ОЦЕНКА ДОСТОВЕРНОСТИ ЧИСЛЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРИ НАЛИЧИИ НЕСКОЛЬКИХ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ*

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

In the present paper the methods of estimating the results obtained by numerical modeling are suggested. The situation is considered when there are series of numerical methods of the same problem solution. It is necessary to estimate the accuracy of every method and its certainty if there is no divergence of results. As certainty numerical characteristic, making use of the probability that real error does not exceed the numerical error is suggested.

Поиск новых средств доказательства достоверности численных результатов представляет собой насущную проблему при разработке современных вычислительных технологий. Один из наиболее перспективных подходов заключается в применении методов интервальной математики, которые позволяют получить численное решение в виде интервала с гарантированными границами. В настоящее время в этой области достигнут значительный успех, для многих сложных задач получены численные решения. При этом сама процедура вычислительного процесса одновременно является доказательством существования (и даже единственности) решения.

Трудности прямого применения таких методов в ряде случаев заключаются в том, что интервал неопределенности исходных данных слишком широк и, как следствие, результат имеет весьма большую погрешность. В частности, такая ситуация возникает при учете возможности ошибок программирования при решении нелинейных задач математической физики, поскольку это решение связано с разработкой сложных программ при отсутствии аналитических отладочных примеров.

Однако в таких случаях возможность реализации и прохождения через "фильтры" отладочных средств больших ошибок, как правило, незначительна. Весьма нерационально учитывать такую возможность в полной мере. Отсюда вытекает желание ограничить границы интервала полученного результата так, чтобы мера возможности больших ошибок была достаточно малой. Для этого необходимо иметь количественную оценку меры возможности для каждого значения ошибки. Попытке разработки такого подхода — анализу размытых (доверительных) интервалов при учете различных источников ошибок — посвящена данная работа.

---

*Работа выполнена при поддержке федеральной целевой программы "Государственная поддержка интеграции высшего образования и фундаментальной науки на 1997–2000 годы".

1. Особенности оценки погрешности численных методов

Понятия точности и достоверности являются фундаментальными понятиями вычислительной математики. Достоверным можно считать результат, погрешность которого не выходит за предписанные рамки

$$|\hat{x} - x| \leq \varepsilon, \tag{1.1}$$

где x — точное значение, $\hat{x}$ — приближенное значение искомого параметра, полученное численно, ε — заданная допустимая величина погрешности. Сложность оценки погрешности и достоверности заключается в том, что точное решение, как правило, неизвестно, а источников возникновения погрешности много и они могут иметь различную природу.

Погрешность численного решения может быть вызвана следующими причинами:

— неадекватностью аналитической и дискретной моделей;

— ошибками округления и усечения чисел в машинном представлении;

— ошибками программирования.

Первый тип погрешностей — погрешность дискретизации — связан с тем, что такие математические величины, как предел, производная, интеграл и др., могут быть вычислены только приближенно. Погрешность численного метода, как правило, оценивается неравенством

$$\Delta_M \leq ch^k, \tag{1.2}$$

где h — величина шага сетки, c, k — коэффициенты, значения которых не зависят от h. Значение c часто бывает трудно оценить строго, и такая оценка проводится путем анализа данных численного эксперимента (например, по правилу Рунге [1]). Точность вычисленного его значения может оказаться весьма невысокой, и достоверность такой оценки погрешности вызывает сомнения.

Решение задач математической физики связано, как правило, с применением суперпозиции нескольких численных методов, что существенно осложняет оценку погрешности. В результате этого, как нетрудно заметить при анализе современных научных публикаций, вопрос оценки погрешности полученных численных данных часто не освещается, а остается внутренним делом автора. В этой ситуации непонятно, как судить о достоверности таких результатов. Вопрос о достоверности численных результатов иногда подменяется доказательством сходимости приближенного решения к точному или даже неконструктивным доказательством существования решения. Следует отметить, что сходимость — свойство асимптотическое и не гарантирует адекватного характера поведения приближенного решения при конечных значениях параметра дискретизации (в (1.2) это h).

Об оценке погрешности округления и усечения можно сказать следующее. Вычислительные ошибки этого типа порождаются ограниченной разрядностью представления чисел в ЭВМ. Эти ошибки резко возрастают в ситуациях, близких к математическим неопределенностям типа $0/0$, $\infty - \infty$, $0 \cdot \infty$. Можно приближенно указать значения h и n, при которых погрешность округления Δ_0 сравнивается с погрешностью дискретизации. Возможность контроля погрешности округления также несколько облегчает то обстоятельство, что эта погрешность, в отличие от остальных типов погрешностей, ведет себя достаточно хаотично, и по уровню этой хаотической составляющей можно судить, хотя и очень приближенно, о ее величине.

Ошибки программирования и их влияние на результаты расчетов представляют собой наименее предсказуемую часть погрешности и могут свести на нет все попытки контроля и оценки достоверности. Практика эксплуатации программного обеспечения показывает, что ситуация, когда в отлаженной программе остаются невыявленные ошибки, вполне реальна. Для определения факта наличия или отсутствия этих ошибок часто используют сравнение с аналитическим решением, если оно известно для какого-то набора параметров задачи. Этот способ иногда также применяют для оценки погрешности дискретизации. Следует отметить, что такой способ хорош при наличии большого числа различных аналитических решений. Экстраполировать же результаты оценки одного сравнения на все возможные сочетания параметров весьма опасно, в особенности, если нет независимой оценки вычислительной погрешности. При этом непонятно к какому классу погрешностей отнести имеющееся расхождение и как это расхождение изменится при изменении параметров.

На практике часто применяется такой способ. Проводится вычисление одного и того же параметра несколькими способами и по разнице результатов судят о точности. Несмотря на такую нестрогость подхода, практика показывает, что он обладает достаточно высокой надежностью [2] (подтверждаемой дальнейшим исследованием), а подчас является практически единственным способом проверки результата. В отличие от метода сравнения с точным решением, этот способ контроля можно повторять практически для всех комбинаций параметров задачи, которые подлежат исследованию.

Из сказанного следует, что путем логических рассуждений или каким-то другим способом указать точную оценку погрешности ε и гарантировать, что реальная погрешность никогда не превысит эту величину во многих случаях невозможно. Отсюда следует необходимость перехода к вероятностной модели возникновения погрешности. Вместо определения верхней оценки ошибки (1.1) перейдем к оценке доверительного интервала. В качестве численной характеристики достоверности будем использовать вероятность того, что фактическая погрешность не выходит за пределы, которые обусловлены вычислительной погрешностью

$$P\left\{|\hat{x}-x| \leq \varepsilon\right\} \geq P_{\text{fiducial}} = 1 - P_{\text{error}}. \tag{1.3}$$

Пусть есть некоторая совокупность различных численных методов и реализующих их программ. Каждый метод обладает своей погрешностью. Погрешности полученных приближенных значений будем считать случайными величинами. В дальнейшем будем предполагать независимость друг от друга погрешностей разных методов. Предположим, что оценка вычислительной погрешности каждого метода проводится одним из известных способов (например, путем уменьшения шага сетки h или увеличения числа узлов n), не дающих полной гарантии достоверности. Полученную оценку назовем наблюдаемой погрешностью. Наблюдаемая погрешность не учитывает возможность несовершенства оценки, отсутствия сходимости, ошибок программирования и др. Погрешность, вызванную перечисленными причинами, которая не может быть обнаружена обычным путем, будем называть ненаблюдаемой.

2. Обнаружение ненаблюдаемой погрешности сравнением данных, полученных несколькими методами

Итак, пусть имеется ряд численных методов решения одной и той же задачи. Допустим, результаты вычислений каждого метода содержат как наблюдаемую, так и ненаблюдаемую погрешность. Проведена оценка наблюдаемой погрешности каждого результата σ_j.

Затем по статистическим правилам необходимо вывести общую оценку (эталон) искомого параметра.

Первая задача заключается в том, чтобы с помощью сравнения с эталоном результатов решения одной и той же задачи несколькими методами попытаться обнаружить факт наличия ненаблюдаемой погрешности в каждом решении.

Задачу получения оценок искомого параметра и ненаблюдаемых погрешностей можно записать в виде системы уравнений следующего вида:

$$\begin{aligned} &y_1 = x_1 + x_2 + v_1, \\ &y_2 = x_1 + x_3 + v_2, \\ &\dots \\ &y_m = x_1 + x_{m+1} + v_m. \end{aligned} \tag{2.1}$$

Здесь x_1 — искомый параметр, $x_2, \dots, x_{m+1}$ — ненаблюдаемые погрешности, y_i — значения параметров, вычисленных с помощью i-го метода, ν_i — ненаблюдаемая погрешность i-го метода. Необходимо найти оптимальный способ определения оценки $\hat{x}$ вектора искомых параметров x по результатам вычислений y_1,..., y_m. В качестве критерия оптимальности принимается минимум математического ожидания среднеквадратичной ошибки, т. е. $M\left|\hat{x}-x\right|^2 \to \min$. Эта задача решена в [3, 4]. Оптимальную оценку можно найти по формуле

$$\hat{x}_1 = \sigma^2_{\Delta 1} \sum_{j=1}^{m} \left(\sigma_j^2 + \sigma^2_{x,j+1}\right)^{-1} y_j, \tag{2.2}$$

$$\sigma^2_{\Delta 1} = \left[\, \sum_{j=1}^{m} \left(\sigma_j^2 + \sigma^2_{x,j+1}\right)^{-1} + \sigma_{x1}^{-2} \right]^{-1}, \tag{2.3}$$

где σ_j^2 — дисперсии случайных величин ν_j, σ^2_{xj} — ожидаемые дисперсии величин x_j, $\sigma_{\Delta 1}$ — среднеквадратичная погрешность оценки (2.2).

Значения σ_{xj} заранее могут быть неизвестны. В этом случае можно предложить следующую процедуру. Выбираем σ_{xj} равными достаточно большому числу по сравнению с σ_j и находим оценки согласно (2.2)–(2.3). Далее необходимо определить, не превышает ли полученное значение $\hat{x}_{j+1} = y_j - \hat{x}_1$ по модулю величины σ_j, допустимой исходя из оценок точности численного метода. Наличие такого расхождения для какого-то метода свидетельствует о присутствии ненаблюдаемой погрешности. Если такое отличие зафиксировано, то обнаруживается и устраняется его причина.

Если величины $|\hat{x}_{j+1}|$ не превосходят σ_j, то констатируем, что ненаблюдаемая погрешность не обнаружена.

Таким образом, в результате правильно и до конца проведенного численного эксперимента имеется m значений y_i, отличие которых находится в заданных пределах (ненаблюдаемая погрешность, превышающая наблюдаемую, больше не обнаруживается).

Вторая задача заключается в том, чтобы при отсутствии расхождения полученных результатов оценить их достоверность.

3. Математическая модель ненаблюдаемой погрешности

Нам необходимо оценить вероятность того, что, несмотря на необнаружение ненаблюдаемой погрешности, выходящей за заданные рамки, она все же существует (это означает, что ненаблюдаемые погрешности всех рассматриваемых методов совпадают с точностью $|y_j - y_k| \le \sigma_j + \sigma_k$).

В отличие от вычислительной погрешности, которую можно считать случайной величиной, распределенной, например, по нормальному или равномерному закону, ненаблюдаемая погрешность имеет свои особенности. Результат вычисления величины z с помощью конкретного метода (точнее, его программной реализации) может быть искажен различными источниками. Рассматривая каждый источник ошибок по отдельности можно предположить двойственную ситуацию: либо этот источник "включен" и есть погрешность $x = x_k \ne 0$, либо $x = 0$. Пусть вероятность отсутствия погрешности равна α_k. Тогда функцию плотности вероятности погрешности от этого источника можно представить в виде взвешенной суммы двух δ-функций:

$$\chi_k(x) = \alpha_k \delta(x) + (1-\alpha_k)\delta(x - x_k) \ , \quad 0 \le \alpha_k \le 1. \tag{3.1}$$

Рассматривая совокупность таких источников и предполагая возможность различной степени их влияния на конечный результат, можно приписать каждому значению x_k некоторую вероятность или рассмотреть плотность вероятности как функцию $f(x)$. Тогда общая функция плотности вероятности ненаблюдаемой погрешности примет вид

$$\varphi(x) = \alpha\delta(x) + (1-\alpha) f(x), \tag{3.2}$$

где α — вероятность отсутствия ненаблюдаемой погрешности, функция $f(x)$ может быть суммой как непрерывных, так и δ-функций. Будем считать, что

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} x^2 f(x) dx = \sigma_x^2.$$

В дальнейшем нас будет интересовать попадание погрешности в конечный интервал

$$P(x,\sigma) = P\left\{x - \sigma \le y \le x + \sigma\right\} = \int\limits_{x-\sigma}^{x+\sigma} \varphi(y) dy = (1-\alpha) \int\limits_{x-\sigma}^{x+\sigma} f(y) dy + \begin{cases} 0, & |x| > \sigma, \\ \alpha, & |x| \le \sigma. \end{cases} \tag{3.3}$$

При этом каждому методу может соответствовать, вообще говоря, своя функция $f_k(x)$.

Рассматривая вероятностную модель погрешности, необходимо подразумевать некоторый статистический эксперимент, который может подтвердить или опровергнуть принятые допущения. Маловероятно, что таким экспериментом может служить испытание программы путем преднамеренного внесения в нее ошибок с дальнейшим анализом результата и отсеивания заведомо неприемлемых значений. Это связано как со сложностью разработки генератора случайных ошибок программы, так и с субъективностью фильтра, отсеивающего неправильные результаты.

Более реалистичным представляется следующий эксперимент. Две группы исследователей решают свои задачи; одна из групп проводит решение несколькими методами с последующим сравнением, другая (контрольная) не проводит такой проверки. Необходимо сравнить процент неверных выводов обеих групп. Нашей задачей является предсказать коэффициент увеличения надежности результатов первой группы по отношению ко второй.

4. Определение условной вероятности совпадения погрешностей

Искомая вероятность существования ненаблюдаемой погрешности равна вероятности совпадения ненаблюдаемых погрешностей x_k всех методов с определенной точностью (конкретно, если ненаблюдаемые погрешности x_k отличаются от x_1 не больше, чем на $\sigma_k = \sigma_k^* + \sigma_1^*$, где σ_k^* — оценка погрешности k-го метода). В качестве метода с номером 1 лучше всего выбрать самый точный метод.

Тогда вероятность совпадения результатов с точностью σ_k представляется суммой вероятностей наличия “малой” ошибки $P_{\text{error1}} = P\{|x| < A\}$, “большой” ошибки $P_{\text{error2}} = P\{|x| \geq A\}$ и вероятности ее отсутствия $P_0 = P\{x = 0\}$:

$$P_{\text{coincidence}} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \prod_{k=2}^{m} P_k(x, \sigma_k)\varphi_1(x)dx = P_0 + P_{\text{error1}} + P_{\text{error2}}, \tag{4.1}$$

$$P_0 = \alpha \prod_{k=2}^{m} [\ (1-\alpha)J_k(0) + \alpha],$$

$$J_k(x) = \int\limits_{x-\sigma_k}^{x+\sigma_k} f_k(y)dy,$$

$$P_{\text{error1}} = (1-\alpha)\int\limits_{-A}^{A} \prod_{k=2}^{m} P_k(x, \sigma_k) f_1(x)dx,$$

$$P_{\text{error2}} = (1-\alpha)^m \int\limits_{\substack{-\infty \\ x\notin(-A,A)}}^{\infty} \prod_{k=2}^{m} J_k(x) f_1(x)dx. \tag{4.2}$$

Условная вероятность совпадения ненаблюдаемых ошибок, превышающих некоторую величину $A \geq \sigma$, определяется отношением

$$P_{\text{error/coincidence}} = \frac{P_{\text{error 2}}}{P_{\text{coincidence}}} \leq \left(\frac{1-\alpha}{\alpha}\right)^m I(A),$$

$$I(A) = \int\limits_{\substack{-\infty \\ x\notin(-A,A)}}^{\infty} \prod_{k=2}^{m} J_k(x) f_1(x)dx. \tag{4.3}$$

5. Оценка достоверности при различных распределениях вероятности ненаблюдаемой погрешности

В предыдущем разделе получены оценки общего вида для произвольных функций распределения $f(x)$. Из (4.3) видно, что искомая оценка вероятности определяется через интеграл $I(A)$. Поскольку $J_k(x) \leq 1$, то ограниченность этого интеграла $I(A) \leq 1$ очевидна.

Получение более точных оценок для произвольной функции распределения невозможно. В частности, если $f_k(x) = \delta(x-c)$, $c \notin (-A, A)$, то $J_k(c) = 1$, $I(A) = 1$. Однако наличие δ-функции означает фактическое существование ошибки одной и той же величины c в результатах всех рассматриваемых методов. Преобладание вероятности совершить конкретную одинаковую погрешность при расчетах разными методами трудно объяснить случайными причинами, поэтому такой возможностью можно пренебречь.

Более точную оценку можно получить, если кроме ограниченности функция $f(x)$ обладает свойством унимодальности, т. е. если максимум $f(x)$ достигается в точке x_0, то при $x_0 < x_1 < x_2$ и $x_2 < x_1 < x_0$ $f_k(x_0) \geq f_k(x_1) \geq f_k(x_2)$. Вообще говоря, естественно считать, что меньшие по модулю погрешности встречаются чаще, чем бо́льшие. При этом допущении функция $f(x)$ унимодальна, причем точка максимума $f(x)$ $x_0 = 0$.

Наиболее естественными для погрешности, по видимому, можно считать нормальный, усеченный нормальный и равномерный законы распределения. В связи с этим имеет смысл получить оценки для этих случаев. При $\sigma_k = \sigma << \sigma_x$ из (4.1) – (4.3) для $A = \sigma$ нетрудно получить

$$P_0 \geq \alpha^m, \tag{5.1}$$

$$P_{\mathrm{error1}} \approx 2\sigma(1-\alpha)\alpha^{m-1} f(0), \tag{5.2}$$

$$P_{\mathrm{error2}} \leq [\,2\sigma]^{m-1} (1-\alpha)^m \int\limits_{-\infty}^{\infty} [\, f(x)]^m \, dx, \tag{5.3}$$

$$P_{\mathrm{error/coincidence}} = \frac{P_{\mathrm{error2}}}{P_{\mathrm{coincidence}}} \leq [\,2\sigma]^{m-1} \left(\frac{1-\alpha}{\alpha}\right)^m \int\limits_{-\infty}^{\infty} [\, f(x)]^m \, dx. \tag{5.4}$$

Предположим, что величина ненаблюдаемой погрешности определяется нормальным законом

$$f(x) = \frac{1}{\sigma_x\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}}.$$

Тогда согласно (5.1) – (5.4)

$$P_{\mathrm{error2/coincidence}} \approx \frac{1}{\sqrt{m}} \frac{1-\alpha}{\alpha} \left(\frac{(1-\alpha)\sqrt{2}}{\alpha\sqrt{\pi}} \frac{\sigma}{\sigma_x} \right)^{m-1}, \tag{5.5}$$

$$P_{\mathrm{error1/coincidence}} \approx \frac{(1-\alpha)\sqrt{2}}{\alpha\sqrt{\pi}} \frac{\sigma}{\sigma_x}. \tag{5.6}$$

Теперь рассмотрим случай равномерного распределения

$$f(x) = \begin{cases} 0, & |x| > \sigma_x\sqrt{3}, \\ \dfrac{1}{2\sqrt{3}\sigma_x}, & |x| \leq \sigma_x\sqrt{3}. \end{cases}$$

Тогда

$$P_{\mathrm{error2/coincidence}} \approx \frac{1-\alpha}{\alpha} \left(\frac{(1-\alpha)}{\alpha\sqrt{3}} \frac{\sigma}{\sigma_x} \right)^{m-1}, \tag{5.7}$$

$$P_{\mathrm{error1/coincidence}} \approx \frac{1-\alpha)}{\alpha\sqrt{3}} \frac{\sigma}{\sigma_x}. \tag{5.8}$$

Рассмотрим ситуацию, когда методы имеют разную точность. При определении доверительного интервала разброса вычислительной погрешности σ мы вынуждены ориентироваться на более грубый метод. Допустим, что один из методов обладает существенно более высокой точностью по сравнению с остальными. Из оценки (2.2) следует, что наличие грубых, результатов практически не влияет на общую оценку искомого параметра и оценку ее среднеквадратичной вычислительной погрешности. Вопрос заключается в том, влияет ли наличие независимых, пусть и более грубых результатов на достоверность этой оценки. При отсутствии сравнения с другими результатами ($m = 1$) согласно левой части равенства (4.3) вероятность наличия ненаблюдаемой погрешности приближенно равна $1 - \alpha$. Чтобы найти условную вероятность наличия ненаблюдаемой погрешности (теперь безразлично, больше или меньше σ), необходимо вычислить отношение $P^*_{\text{error/coincidence}} = \dfrac{P_{\text{error1}} + P_{\text{error2}}}{P_{\text{coincidence}}}$. Первое слагаемое согласно (5.2), (5.3) есть

$$P_{\text{error1/coincidence}} = \frac{P_{\text{error1}}}{P_{\text{coincidence}}} \approx 2\sigma \frac{1-\alpha}{\alpha} f(0) \tag{5.9}$$

и является при $m > 2$ малой меньшего порядка по сравнению со вторым. Поэтому, например, для нормального распределения нетрудно получить оценку

$$P^*_{\text{error/coincidence}} = \begin{cases} \left(\dfrac{1}{\sqrt{2}} + 1\right) \dfrac{1}{\sqrt{\pi}} \dfrac{\sigma}{\sigma_x}, & m = 2, \\ \dfrac{1}{\sqrt{\pi}} \dfrac{\sigma}{\sigma_x}, & m > 2, \end{cases} \tag{5.10}$$

Таким образом, наличие дополнительных результатов, пусть и более грубых, позволяет тем не менее увеличить степень достоверности точного значения.

Следует отметить, что оценку (5.9) можно отнести к разряду оптимистических, так как всегда можно подобрать функцию распределения $f(x)$, например, из класса ступенчатых, для которой величина произведения $f(0)\sigma_x$ больше любой заданной константы.

6. Верхняя оценка для унимодальной функции

Представляет интерес нахождение наихудшего закона распределения (в рамках принятых допущений) в смысле наибольшего значения интеграла (4.3). Отметим, что поскольку $f_k(x) \geq 0$, то

$$I(A) \leq \int_A^\infty \prod_{k=2}^m \{J_k(x) + J_k(-x)\} \, [\, f_1(x) + f_1(-x)] \, dx, \tag{6.1}$$

$$\int_0^\infty [\, f_k(x) + f_k(-x)] \, dx = 1. \tag{6.2}$$

Это значит, что для получения верхней оценки можно использовать одностороннее распределение вероятности ненаблюдаемой погрешности, которое можно получить из любого другого $f_k^*(x)$ следующим образом:

$$f_k(x) = \begin{cases} f_k^*(x) + f_k^*(-x), & x \geq 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

Примем такой план нахождения оценки. Рассмотрим монотонно не возрастающую ступенчатую функцию распределения

$$f_k(x) = \sum_{j=1}^{n_k-i+1} \Delta_{kj}\ ,\ x \in (x_{k,i-1}, x_{k,i}),\ i = 1, ..., n_k,$$

$$x_{k,0} = 0,\ x_{k,i-1} \le x_{k,i}. \tag{6.3}$$

Поскольку этой функцией с любой точностью можно приблизить любую кусочно-непрерывную монотонно невозрастающую функцию, для которой справедливы равенства (6.1) – (6.2), то это упрощение не ограничивает общности. Вследствие монотонности $f_k(x)$ приращения $\Delta_{kj} \ge 0$.

Далее получим оценку для $n_k = 1$, а затем докажем, что она справедлива для всех n. При $n_k = 1$ равенство (6.2) примет вид

$$\int_0^\infty f_k(x)dx = x_{k1}\Delta_{k1} = 1,$$

откуда можно получить $\Delta_{k1} = 1/x_{k1}$. Для $x_{k1} \ge A - \sigma_k$ справедливо неравенство

$$I(A) = \int_A^\infty \prod_{\substack{k=2\\k\ne j}}^m \left[\int_{x-\sigma_k}^{x+\sigma_k} f_k(y)dy\right] f_1(x) \left[\int_{x-\sigma_j}^{x+\sigma_j} f_j(y)dy\right] dx \le$$

$$\le \int_A^\infty \prod_{\substack{k=2\\k\ne j}}^m \left[\int_{x-\sigma_k}^{x+\sigma_k} f_k(y)dy\right] f_1(x) 2\sigma_j f_j(x)dx \le 2^{m-1}\prod_{k=2}^m \sigma_k \int_A^\infty \prod_{k=1}^m f_k(x)dx =$$

$$= (x_{j1} - A)\prod_{k=1}^m \frac{1}{x_{k1}} 2^{m-1}\prod_{k=2}^m \sigma_k \le \frac{x_{j1} - A}{x_{j1}^m} 2^{m-1}\prod_{k=2}^m \sigma_k = \overline{I}, \tag{6.4}$$

где $x_{j1} = \min x_{k1}$.

Найдем стационарную точку $\overline{I}$:

$$\frac{d\overline{I}}{dx_{j1}} = 2^{m-1}\prod_{k=2}^m \sigma_k \frac{x_{j1} - m(x_{j1} - A)}{x_{j1}^{m+1}} = 0,$$

откуда

$$x_{j1} = x_1^* = \frac{m}{m-1}A. \tag{6.5}$$

При этом вторая производная в точке $x_{j1} = x_1^*$

$$\frac{d^2\overline{I}}{dx_{j1}^2} = -\frac{m-1}{\left(\dfrac{m}{m-1}A\right)^{m+2}} 2^{m-1}\prod_{k=2}^m \sigma_k < 0.$$

Следовательно, при $x_1 = x_1^*$ достигается максимум $\overline{I}$, равный

$$\overline{I}(A) = \prod_{k=2}^m \frac{2\sigma_k}{A}\frac{1}{m}\left(\frac{m-1}{m}\right)^{m-1}. \tag{6.6}$$

При этом неравенство (4.3) принимает вид

$$P_{\text{error/coincidence}} \leq \left(\frac{1-\alpha}{\alpha}\right)^m \prod_{k=2}^{m} \frac{\sigma_k}{A} \cdot k_m, \quad k_m = \frac{1}{m}\left(2\frac{m-1}{m}\right)^{m-1}, \tag{6.7}$$

причем $k_m < 1$ для $m \leq 4$.

Теперь рассмотрим произвольные n_k. При этом (6.2) запишется в виде

$$\int\limits_0^\infty f_k(x)dx = \sum_{j=1}^{n_k} x_{k,n_k-j+1}\Delta_{kj} = 1. \tag{6.8}$$

Разрешая (6.8) относительно Δ_{k1}, получим

$$\Delta_{k1} = \frac{1 - \sum\limits_{j=2}^{n_k} x_{k,n_k-j+1}\Delta_{kj}}{x_{k,n_k}} = 1. \tag{6.9}$$

Тем самым $I(A)$ представляет собой полилинейную (по параметрам Δ_{kj}) функцию и ее максимум достигается в граничных точках интервала возможных значений Δ_{kj}, которые определяются неравенствами $\Delta_{kj} \geq 0$, $\Delta_{k1} \geq 0$.

Поскольку во всех случаях в граничных точках одно из значений $\Delta_{kj} = 0$, то, исключая точку x_kj и перенумеровав остальные точки, приходим к ступенчатой функции с $n-1$ значениями. Это позволяет методом полной математической индукции доказать, что оценка, имеющая место для $n_k = 1$, справедлива и для любого $n_k \geq 2$ для всех k.

7. Анализ полученных зависимостей и практические выводы

Оценки вероятности существования ненаблюдаемой погрешности (5.5) и (6.7), полученные при разных допущениях, имеют тем не менее общие свойства. В обоих случаях вероятность существования ненаблюдаемой погрешности пропорциональна σ^{m-1} при $\sigma_k = \sigma$. Таким образом, при уменьшении вычислительной погрешности σ результатов расчетов несколькими способами и их совпадении с этой точностью существенно увеличивается степень их достоверности. Разница заключается в том, что первая оценка получена при допущении, что распределение вероятности ненаблюдаемой погрешности определяется нормальным, равномерным или каким-нибудь другим “естественным” законом, для которого $f^*\sigma_x \leq 1/2$. В этом случае в качестве порогового значения ненаблюдаемой погрешности A выступает малая величина σ, т. е. оценивается вероятность наличия ненаблюдаемой погрешности, превышающей вычислительную

$$P_{\text{error/coincidence}} \leq \left(\frac{1-\alpha}{\alpha}\right)^m \left[\frac{\sigma}{\sigma_x}\right]^{m-1}. \tag{7.1}$$

Эта вероятность зависит от отношения σ/σ_x. Это нетрудно объяснить, если учесть, что σ_x характеризует ширину диапазона разброса возможных значений ненаблюдаемой погрешности, а величина σ — ширину интервала, в который должны попасть погрешности второго, третьего и т. д. методов для того, чтобы имело место их совпадение.

Во втором случае допускается только то, что распределение определяется унимодальной функцией. Соответствующая оценка (6.7) отличается от (7.1) тем, что оценивается вероятность превышения ненаблюдаемой погрешностью большой величины $A >> \sigma$:

$$P_{\mathrm{error/coincidence}} \leq \left(\frac{1-\alpha}{\alpha}\right)^m \left[\frac{\sigma}{A}\right]^{m-1}. \tag{7.2}$$

В связи с этим первую оценку (7.1) назовем оптимистической, а вторую (7.2), полученную для "худшего" случая, — пессимистической. Практическое использование (7.1) возможно только при условии, что величину σ_x можно оценить путем теоретических выводов или анализа результатов численного эксперимента.

При использовании (7.2) пороговая величина A выбирается равной требуемой точности ε. Однако такой подход требует получения реальных результатов с погрешностью σ, на один — два порядка меньшей величины ε.

Для определения величины α, характеризующей надежность каждого отдельного результата, можно попытаться использовать известные методы статистических испытаний. При отсутствии последних можно принять $\alpha = 0.5$ согласно гипотезе Лапласа о наибольшей неопределенности. На самом деле, ситуация, в которой $\alpha < 0.5$, означает, что преобладает недоверие к результатам. Это требует проведения дополнительного тестирования с целью поиска ошибки данного метода, который должен либо привести к локализации и устранению ошибки, либо, если тесты не обнаруживают какого-нибудь несоответствия, доверие к результату повышается.

Таким образом, в работе предложен способ определения достоверности численных результатов нескольких (двух — четырех) испытаний путем оценки вероятности совпадения погрешностей, вызванных ошибками в разных методах и программах, их реализующих. Показано, что при определенных условиях эта вероятность быстро уменьшается при увеличении точности расчетов и числа исследований. (Отметим, что при обычном статистическом методе оценки ненаблюдаемой погрешности скорость уменьшения неопределенности обратно пропорциональна $m^{1/2}$, что требует слишком большого числа различных методов расчета m.) Показано, что при наличии совпадающих независимо полученных результатов разной точности повышается достоверность, в том числе и более точного результата.

Список литературы

[1] Волков Е. А. *Численные методы.* Наука, М., 1982.

[2] Блехман И. И. Мышкис А. Д., Пановко Я. Г. *Механика и прикладная математика. Логика и особенности приложений математики.* Наука, М., 1990.

[3] Зверев Г. Н. *Оптимальные решения неопределенных и вырожденных систем линейных уравнений. Ч. I и II.* ВИНИТИ (Естеств. и точные науки, техника), №5(91), деп. 1979.

[4] Зверев Г. Н., Дембицкий С. И. *Оценка эффективности геофизических исследований скважин.* Недра, М., 1982.

Поступила в редакцию 30 ноября 1998 г.,
в переработанном виде 26 января 1999 г.