

Фильтрация численных данных как средство получения сверхэффекта от параллельных вычислений

В.П. Житников, Н.М. Шерыхалина, Т.Р. Хадимуллин

Рассматривается возможность использования результатов нескольких вычислительных процессов при решении одной задачи с различными значениями параметра дискретизации (например, числа узловых точек сетки). Предложена методика фильтрации численных результатов, основанная на идентификации математической модели погрешности по результатам вычислений. На примере различных вычислительных задач показано, что благодаря использованию результатов, полученных параллельно, возможно увеличение точности на несколько десятичных порядков. Увеличение точности при фильтрации позволяет выделить погрешность округления и определить закон ее накопления при увеличении числа арифметических операций.

1. Введение

Говоря об эффекте при использовании параллельных вычислений, будем иметь в виду получение данных, более точных, чем данные каждого отдельного процесса. Сверхэффект означает, что при одном процессе такое же повышение точности могло бы быть теоретически достигнуто при затратах времени больших (с учетом распараллеливания), чем при применении фильтрации. Для более полного использования возможностей многопроцессорной компьютерной системы предполагается возможность распараллеливания каждого отдельного процесса.

Другим вопросом, возникающим при применении суперкомпьютеров является необходимость контроля погрешности округления, которая может накапливаться при увеличении числа арифметических операций и свести на нет эффект от увеличения мощности компьютерной системы. Применение различных фильтров для решения задачи идентификации, как показано ниже, позволяет выделить погрешность округления практически без искажения.

2. Постановка задачи

Предположим, что вычислено несколько значений некоторого параметра решаемой задачи $z_{n_i}^{(0)} = z_{n_i}$, $i = 1, \dots, I$ при разном числе параметра дискретизации (например, числа узловых точек сетки, слагаемых суммы и т.п.) $n = n_i$. Каждое из вычисленных значений можно представить как сумму неизвестного точного значения искомого параметра и погрешности вычисления. Задачей является получение более (или наиболее) точного значения искомого путем комбинации известных значений. Таким образом, речь идет о постпроцессорной обработке.

Рассмотрим априорную модель погрешности вычисления некоторым численным методом некоторой величины z , которая представляется в виде суммы нескольких слагаемых $z_n - z = c_1 f_1(n) + c_2 f_2(n) + \dots + c_L f_L(n) + \Delta(n)$, (1) где z – точное значение; z_n – приближенный результат, полученный при числе узловых точек (или числе слагаемых суммы), равном n ; $f_j(n)$ – некоторые известные функции; c_j – неизвестные коэффициенты.

$\Delta(n)$ может состоять из не вошедших в сумму слагаемых, остаточного члена, погрешности округления и других составляющих, порожденных несовершенством численного алгоритма и его программной реализации. Существенно то, что величина $\Delta(n)$ не имеет априорной оценки, и предполагается возможным возрастание этой величины при возрастании n .

В частности, при $f_j(n) = n^{-k_j}$ (1) принимает вид

$$z_n - z = c_1 n^{-k_1} + c_2 n^{-k_2} + \dots + c_L n^{-k_L} + \Delta(n), \quad (2)$$

где k_1, \dots, k_L – произвольные известные действительные числа ($k_1 < k_2 < \dots < k_L$).

n	z_n	$z_n^{(1)}$	$z_n^{(2)}$	$z_n^{(3)}$...
10	z_{10}	—	—	—	
20	z_{20}	$z_{20}^{(1)}$	—	—	
40	z_{40}	$z_{40}^{(1)}$	$z_{40}^{(2)}$	—	
80	z_{80}	$z_{80}^{(1)}$	$z_{80}^{(2)}$	$z_{80}^{(3)}$	
...					

Оценка погрешности проводится по правилу Рунге, т.е.

$$\Delta_{20}^{(0)} = z_{20} - z_{20}^{(1)}, \Delta_{40}^{(1)} = z_{40}^{(1)} - z_{40}^{(2)}, \Delta_{80}^{(2)} = z_{80}^{(2)} - z_{80}^{(3)}, \dots \quad (7)$$

Недостатком этого метода является отсутствие обоснованности полученных оценок в связи с неопределенностью $\Delta(n_i)$, поскольку оценки (7) представляют собой частные случаи (6).

3.2 Визуализация результатов обработки численных данных

Наглядность представления результатов при оценке погрешности играет важную роль для принятия решения о доверии оценке.

Результаты оценки погрешности, удобно представлять на графике в виде зависимости $-\lg \delta$ (десятичного логарифма оценки относительной погрешности), т.е. точности, выраженной в количестве точных десятичных знаков, от десятичного логарифма n с разных точек зрения. Во-первых, при логарифмической шкале становятся различимыми погрешности разных порядков. Во-вторых, степенные функции представляются на таком графике прямыми. В третьих, десятичные логарифмы удобны для определения десятичных порядков величин. В реальном случае отличие кривой, соответствующей результату определенной фильтрации, от прямой свидетельствует о влиянии других составляющих погрешности.

На рис. 1 представлены результаты обработки данных, полученных при вычислении второй разностной производной функции $y = \cos x$ при $x = 0.5$

$$\frac{d^2 y}{dx^2}(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} + O(h^2).$$

При этом шаг сетки $h = 1/n$. По оси ординат отложены десятичные логарифмы относительных погрешностей $\delta = \left| \frac{\Delta_{n_i}^{(j)}}{z_{n_i}^{(j)}} \right|$. Кривые 0 соответствуют погрешности расчетных данных, кривые 1 – 3 результатам первой, второй и третьей фильтрации. Разности значений двух столбцов (1.2.18) при этом представляются системой точек, которую можно условно соединить между собой некоторой кривой или ломаной. Каждая кривая близка к отрезку прямой, если слагаемые в сумме (1) существенно отличаются по величине. Угловый коэффициент каждого отрезка при $f_j(n) = n^{-k_j}$ ($f_j(n_{i-1})/f_j(n_i) = Q^{k_j}$) приближенно равен соответствующему показателю k_j .

На графике располагаются несколько линий, соответствующих порядковому номеру повторной фильтрации. Тем самым, появляется возможность сравнить их взаимное расположение. Это дает возможность заметить несоответствия, неправильность поведения линий.

На рис. 1,а каждая линия имеет два четко выделенных участка. Первый участок имеет наклон, соответствующий показателю степенной функции. Поведение второго участка линий, в отличие от первого, носит хаотический характер, угловой коэффициент приближенно равен -2 . Это связано с преобладанием составляющей погрешности $\Delta(n)$. При этом применение экстраполяции Ричардсона неправомерно, так как она возможна только при преобладании составляющей, имеющей вид степенной функции с определенным показателем.

В диапазоне, где преобладает нерегулярная погрешность, меняющая знак, в качестве оценки погрешности, можно использовать разность пар значений. В экстраполяционной формуле Ричардсона эта разность делится на достаточно большое число $Q^{k_j} - 1$. Поэтому разница приближенного и экстраполированного результатов оказывается малой и оценка по Рунге дает завышенные по точности результаты. С этим связан сдвиг вверх (при увеличении количества

фильтраций) участков линий, соответствующих условию преобладания нерегулярной погрешности. Сравнивая рис. 1,а и 1,б нетрудно заметить, что оценка по Рунге соответствует реальной погрешности в диапазоне, отделенном хотя бы половиной масштабной единицы от уровня нерегулярной погрешности $y=19-2\cdot\lg n$.

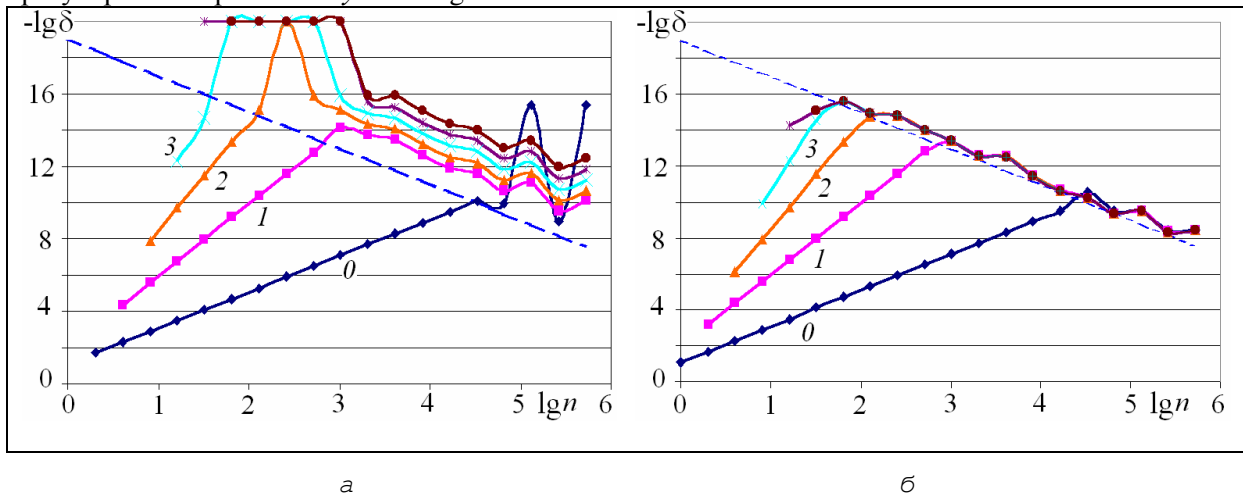


Рис. 1. Оценки погрешности при вычислении второй производной: а – по правилу Рунге; б – сравнение с точным значением. Прямая $y=19-2\cdot\lg n$

3.3 Численная фильтрация

Численной фильтрацией [3] называется последовательное устранение (подавление) компонент погрешности, т.е. определение отфильтрованных последовательностей $z_{n_i}^{(j)}$, $j=1, \dots, L$. Для уравнений (3) фильтрацию можно осуществить путем линейной комбинации результатов

$$z_{n_i}^{(j)} = \alpha_j z_{n_{i-1}}^{(j-1)} + \beta_j z_{n_i}^{(j-1)} = (\alpha_j + \beta_j)z + [\alpha_j f_j(n_{i-1}) + \beta_j f_j(n_i)]c_j^{(j-1)} + \dots \quad (8)$$

Если необходимо сохранить значение z и подавить слагаемое $c_j f_j(n)$, то α_j и β_j определяются из решения системы двух уравнений

$$\alpha_j + \beta_j = 1, \quad \alpha_j f_j(n_{i-1}) + \beta_j f_j(n_i) = 0,$$

$$\alpha_j = -\frac{1}{R_j - 1}, \quad \beta_j = \frac{R_j}{R_j - 1}, \quad \text{где } R_j = \frac{f_j(n_{i-1})}{f_j(n_i)}.$$

Отсюда получаем формулу фильтрации

$$z_{n_i}^{(j)} = z_{n_i}^{(j-1)} + \frac{z_{n_i}^{(j-1)} - z_{n_{i-1}}^{(j-1)}}{R_j - 1}, \quad (10)$$

$$c_l^{(j)} = (\alpha_j R_l + \beta_j) c_l^{(j-1)} = c_l^{(j-1)} \frac{R_j - R_l}{R_j - 1}, \quad l=j+1, \dots, L. \quad (11)$$

В результате фильтрации получается новая последовательность, не содержащая компоненты $f_j(n)$, которая при условии сохранения вида остальных компонент (точнее, первой из оставшихся) может быть подвергнута повторной фильтрации для подавления следующей компоненты. Для сохранения вида компонент достаточно выполнение условия $f_j(n_{i-1})/f_j(n_i) = const$.

Для $f_j(n) = n^{-k_j}$ из этого условия следует $R_j = Q^{k_j}$, $n_j = Q^{j-1} n_1$, при этом каждая из степенных составляющих представляет собой геометрическую прогрессию, а формула (10) совпадает с формулой Ричардсона.

В отличие от правила Рунге, все приближенные значения можно сравнивать с одним числом – эталоном \bar{z} , которое считается наиболее точным (рис. 2,а). Эталон \bar{z} может быть полу-

чен экстраполяцией или другим способом. Разность $\Delta_n = z_n - \bar{z}$ представляет собой оценку погрешности приближенного значения \bar{z} . В этом случае результат расчета с оценкой погрешности представляется в виде интервала $z = \bar{z} \pm \Delta_n$.

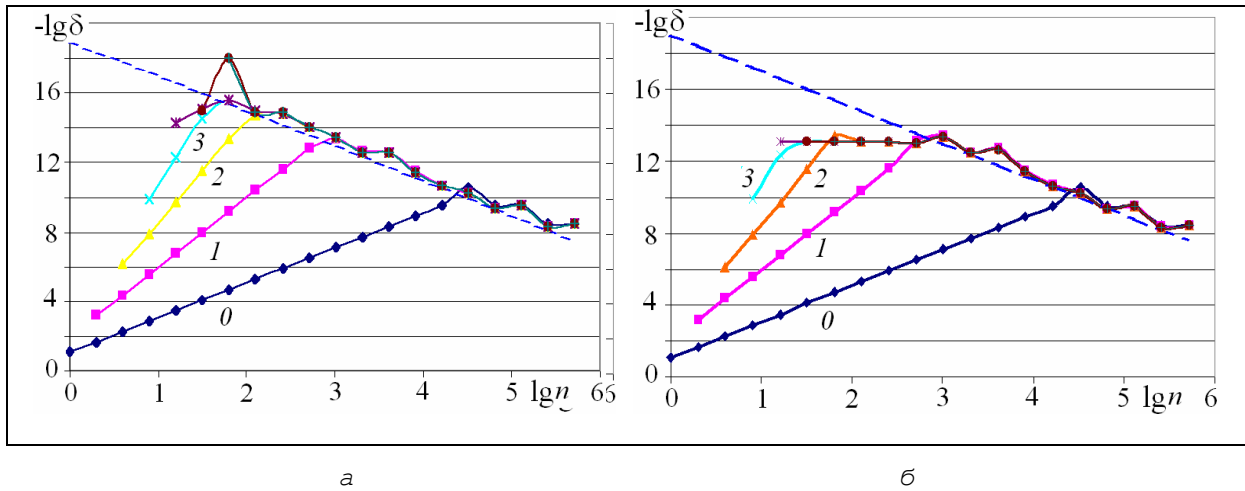


Рис. 2. Оценка погрешности при вычислении второй производной сравнением с эталоном при выборе эталона: а – по результатам оценки по правилу Рунге; б – эталон искусственно заглублен в 13-м разряде

Оценки погрешности зависят от выбора эталона \bar{z} , с которым сравниваются все приближенные значения. Ошибка при выборе эталона приводит к характерной картине: ограничению точности на значении, которое исказило эталон (рис. 2,б). Это может быть использовано для коррекции эталона. Процедура выбора и коррекции эталона является интерактивной, т.е. предполагает участие эксперта. Формализация этой процедуры представляет большие трудности.

3.4 Разрешение неопределенности

При выборе эталона приходится решать некорректную задачу, поскольку каждое уравнение (2) содержит неизвестное искомое z и неизвестную погрешность, состоящую из нескольких компонент. Для избежания неопределенности предлагается разделить этапы оценки погрешности и определения искомого z . Для этого на первом этапе проводится фильтрация по формуле

$$z_{n_i}^{(0)} = z_{n_i} - z_{n_{i-1}}, \quad (12)$$

исключающая из последовательности z_{n_i} неизвестное искомое z .

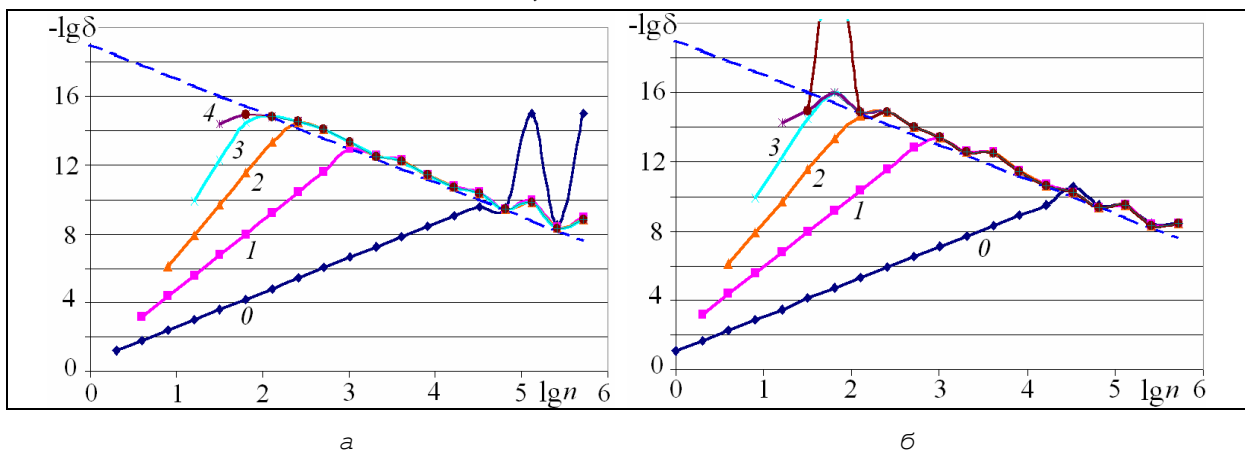


Рис. 3. Результаты двухэтапной оценки погрешности с исключением искомого: а – оценка погрешности; б – сравнение с эталоном

Тем самым, дальнейшая фильтрация по формуле (10) служит оценкой погрешностей, независимой от выбора z и не требующей вычисления разности элементов столбцов матрицы (рис. 3,а). Такая оценка лишена указанного выше недостатка правила Рунге («кажущегося уточнения»), вызванного зависимостью оценки от конкретной закономерности изменения погрешности.

Полученная этим способом оценка позволяет выбрать наилучшие, с точки зрения минимума погрешности (или комбинации близких по погрешности значений), соотношения n_i и $j=j_0$, которые используются для определения приближенного значения $z \approx z_{n_i}^{(j_0)}$ (эталона, см. рис. 2,б). Тем самым, определена формальная процедура (правило) вычисления $z \approx z_{n_i}^{(j_0)}$, что позволяет избежать неопределенности выбора эталона.

4. Решение задачи идентификации

Фильтрация по формуле Ричардсона приводит к увеличению коэффициентов составляющих, следующих за подавляемыми, см. (10).

4.1 Формула фильтрации

Избежать увеличения коэффициентов регулярных составляющих и нерегулярной погрешности можно, если вместо фильтрации применить вычитание регулярных составляющих. Для этого необходимо найти коэффициенты c_j и их оценки погрешности.

Это можно осуществить путем повторной фильтрации, приводящей к последовательности следующего вида

$$z_{n_i}^{(j)} = c_j^{(0)} + c_{j+1}^{(j)} n_i^{-k_{j+1}+k_j} + \dots + c_L^{(j)} n_i^{-k_L+k_j} + n_i^{k_j} \Delta^{(j)}(n_i), \quad i=j+1, \dots, L. \quad (13)$$

Рассмотрим линейную комбинацию вида (8)

$$z_{n_i}^{(j)} = (\alpha_j z_{n_{i-1}}^{(j-1)} + \beta_j z_{n_i}^{(j-1)}) n_i^{k_j-k_{j-1}} = c_{j-1}^{(0)} (\alpha_j + \beta_j) n_i^{k_j-k_{j-1}} + c_j^{(j-1)} \left[\alpha_j \left(\frac{n_i}{n_{i-1}} \right)^{k_j-k_{j-1}} + \beta_j \right] + \dots$$

и потребуем выполнения условий

$$\alpha_j + \beta_j = 0, \quad c_j^{(j-1)} \left[\alpha_j \left(\frac{n_i}{n_{i-1}} \right)^{k_j-k_{j-1}} + \beta_j \right] = c_j^{(0)}. \quad (14)$$

$$\text{Тогда } \alpha_j = -\beta_j = \frac{\gamma_j}{Q^{k_j-k_{j-1}} - 1}, \quad \gamma_j = c_j^{(0)} / c_j^{(j-1)}.$$

Отсюда получим формулу фильтрации

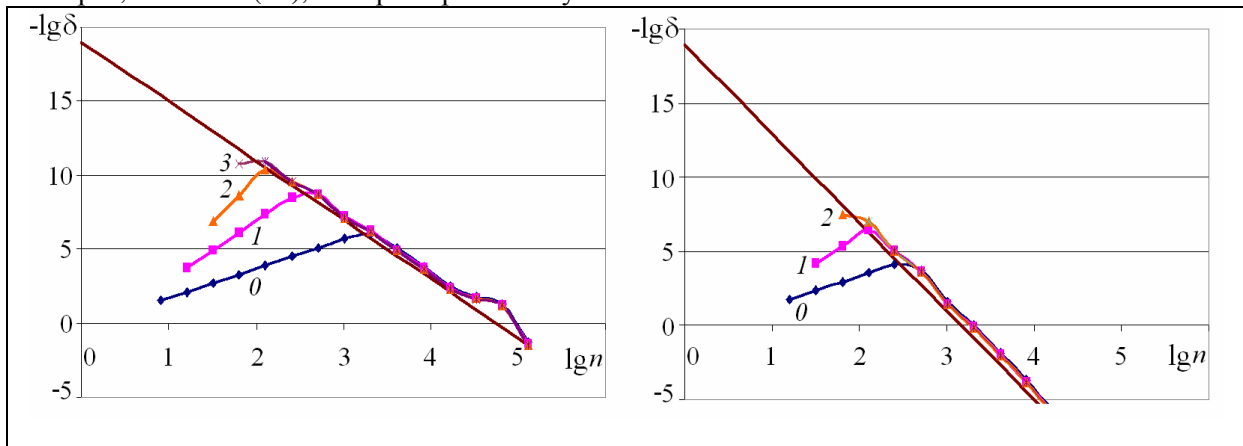
$$z_{n_i}^{(j)} = -\gamma_j \frac{z_{n_i}^{(j-1)} - z_{n_{i-1}}^{(j-1)}}{Q^{k_j-k_{j-1}} - 1} n_i^{k_j-k_{j-1}}, \quad (15)$$

$$c_l^{(j)} = \gamma_j \frac{Q^{k_l-k_{j-1}} - 1}{Q^{k_j-k_{j-1}} - 1} c_l^{(j-1)}, \quad l = j, \dots, L, \quad \gamma_j = \prod_{l=0}^{j-2} \frac{Q^{k_{j-1}-k_l} - 1}{Q^{k_j-k_l} - 1}. \quad (16)$$

4.2 Оценка погрешностей коэффициентов

Найти величину $c_j^{(0)}$ по последовательности (13) и оценку ее погрешности можно предложенным выше двухэтапным способом: фильтрацией по формуле (12) с последующей фильтрацией по формуле Ричардсона и выбором эталона с использованием полученных на первом этапе значений n и j_0 .

На рис. 4 приведены оценки относительных погрешностей коэффициентов c_1, c_2 . Видно, что точность определения коэффициентов ограничивается влиянием погрешности округления, которая, согласно (13), быстро нарастает с увеличением n и t .



а

б

Рис. 4. Результаты идентификации математической модели погрешности (2.1.17): а – коэффициента c_1 ; б – коэффициента c_2

В табл. 1 даны полученные значения коэффициентов c_l и оценки их погрешности. В колонке Δc_l даны оценки, полученные методом фильтрации разностей (12), в колонке $\Delta' c_l$ – разности полученных величин c_l и точных значений (фактические погрешности), в колонке δc_l – относительная оценка погрешности коэффициентов. Эти результаты показывают, что погрешности первых четырех коэффициентов оценивается достаточно хорошо, пятый вычисляется намного точнее, чем это следует из оценки. Видно, что с возрастанием номера коэффициента относительная погрешность увеличивается, что объясняется увеличивающимся влиянием погрешности округления. Грубость оценки пятого коэффициента нетрудно объяснить тем, что согласно рис. 4, получению оптимальной оценки мешает, с одной стороны, погрешность округления, с другой – уменьшение числа доступных для анализа значений при возрастании номера фильтрации.

Таблица 1. Значения коэффициентов c_l и оценки погрешности.

l	c_l	Δc_l	$\Delta' c_l$	δc_l
1	$7.31318801575481 \cdot 10^{-2}$	$-8.97 \cdot 10^{-13}$	$1.71 \cdot 10^{-14}$	$1.23 \cdot 10^{-11}$
2	$-2.43772925817123 \cdot 10^{-3}$	$8.02 \cdot 10^{-11}$	$8.04 \cdot 10^{-11}$	$3.29 \cdot 10^{-8}$
3	$4.35295936960347 \cdot 10^{-5}$	$-1.22 \cdot 10^{-9}$	$-1.29 \cdot 10^{-9}$	$2.81 \cdot 10^{-5}$
4	$-4.78824175567842 \cdot 10^{-7}$	$3.68 \cdot 10^{-9}$	$4.85 \cdot 10^{-9}$	$7.69 \cdot 10^{-3}$
5	$3.68355419645798 \cdot 10^{-9}$	$-7.06 \cdot 10^{-7}$	$1.93 \cdot 10^{-11}$	$1.92 \cdot 10^{+2}$

4.3 Результаты идентификации

После определения L коэффициентов последовательности (2) с оценками их погрешностей соответствующие слагаемые могут быть вычтены из (2), т.е. приходим к последовательности

$$z_{n_i}^{(L)} = z + \Delta^{(L)}(n_i), \quad (17)$$

где $\Delta^{(L)}(n) = \Delta(n) - \Delta_{c_1} n^{-k_1} - \Delta_{c_2} n^{-k_2} - \dots - \Delta_{c_L} n^{-k_L}$; Δ_{c_l} – погрешности вычисления коэффициентов c_l .

Для оценки совместного влияния погрешностей определения коэффициентов на погрешность вычисления производной на рис. 5,а приведены кривые 1 – 4, при этом цифрой 1 обозначена оценка зависимости (17) методом разностей (12), цифрой 2 – отличие значений (17) от точного, цифрами 3 и 4 – соответственно, оценка суммарной погрешности и суммарного влияния фактических погрешностей

$$|\Delta_{c_1}|n^{-k_1} + |\Delta_{c_2}|n^{-k_2} + \dots + |\Delta_{c_L}|n^{-k_L} \quad \text{и} \quad \Delta'_{c_1}n^{-k_1} + \Delta'_{c_2}n^{-k_2} + \dots + \Delta'_{c_L}n^{-k_L}.$$

Видно, что кривые 1 и 2 почти совпадают, хотя оценка по разности несколько «запаздывает», а потому имеет несколько заниженные по точности значения. Кривая 3 более заметно отличается от 4, т.е. оценка также несколько превышает фактическую погрешность, тем не менее, она может быть использована для ограничения «зоны доверия» на диаграмме оценок погрешностей при сравнении с эталоном (рис. 2.1.5 б, кривая «п»).

Следует отметить, что при достаточно больших n влияние степенных слагаемых уменьшается и вычитанием компонент погрешность $\Delta(n)$ в зоне, расположенной ниже кривой «п» может быть идентифицирована практически в исходном неискаженном виде (рис. 2.1.5 б).

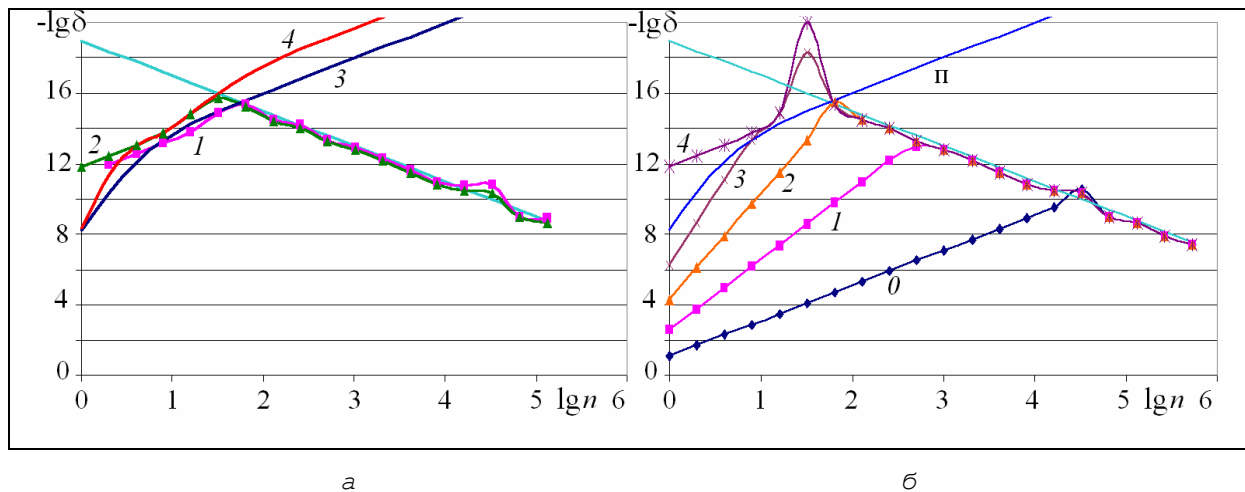


Рис. 5. Результаты идентификации математической модели погрешности (2.1.2): а – суммарные оценки; б – результаты покомпонентного вычитания. Прямая $y=19-2 \cdot \lg n$

Таким образом, в данной работе предложены методы фильтрации, которые могут быть использованы в различных комбинациях для повышения точности результатов нескольких численных решений одной задачи. Показано, что в результате постпроцессорной совместной обработки повышение точности с большим запасом компенсирует затраты на необходимость получения нескольких решений одной задачи. Эти методы могут быть использованы при решении задач математической физики [4].

Литература

1. Тихонов, А.Н., Гончарский, А.В., Степанов, В.В., и др. Численные методы решения некорректных задач. –М.: Наука, 1990. –290 с.
2. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. –М.: Наука, 2004. –636 с.
3. Житников В.П., Шерыхалина Н.М., Поречный С.С. Об одном подходе к практической оценке погрешностей численных результатов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. – 2009. – №3(80). – С. 105-110.
4. Шерыхалина Н. М., Поречный С. С. Моделирование погрешности и численная фильтрация при решении смешанных задач // Вестник УГАТУ (сер. Управление, вычислительная техника и информатика), 2008. Т. 11, №1 (28). –С. 181-188.