ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

11-2000-93

На правах рукописи
УДК 519.624.2; 519.234.2

СОЛОВЬЕВ
Алексей Геннадьевич

МЕТОДЫ ПОВЫШЕНИЯ ТОЧНОСТИ ПРИБЛИЖЕННЫХ РЕШЕНИЙ В НЕКОТОРЫХ ЗАДАЧАХ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Специальность: 01.01.07 — вычислительная математика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Дубна 2000

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований

Научный руководитель:

заслуженный деятель науки, доктор физико–математических наук, профессор	*Жидков Евгений Петрович*

Официальные оппоненты:

доктор физико–математических наук, профессор	*Абрамов Александр Александрович*
кандидат физико–математических наук, доцент	*Ланеев Евгений Борисович*

Ведущая организация:

НИВЦ МГУ им. М.В.Ломоносова

Защита диссертации состоится " "____________ 2000 г. в ________ на заседании Диссертационного совета Д047.01.04 при Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований (г. Дубна Московской области).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Объединенного института ядерных исследований.

Автореферат разослан " "____________ 2000 г.

Ученый секретарь
Диссертационного совета
кандидат физико – математических наук *З.М.Иванченко*

Общая характеристика работы

Актуальность темы

В связи с широким применением электронно-вычислительной техники для решения научных и технических задач остро встал вопрос создания новых численных методов и алгоритмов. При разработке того или иного вычислительного алгоритма важным является вопрос о точности получаемого решения. Требование обеспечить бо́льшую точность, как правило, приводит к существенному увеличению объема вычислительной работы. Это обстоятельство делает актуальным поиск экономичных подходов к созданию численных алгоритмов, позволяющих получать решение с заданной точностью.

Значительный вклад в развитие численных методов внесли работы А.Н.Тихонова, А.А.Самарского, Г.И.Марчука.

В диссертации, во-первых, рассматривается проблема определения собственных значений и собственных функций краевой задачи для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка на полуоси. Рассматривается также краевая задача на полуоси с неоднородным условием на левом конце. Во-вторых, изучается задача об оценке неизвестной плотности распределения случайной величины по эмпирическим данным.

Большое количество современных физических задач приводит к проблеме определения собственных значений и собственных функций дифференциальных операторов. Спектральный анализ дифференциальных операторов является основным математическим аппаратом при решении многих задач квантовой механики. При этом запросы квантовой механики требуют детального исследования так называемых сингулярных дифференциальных операторов, в том числе, операторов, заданных на бесконечном интервале.

Наряду с аналитическим исследованием таких задач особую актуальность приобрел вопрос создания методов их численного решения. При численном исследовании задач с сингулярными дифференциальными операторами встает проблема переноса краевых условий из особых точек. В настоящее время эта процедура хорошо разработана и широко используется. Вопросы, касающиеся переноса краевых условий из особых точек, изучаются в работах А.А.Абрамова, Е.С.Биргера, Н.Б.Конюховой и ряда других авторов.

При решении задачи на полуоси краевое условие на бесконечности заменяют некоторым краевым условием в достаточно удаленной конечной точке. После этого вместо исходной задачи на полубесконечном интервале решают полученную краевую задачу на конечном отрезке. Для этого, как правило, используется какой-либо из численных методов, которые для регулярных краевых задач достаточно хорошо развиты.

В результате вместо искомого решения сингулярной задачи на полуоси получают приближенное решение задачи на конечном отрезке. Выбрав подходящий численный метод, решение последней можно получить с требуемой точностью. Поэтому часто погрешность, с которой удается найти решение исходной задачи, определяется именно длиной отрезка интегрирования, на котором ставится аппроксимирующая ее задача. При правильном переносе краевых условий эта погрешность стремится к нулю при увеличении отрезка.

С увеличением отрезка интегрирования, однако, резко возрастают объем вычислительной работы и счетное время. Поэтому разработка экономичных методов численного решения сингулярных краевых задач на бесконечном интервале является актуальной проблемой.

Задача об оценке неизвестной плотности распределения случайной величины на основании результатов ее наблюдений также имеет весьма большое практическое значение. Так, при изучении самых разных физических систем получают совокупность экспериментальных (полученных в результате опыта) значений некоторой случайной величины, и часто требуется на основании полученных эмпирических данных построить распределение этой величины. Такого рода задачи часто возникают и при моделировании реальных физических систем методом Монте–Карло.

При оценке неизвестной плотности тем или иным методом может иметь место сходимость со скоростью не выше чем $n^{-1/2}$, где n — число использующихся для этого наблюдений. Это естественный факт, так как в оценке значения искомой плотности в некоторой точке принимает участие не вся выборка, а лишь те наблюдения, которые сосредоточились в некоторой окрестности этой точки. В связи с этим актуальным является вопрос о повышении скорости сходимости оценки к искомой плотности.

Отметим, что пути повышения точности решений в математической литературе обсуждались весьма широко. В описываемых в диссертации методах используется идея хорошо известного метода Ричардсона. В монографии Г.И.Марчука и В.В.Шайдурова можно найти дальнейшее развитие этого метода. Суть его состоит в следуюшем. Как известно, погрешность численного решения обычно пропорциональна некоторой степени параметра дискретизации, например, шага сетки используемой разностной схемы. Для достижения большей точности, следовательно, нужно либо уменьшать этот параметр, либо пользоваться другой, более точной схемой. Рисардсон поставил принципиально новую проблему о повышении точности численного решения линейных задач. Он привел некоторые схемы реализации алгоритмов, в которых используются численные решения с различными параметрами аппроксимации. Оказалось, что линейная комбинация этих решений при определенных условиях дает точность большего порядка.

Цель работы

Диссертация посвящена разработке методов повышения точности решений поставленных выше задач:

1) краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка на полуоси (в том числе, рассматривается проблема определения собственных значений и собственных функций таких задач);
2) задачи об оценке неизвестной плотности распределения случайной величины по эмпирическим данным.

Научная новизна

В диссертации разработаны и строго обоснованы методы повышения точности приближенных решений поставленных задач, основанные на идее Ричардсона о комбинировании решений.

Для рассматриваемой краевой задачи на полуоси для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка с особой точкой на бесконечности предложен метод повышения точности ее численных решений. Метод основан на комбинировании решений задач на различных конечных отрезках, аппроксимирующих исходную задачу на полуоси. Сначала получено представление приближенного решения (решения задачи на конечном отрезке) в виде суммы точного (искомого) решения и погрешности, вызванной переносом краевого условия из бесконечности. Найдена асимптотика этой погрешности при устремлении длины отрезка интегрирования к бесконечности. Затем, с использованием полученной асимптотики, построена формула, по которой производится уточнение: линейная комбинация двух решений на различных отрезках, дает уточненное решение. Получена оценка погрешности уточненного решения.

Для случая, когда имеется более чем два приближенных решения, также разработана и обоснована аналогичная процедура уточнения. Доказано, что погрешность уточненного решения в этом случае тем меньше, чем большее количество приближенных решений используется для его построения.

Применимость такого подхода (экстраполяции по длине отрезка интегрирования) строго обоснована и для проблемы определения собственных значений и собственных функций краевой задачи на полуоси для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка с регулярной особенностью в нуле и иррегулярной особенностью на бесконечности. Для этой задачи, кроме того, доказана теорема существования собственных значений и собственных функций.

Разработанный метод позволяет добиться значительного повышения точности без существенного увеличения длины отрезка. Кроме того, он практически не требует для этого дополнительных затрат счетного времени, поскольку решения на различных отрезках, как правило, уже имеются, нужно только вычислить их линейную комбинацию.

Для задачи об оценке неизвестной плотности распределения случайной величины по эмпирическим данным разработан и строго обоснован метод экстраполяции по числу независимых наблюдений, использующихся для оценки. Получено представление эмпирической (построенной по выборке) плотности в виде суммы искомой плотности и погрешности, содержащей случайную и систематическую составляющие. Найдена асимптотика этой погрешности при больших объемах выборки. С использованием этой асимптотики построена формула, позволяющая повысить точность эмпирической плотности: линейная комбинация оценок, построенных по различным независимым выборкам, позволяет сократить главный член асимптотики систематической компоненты погрешности и в результате добиться более высокой точности оценки. Решен вопрос о построении доверительной области для искомой плотности.

Метод дает возможность заметно повысить точность оценки искомой плотности практически без дополнительных затрат счетного времени, поскольку подобные оценки часто делаются по нескольким независимым выборкам, а при уточнении лишь используются уже имеющиеся эмпирические плотности.

Практическая ценность

Разработанные методы повышения точности приближенных решений краевых задач на полуоси для обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка тестировались в ряде модельных задач, что показало их высокую эффективность (точность численных решений повышалась на несколько порядков без существенного увеличения затрат счетного времени).

Строгий подход к созданию таких методов дает качественную основу для их развития и применения в более сложных задачах. Представляется перспективным применение разработанной методики (при соответствующей ее модификации) для уточнения приближенных решений краевых задач на полуоси для систем обыкновенных дифференциальных уравнений (в том числе, нелинейных). Такие задачи встречаются, например, в физике конденсированных сред (в том числе, в различных моделях полярона).

Разработанный метод повышения точности оценки плотности распределения случайной величины по эмпирическим данным представляет практическую ценность благодаря своей универсальности. Его можно применять как при обработке экспериментальных данных, так и при моделировании реальных физических процессов на ЭВМ.

На основе этого метода была создана программа, позволяющая по заданным выборкам строить эмпирические плотности, комбинированием их получать уточненную эмпирическую плотность, а также расcчитывать доверительный интервал.

С использованием этой программы были получены, в частности, оценки энергетического спектра нейтронов, рождающихся в упругих и неупругих адрон-ядерных столкновениях внутри квазибесконечного блока природного урана, облучаемого пучком протонов. Применение эктраполяции по числу наблюдений позволило существенно сократить число разыгрываемых событий и счетное время. Было подобрано оптимальное число событий, при котором рассчитываемый спектр лежит в заданных доверительных границах.

Апробация работы

Полученные в диссертации результаты докладывались на семинарах вычислительной и прикладной мететатики ЛВТА ОИЯИ, на семинаре в институте математики ПАН, а также на следующих конференциях:

1. Computational Modelling and Computing in Physics.

   ОИЯИ, Дубна, 16–21 сентября 1996 г.

2. Первая открытая научная конференция молодых ученых и специалистов ОИЯИ.

ОИЯИ, Дубна, 24–26 февраля 1997 г.

3. XXXIII научная конференция факультета физико-математических и естественных наук.

   РУДН, Москва, 20–24 мая 1997 г.

4. XXXIV научная конференция факультета физико-математических и естественных наук.

   РУДН, Москва, 19–22 мая 1998 г.

5. Modern Trends in Computational Physics.

   ОИЯИ, Дубна, 15–20 июня 1998 г.

Структура и объем диссертации

Диссертация объемом 108 страниц состоит из введения, четырех глав и заключения. Содержит 7 таблиц, 9 рисунков и список литературы из 62 ссылок.

Публикации

По материалам диссертации опубликовано 6 работ.

Содержание диссертации

Во введении обосновывается актуальность темы и приводится краткое содержание диссертации.

Первая глава, написанная по материалам работ [1, 2, 3], посвящена разработке метода повышения точности приближенного решения краевой задачи на полуоси для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка с особой точкой на бесконечности.

В § 1.1 ставится краевая задача на полуоси $[x_0, +\infty)$, указываются условия, при которых она имеет единственное решение. С использованием известной асимптотики этого решения при больших значениях аргумента краевое условие переносится из бесконечности в некоторую достаточно удаленную конечную точку R, после чего ставится задача на конечном отрезке $[x_0, R]$.

В § 1.2 доказываются существование и единственность решения задачи на отрезке $[x_0, R]$, а также представление этого решения в виде суммы точного (искомого) решения и погрешности, вызванной заменой исходной задачи на полуоси задачей на конечном отрезке. Получена асимптотика этой погрешности при $R \to \infty$.

В § 1.3 с использованием асимптотики погрешности приближенного решения (решения задачи на отрезке $[x_0, R]$) строится уточненное решение — линейная комбинация двух решений задачи на различных отрезках. Оценка погрешности уточненного решения показывает, что оно приближает искомое решение с погрешностью, существенно меньшей, чем погрешности каждого из решений по отдельности.

В § 1.4 показано, как можно продолжить процесс уточнения, когда имеется большее количество решений задачи на конечном отрезке. Доказано, что погрешность уточненного решения в этом случае стремится к нулю с ростом числа имеющихся приближенных решений.

В § 1.5 применение экстраполяции по R иллюстрируется на модельном примере. Представленные численные данные наглядно показывают эффективность разработанного метода повышения точности.

Вторая глава, написанная по материалу работы [4], посвящена построению метода повышения точности определения собственных значений и собственных функций краевой задачи на полуоси для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка с регулярной особенностью в нуле и иррегулярной особенностью на бесконечности.

В § 2.1 ставится краевая задача на бесконечном интервале $[0, +\infty)$ с особенностями на обеих границах этого интервала. Строго обосновывается существование собственных значений и собственных функций для этой задачи.

В § 2.2 с использованием известной асимптотики собственной функции при больших значениях аргумента краевое условие на бесконечности заменяется краевым условием вида $y'(R) + a(R)y(R) = 0$ в некоторой достаточно удаленной точке R, после чего ставится задача на конечном отрезке $[0, R]$. Доказывается существование собственных значений и собственных функций этой задачи при условии, что R достаточно велико.

В § 2.3 получается представление собственного значения задачи на отрезке $[0, R]$ в виде суммы точного (искомого) собственного значения и погрешности, вызванной заменой исходной задачи на полуоси задачей на конечном отрезке. Получена асимптотика этой погрешности при $R \to \infty$.

В § 2.4 с использованием асимптотики погрешности приближенного собственного значения (собственного значения задачи на отрезке $[0, R]$) строится уточненное собственное значение — линейная комбинация двух собственных значений, полученных при решении задачи на различных отрезках. Оценка погрешности уточненного собственного значения показывает, что оно приближает искомое собственное значение с погрешностью, существенно меньшей, чем погрешности каждого из собственных значений по отдельности.

В § 2.5 обосновывается аналогичный метод для повышения точности собственных функций. Сначала выводится представление собственной функции задачи на отрезке $[0, R]$ в виде суммы точной собственной функции и погрешности, вызванной заменой исходной задачи задачей на конечном отрезке, и получается асимптотика этой погрешности. Затем строится уточненная собственная функция — линейная комбинация двух собственных функций, полученных при решении задачи на различных отрезках.

В § 2.6 рассматривается случай, когда в точке R поставлено краевое условие $y(R) = 0$. Для этого случая выписаны разложения для собственных значений и собственных функций, а также формулы для их уточнения.

В § 2.7 показывается, как можно продолжить процесс уточнения, когда задача на конечном отрезке решается более чем два раза. Доказано, что погрешности уточненных собственного значения и собственной функции в этом случае стремятся к нулю с ростом числа имеющихся приближенных собственных значений и собственных функций.

В § 2.8 эффективность метода повышения точности иллюстрируется на примере определения собственных значений энергии и радиальных волновых функций атома водорода.

Третья глава, написанная по материалам работ [5, 6], посвящена разработке метода повышения точности оценки неизвестной плотности распределения действительной непрерывной случайной величины по ее наблюдениям.

В § 3.1 определяется способ оценки неизвестной плотности по имеющейся выборке — оценки Парзена–Розенблатта. Описываются также другие используемые для этого методы.

В § 3.2 выводится представление эмпирической плотности в виде суммы точной (искомой) плотности и погрешности, которая тем меньше, чем больше число независимых наблюдений n. Получена асимптотика этой погрешности при больших n, показывающая сходимость эмпирической плотности к искомой при $n \to \infty$.

В § 3.3 с использованием асимптотики погрешности эмпирической плотности строится уточненная оценка неизвестной плотности. Для этого используются две независимые серии наблюдений. По ним, во-первых, строятся две оценки искомой плотности — по каждой выборке отдельно, и, во-вторых, строится оценка по объединенной выборке. Определенная линейная комбинация всех трех оценок при $n \to \infty$ сходится к искомой плотности быстрее, чем каждая из этих оценок по отдельности.

В § 3.4 решается вопрос о построении доверительной области для теоретической плотности.

В § 3.5 рассматриваются некоторые вопросы оптимизации. Оптимальным образом выбирается ядро оценки Парзена–Розенблатта. Изучается также вопрос о выборе начального шага.

В § 3.6 применение экстраполяции по числу наблюдений иллюстрируется на примере оценки плотности по выборке из нормального распределения. Представленные численные данные наглядно иллюстрируют эффективность разработанного метода.

Четвертая глава, написанная по материалу работы [6], посвящена оценке энергетического спектра нейтронов в моделируемых электроядерных установках.

В § 4.1 описывается рассматриваемая установка, ставится задача об оценке спектра нейтронов и приводится краткое описание метода ее решения, который был разработан в третьей главе.

В § 4.2 даются рекомендации о преобразовании случайной величины, которое может быть полезно для более гладкой оценки искомого спектра.

В § 4.3 делается оценка энергетического спектра нейтронов. Сравнение получаемых предложенным методом оценок спектра с ранее полученными гистограммами выявило ряд преимуществ такого подхода перед гистограммированием и показало его высокую эффективность при решении подобных задач.

В заключении приведены основные результаты работы.

Результаты, выносимые на защиту

В диссертации рассмотрен и решен ряд вопросов, связанных с повышением точности:

1) численного решения сингулярных краевых задач для обыкновенных дифференциальных операторов второго порядка на полуоси (в том числе, численного определения собственных значений и собственных функций таких задач);
2) оценки неизвестной плотности распределения случайной величины по эмпирическим данным.

Получены следующие результаты.

1. Разработан и строго обоснован *метод повышения точности приближенных решений краевой задачи на полуоси для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка с особой точкой на бесконечности.* Метод основан на идее комбинирования решений краевой задачи на различных конечных отрезках, аппроксимирующей исходную сингулярную задачу на полуоси.
2. Аналогичная идея комбинирования решений положена в основу *метода повышения точности определения собственных значений и собственных функций краевой задачи на полуоси для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка с регулярной особенностью в нуле и иррегулярной особенностью на бесконечности.* Доказана применимость такого подхода и в этом случае.

3. Для поставленной задачи *доказана теорема существования собственных значений и собственных функций.*
4. Разработан и обоснован *метод повышения точности оценки неизвестной плотности распределения действительной непрерывной случайной величины по эмпирическим данным*, заключающийся в экстраполяции по числу наблюдений.
5. Как применение метода повышения точности оценки плотности по эмпирическим данным, были построены *оценки энергетического спектра нейтронов в некоторых моделируемых электроядерных установках.* Было подобрано оптимальное число событий, при котором рассчитываемый спектр лежит в заданных доверительных границах.

Работы, положенные в основу диссертации

1. *Жидков Е.П., Соловьев А.Г.* Повышение точности приближенных решений краевой задачи на полупрямой. // Proceedings of the 9th International Conference "Computational Modeling and Computing in Physics“, с. 321–326, Дубна: ОИЯИ, 1997; Сообщение ОИЯИ **Р11-96-153**, Дубна: ОИЯИ, 1996.
2. *Жидков Е.П., Соловьев А.Г.* Уточнение приближенных решений краевой задачи на полупрямой. // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1997. Т. 37. N 11. С. 1340–1344; Препринт ОИЯИ **Р11-96-480**, Дубна: ОИЯИ, 1996.
3. *Жидков Е.П., Соловьев А.Г.* Алгоритм численного решения краевой задачи на полупрямой. // Труды Первой открытой научной конференции молодых ученых и специалистов ОИЯИ, с. 237–241,

Дубна: ОИЯИ, 1997; Препринт ОИЯИ **Р11-97-62**, Дубна: ОИЯИ, 1997.

4. *Жидков Е.П., Соловьев А.Г.* Повышение точности определения собственных значений и собственных функций краевой задачи на полуоси. // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1999. Т. 39. N 7. С. 1100–1120; Препринт ОИЯИ **Р11-98-69**, Дубна: ОИЯИ, 1998.
5. *Жидков Е.П., Соловьев А.Г., Соснин А.Н.* Повышение точности оценки неизвестной плотности распределения случайной величины по эмпирическим данным. Препринт ОИЯИ **Р11-99-329**, Дубна: ОИЯИ, 1999; Направлено в журнал “Nuclear Instruments and Methods”.
6. *Барашенков В.С., Жидков Е.П., Соловьев А.Г., Соснин А.Н.* Повышение точности оценки энергетического спектра нейтронов в моделируемых электроядерных установках. Препринт ОИЯИ **Р2-2000-16**, Дубна: ОИЯИ, 2000.

Рукопись поступила в издательский отдел
25 апреля 2000 года.

Макет Н.А.Киселевой

Подписано в печать 26.04.2000
Формат 60 × 90/16. Офсетная печать. Уч.-изд. листов 1,31
Тираж 100. Заказ 52000

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
Дубна Московской области