

# ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ ОЦЕНКИ ОШИБКИ ЧИСЛЕННЫХ РЕШЕНИЙ

А. Н. Рогалев

*Институт вычислительного моделирования СО РАН, 660036, Красноярск*

УДК 517.968

В статье исследуется обратный анализ ошибок численных решений, опираясь на аналогии с обратными задачами, когда значения параметров решений могут быть получены из наблюдаемых (вычисляемых) данных. Найти или оценить прямую ошибку непосредственно практически невозможно, так как в целом о точном решении известно очень мало или вообще ничего не известно. Вместо этого исследуется величина возмущения данных, такая, что при этих возмущениях численное решение будет точным решением задачи с возмущенными входными данными. Поскольку фактически решается обратная задача, то большое влияние оказывает нарушение устойчивости подобных задач. Предложено использовать при оценке погрешности решения некоторое ограниченное множество, которому принадлежит точное решение. Приводятся результаты расчетов ошибок численных решений систем линейных алгебраических уравнений большой размерности.

**Ключевые слова:** обратный анализ, ошибки численных методов

## Введение

Обратный анализ ошибок численных решений основан на том, что точность приближенного решения оценивается, рассматривая его в качестве точного решения задачи, близкой к исходной задаче [1], [2]. Такой метод анализа ошибок был разработан Уилкинсоном при численном решении задач линейной алгебры, и широко применен также в других областях численного анализа [2]. Предметом данной работы является рассмотрение обратного анализа ошибок совместно с обратными задачами — типом задач, часто возникающий во многих разделах науки, когда значения параметров модели должны быть получены из наблюдаемых данных. В целом обратный анализ ошибок показал свою эффективность при оценке ошибок решений как для систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), так и для непрерывных задач. Например, для обратного анализа ошибок дифференциальных уравнений (ДУ), выполняется управление дефектом (невязкой) численного решений, построение теневого решения (решения задач с возмущенной правой частью) и применение метода модифицированных уравнений, обобщены алгоритмы для реализации этих методов. Изучена также асимптотическая связь между локальной погрешностью, которая обычно используется для подбора величины шага численных методов решения задач с начальными данными и дефектом (невязкой), а также разность между точным решением возмущенной дефектом задачи и ее численным решением. Так как физические ошибки и ошибки моделей присутствуют для очень многих задач, выделяются условия, при которых численное решение можно рассматривать как точное решение возмущенной задачи.

При всех несомненных достоинствах обратного анализа ошибок возможен слишком большой рост границ оценок. Приводятся обоснования, что обратный анализ во многом напоминает обратные задачи, которые являются некорректно поставленными задачами. Для таких задач из трёх условий корректности постановки задачи (существование решения, единственность решения и его устойчивость) нарушается одно из них, чаще всего устойчивость. Для устранения всех нежелательных эффектов от неустойчивости этой задачи предлагается применять дополнительную (априорную) информацию о том, что точное решение принадлежит некоторому компактному множеству [3], [4].

## 1 Обратный анализ ошибок

*Определение 1.* Пусть  $y$  — точное решение задачи и  $\hat{y}$  — приближенное решение. Разность этих решений называется прямой ошибкой.

Вместо того, чтобы вычислять прямую ошибку, в обратном анализе ошибки рассматривается вопрос, какова величина возмущения данных  $\delta x$ , чтобы численное решение  $\hat{y}$  было точным решением задачи с возмущенными входными данными  $x + \delta x$ .

*Определение 2.* Пусть  $\hat{y}$  — приближенное решение задачи  $f$  с заданными данными  $x$ . Тогда обратной ошибкой называется величина  $\delta x$ , такая, что данные  $x$  должны быть изменены именно на эту величину, чтобы  $\hat{y}$  было точным решением задачи с данными  $x + \delta x$ .

Обратную ошибку в большинстве случаев возможно рассчитать или оценить. Таким образом, стратегия состоит в том, чтобы отобразить назад (построить обратное отображение) прямую ошибку, превратив ее в рассмотрение обратной ошибки. Общую идею обратного анализа ошибок можно описать, рассматривая поставленную задачу как отображение  $f$  из пространства данных  $D$  в пространство решений  $S$ . Принимая во внимание, что в заданной задаче  $f$  указанные данные  $D$ , задача  $f$  отображает их в точное решение  $y = f(x)$ . Итак обратный анализ ошибок основан на том, что, при малой величине обратной ошибки, численное решение будет точным решением близкой к исходной задаче.

В некоторых случаях, включая представленный случай системы ЛАУ, уместно рассмотреть пространство данных как пространство задач (или уравнений); в таком случае под возмущением входа  $\hat{x}$  понимается видоизмененная задача (или система уравнений), которая решается точно численным методом. В контексте задачи ЛАУ отображению  $f$  соответствует задача “решить СЛАУ” и диагональное отображение означает задачу “решить возмущенную СЛАУ”.

## 2 Сравнение вариантов обратного анализа ошибок численных решений систем линейных алгебраических уравнений

Для конечно-элементного анализа силовых конструкций в данной статье предложены методы апостериорного обратного анализа ошибок, контролирующие влияние на результат ошибок округления. Силовыми конструкциями называют конструкции (технические устройства, составленные из различных частей), под воздействием комплекса эксплуатационных нагрузок в штатных и аварийных режимах нагружения. Решая прикладные задачи для напряженно-деформированных состояний силовых конструкций необходимо оценить степень близости между точным и приближенными решениями, полученными на сетке конечных элементов с конечной величиной шага сетки. Сходимость метода конечных элементов контролировать сложно: при большом числе конечных элементов решение может расходиться из-за накапливающихся ошибок округления, даже при выполнении условий сходимости. Оценки, полученные при применении методов обратного анализа ошибок позволяют достаточно точно контролировать сходимость численных решений, что подтверждают расчеты, выполненные для практических задач.

Пусть решается система линейных алгебраических уравнений

$$Ax = b \quad (1)$$

Без потери общности будем полагать, что все расчеты ведутся на одном компьютере в рамках реализации одной арифметики с плавающей точкой и ошибки матрицы коэффициентов системы возникают при представлении этой матрицы в компьютере, то есть на ошибки матрицы коэффициентов налагается условие  $\|A^{-1}\| \cdot \|\Delta A\| < 1$ . Поскольку накопление погрешности при численном решении алгебраических уравнений — суммарное влияние округлений, сделанных на отдельных шагах вычислительного процесса, то логично для априорной оценки суммарного влияния ошибок округления в численных методах линейной алгебры использовать схему так называемого обратного анализа.

В применении к решению СЛАУ схема обратного анализа заключается в следующем. Вычисленное прямым методом  $M$  решение  $u^h$  СЛАУ не удовлетворяет исходной системе (1), но может быть представлено как точное решение возмущенной системы

$$(A + \Delta A)u = b + \Delta b \quad (2)$$

Качество прямого метода оценивается по наилучшей априорной оценке [1], которую можно дать для норм матрицы  $\Delta A$  и вектора  $\Delta b$ . Такие “наилучшие”  $\Delta A$  и  $\Delta b$  называются соответственно матрицей и вектором эквивалентного возмущения для метода  $M$ .

Если оценки для  $\Delta A$  и  $\Delta b$  были получены, то теоретически ошибка приближенного решения  $u^h$  может быть оценена неравенством

$$\frac{\|u - u^h\|}{\|u\|} \leq \frac{\text{cond}(A)}{1 - \|A^{-1}\| \|\Delta A\|} \left( \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \right).$$

В этом неравенстве  $\text{cond}(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$  — число обусловленности матрицы  $A$ , а матричная норма предполагается подчиненной векторной норме. Как уже отмечалось, оценка нормы обратной матрицы  $\|A^{-1}\|$  редко бывает известна, и основной смысл этого неравенства состоит в возможности сравнения качества различных методов. Ниже приводится вид некоторых типичных оценок для матрицы  $\Delta A$ . Для методов, использующих ортогональные преобразования и арифметику с плавающей запятой (коэффициенты системы  $A$ ,  $b$  считаются действительными числами)

$$\|\Delta A\|_E \leq f(n) \cdot \|A\|_E \cdot \varepsilon. \quad (3)$$

В оценке (3)  $\varepsilon$  — относительная точность арифметических операций в ЭВМ,  $\|A\|_E = \left( \sum_{i,j} a_{ij}^2 \right)^{\frac{1}{2}}$  — евклидова матричная норма,  $f(n)$  — функция вида  $Cn^k$ , где  $n$  — порядок системы. Точные значения константы  $C$  и показателя  $k$  определяются такими деталями вычислительного процесса, как используемые способ округления, и вид операции накопления скалярных произведений и т. д. В случае методов типа Гаусса в правую часть оценки (3) входит еще множитель  $g(A)$ , отражающий возможность роста элементов матрицы  $A$  на промежуточных шагах метода по сравнению с первоначальным уровнем (такой рост отсутствует в ортогональных методах). Чтобы уменьшить значение  $g(A)$ , применяют различные способы выбора ведущего элемента, препятствующие возрастанию элементов матрицы.

Опишем методы апостериорного анализа ошибок СЛАУ, основанных на обратном анализе ошибок. Пусть заданы две СЛАУ, имеющие одну матрицу коэффициентов  $A$  (матрицы жесткости), первая система

$$Au = b_{init} \quad (4)$$

имеет вектор  $b_{init}$  правых частей, для второй системы

$$Az = b_{new} \quad (5)$$

сформируем вектор правых частей  $b_{new}$  таким образом, чтобы полученная система имела известное решение.

Выделим два варианта формирования систем, для которых применим обратный анализ ошибок [13, 14].

В первом варианте, решив систему (4) численным методом  $K$ , мы находим решение  $u_{num}$ , затем, подставив это вектор решений в левую часть системы (4), вычисляем вектор  $b_{new} = Au_{num}$ . Таким образом, мы строим систему линейных алгебраических уравнений вида (5), точным решением которой является вектор численного решения системы (4)  $u_{num}$ , в чем можно убедиться простой подстановкой. Далее решим систему вида (5), используя тот же численный метод  $K$  на том же компьютере во время одного сеанса работы с программой, реализующей МКЭ.

В итоге мы вычислим вектор численного решения  $z_{num}$  системы вида (5)  $Az_{num} = b_{new}$ , где  $b_{new} = Au_{num}$ . Норма вектора разности  $\|u_{num} - z_{num}\| \approx \|u_{num} - u\|$ , то есть вектор разности  $u_{num} - z_{num} \approx u - u_{num}$  (вектору ошибки численного метода  $K$ ).

Далее второй вариант обратного анализа ошибки изменяет способ построения правой части СЛАУ. Сформулируем основы этого способа построения. Используя оценки нормы вектора решений СЛАУ, легко получить неравенство  $\|u\| \geq \frac{\|b\|}{\|A\|}$ . Будем сконструировать решение  $z = (z_k)_{k=1,n}$ , компоненты которого

$z_k = \frac{\|b\| r_k(A)}{\|A\|}$ , либо  $z_k = \frac{\|\phi(b)\| r_k(A)}{\|\psi(A)\|}$ . Вид функций  $\phi$ ,  $\psi$ ,  $r_k$  выбирается так, чтобы после подстановки этих функций в СЛАУ норма правой части была либо равна норме правой части, либо мажорировала ее. Например, если компоненты вектора решений положить равными

$$z_k = \left( \frac{\max_i |b_i|}{\max_i \sum_{j=1}^n a_{ij}} \right),$$

то после подстановки в систему (5) компоненты вектора правой части этой системы примут вид

$$b_{new,k} = \max_i |b_{init,i}| \left( \frac{\sum_{j=1}^n a_{ij}}{\max_i \sum_{j=1}^n a_{ij}} \right). \quad (6)$$

Тогда для систем (4), (5) совпадут матрицы коэффициентов и будут равны нормы правых частей. Все тестовые примеры подтвердили оценки для ошибок численных решений этих систем

$$\|u - u_{num}\| \leq \|z - z_{num}\|. \quad (7)$$

Обратный анализ по Уилкинсону	Численное решение $u_{num}$ системы $(A + \Delta A)u = b_{init}$ представлено как решение возмущенной системы $(A + \Delta A)u = b + \Delta b = b_{new}$	Оценка ошибки численного решения $\frac{\ u - u_{num}\ }{\ x\ } \leq \frac{cond(A)}{1 - \ A^{-1}\  \ \Delta A\ } \cdot \left( \frac{\ \Delta A\ }{\ A\ } + \frac{\ \Delta b\ }{\ b\ } \right)$
Обратный анализ — метод I	Численное решение $u_{num}$ системы $Au = b$ представлено как точное решение возмущенной системы $Az = b_{new}$ , где $b_{new} = Au_{num}$	Решаются численно методом $K$ системы уравнений $Au = b$ и $Az = b_{new}$ . Оценка ошибки численного решения исходной системы $\ u - u_{num}\  \approx \ u_{num} - z_{num}\ $ .
Обратный анализ — метод II	Строится система линейных уравнений $Az = b_{new}$ с известным решением, $z_k = \left( \frac{\max_l  b_l }{\max_i \sum_{j=1}^n a_{ij}} \right)_k$ , $b_{new,k} = \max_l  b_{init,l}  \left( \frac{\sum_{j=1}^n a_{ij}}{\max_i \sum_{j=1}^n a_{ij}} \right)_k = \left[ \max_l  b_{init,l}  \cdot \alpha_i \right]_{i=1,\dots,n}$ , нормы правых частей этих систем равны	Решаются численно методом $K$ системы уравнений $Au = b$ и $Az = b_{new}$ . Оценка ошибки численного решения исходной системы $\ u - u_{num}\ _\infty \leq \ z - z_{num}\ _\infty$ .

В таблицах 1–2 показаны оценки ошибок узловых перемещений (мм), обусловленных влиянием ошибок округления в задачах, полученных тремя методами для рефлектора наземной зеркальной антенны спутниковой связи (Задача 1), блока механического устройства регулировки положения рефлектора зеркальной антенны космического базирования (Задача 2) [5], [6].

Таблица 1: Ошибки при численном анализе рефлектора наземной антенны, мм

esize, мм	n	Ошибка по методу		
		Уилкинсона	I	II
200	108540	$2,235 \cdot 10^6$	$3,761 \cdot 10^{-11}$	$9,212 \cdot 10^{-10}$
150	169560	$5,436 \cdot 10^6$	$1,117 \cdot 10^{-10}$	$1,185 \cdot 10^{-9}$
100	339804	$1,993 \cdot 10^7$	$1,322 \cdot 10^{-10}$	$3,289 \cdot 10^{-9}$
80	513576	$6,453 \cdot 10^7$	$1,532 \cdot 10^{-10}$	$5,358 \cdot 10^{-9}$
60	869328	$2,708 \cdot 10^8$	$4,429 \cdot 10^{-10}$	$9,829 \cdot 10^{-9}$
40	1909548	$8,938 \cdot 10^8$	$1,238 \cdot 10^{-9}$	$2,321 \cdot 10^{-8}$

Из приведенных таблиц с результатами расчетов видно, что вычисления оценки ошибок численных решений, полученные по методам 1 и 2 существенно точнее, чем оценки по классической формуле Уилкинсона. Отличие этих методов, которое обеспечило такой результат, состоит в том, что в этих методах мы более точно оцениваем отклонение точного решения, что соответствует результатам [3].

Таблица 2: Ошибки при численном анализе блока механического устройства регулировки, мм

<i>esize</i> , мм	<i>n</i>	Ошибка по методу		
		Уилкинсона	I	II
20	180875	$1,925 \cdot 10^{10}$	$6,342 \cdot 10^{-5}$	$1,031 \cdot 10^{-2}$
10	4221 456	$4,439 \cdot 10^{11}$	$8,345 \cdot 10^{-5}$	$1,500 \cdot 10^{-2}$
5	312212	$1,051 \cdot 10^{11}$	$1,144 \cdot 10^{-4}$	$2,504 \cdot 10^{-2}$
3	472130	$9,568 \cdot 10^{11}$	$4,821 \cdot 10^{-4}$	$3,071 \cdot 10^{-2}$

## Заключение

Обычно считается, что главное преимущество обратного анализа ошибок в том, что, применение его к хорошо обусловленной задаче с небольшой по величине обратной ошибкой приводит к малой величине прямой ошибки (глобальная ошибка в данном контексте). Нахождение некоторого множества конечного диаметра, которому принадлежит точное решение (хотя бы при достаточно малых погрешностях) и оценка расстояния от приближенного решения до его границы [3] позволяет уменьшить влияние некорректности обратного анализ ошибок, проявляющуюся в отсутствии устойчивости. Это подтверждает тот факт, что обратный анализ ошибок принадлежит к классу обратных задач, и может быть охарактеризован как некорректно поставленная задача.

## Список литературы

- [1] Wilkinson J. Rounding errors in algebraic processes. London. Her Majesty's Stationary Office. 1963. 161 p.
- [2] Reich, S. 1999. Backward error analysis for numerical integrators // SIAM Journal on Numerical Analysis, P. 1549–1570
- [3] Дорофеев К.Ю., Титаренко В.Н., Ягола А.Л. Алгоритмы построения апостериорных погрешностей решений для некорректных задач // ЖВММФ. 2003. Т. 43, № 1. С. 12–25.
- [4] Ю.М. Королев, А. Г. Ягола. Оценка погрешности в линейных обратных задачах при наличии априорной информации // Вычислительные методы и программирование. 2012. Т. 13. С. 14–18.
- [5] Doronin S. V., Rogalev A. N. Error in Calculating the Extension of a Plate with a Circular Notch // Russian Engineering Research, 2015, Vol. 35, No. 4, P. 235–238.
- [6] Рогалев А.Н., Доронин С.В., Рейзмунт Е.М. Опыт решения и постановки обратных задач конструкционной прочности // Сборник «Международная конференция «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики — 2015». Новосибирск: Академиздат: 2015. с. 96.

*Алексей Николаевич Рогалев — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института  
вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск;  
e-mail: rogalyov@ict.krasn.ru.*

*Дата поступления — 31 мая 2017 г.*