науч. школы. Кемерово, Россия, 2006. С. 73–77.
6. **Житников, В. П.** Применение численной фильтрации как средства уточнения результатов вычисления и оценки погрешности / В. П. Житников, О. Р. Зиннатуллина, Н. М. Шерыхалина, А. А. Ошмарин / Матер. 3-й летн. науч. школы. Кемерово, Россия, 2006. С. 73–77.
7. **Шерыхалина, Н. М.** Численная фильтрация данных, искаженных нерегулярной погрешностью и оценки погрешности / Н. М. Шерыхалина, А. А. Ошмарин // Вестник УГАТУ, 2006. Т. 8. №1 (17). С. 138-141.
8. **Шерыхалина, Н. М.** Методы обработки результатов численного эксперимента для увеличения их точности и надежности / Н. М. Шерыхалина // Вестник УГАТУ, 2007. Т. 9. №2 (20). С. 127-137.

ОБ АВТОРАХ

Житников Владимир Павлович, проф., зав. кафедрой компьютерной математики УГАТУ. Д-р физ.-мат. наук по механике жидкости и газа (Казанский гос. университет, 1993). Иссл. в обл. волновых течений жидкости, обтекания оболочек, электрохимического формообразования, разработка числ.-аналитич. методов решения задач, методов оценки погрешности и достоверности численных результатов.

Шерыхалина Наталия Михайловна, доцент, зам. зав. кафедрой компьютерной математики по научной работе. Канд. физ.-мат. наук по применению вычислительной техники, мат. моделирования и мат. методов в научных исследованиях (Башкирский гос. университет, 1996). Иссл. в обл. волновых течений жидкости, разработка числ.-аналитич. методов решения задач, методов оценки погрешности и достоверности численных результатов.