УДК 621.9.047
DOI: 10.46548/21vek-2021-1056-0020

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДА ЧИСЛЕННОЙ ФИЛЬТРАЦИИ НА ПРИМЕРЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ ЗНАЧЕНИЙ ПРОИЗВОДНОЙ НЕСЛОЖНОЙ ФУНКЦИИ

Соколова Александра Алексеевна, ассистент кафедры ВМиК
Уфимский Государственный Авиационный Технический университет
(450077, Россия, Уфа, улица Карла Маркса, 12, e-mail: alexandrakrasich@gmail.com)

Аннотация. В настоящее время практически вся математика представлена в электронном виде в вычислительных системах и пакетах, которые являются незаменимыми в решении математических задач. Несмотря на интенсивное применение численных методов для моделирования и проектирования различных систем, а также наличие большого количества математических программных пакетов, проблема оценки вычислительных погрешностей стоит очень остро. В рассматриваемой работе представлен метод фильтрации численных результатов для оценки ошибок и повышения точности. Показано, что предложенный метод позволяет избежать неопределенности и ограничений правил Рунге для оценки ошибок численных данных. На примере вычисления значения производной простой функции в точке было показано, что после обработки вычисленных значений с помощью предложенного метода, их реально уточнить до эталонных за несколько итераций. Рассматриваемая методика ранее применялась для уточнения численных результатов при решении задач со сложными моделями и численно-аналитическими решениями, что привело к непониманию ее практической ценности. Поэтому в данной работе проведено исследование на примере простой функции, демонстрирующее эффективность предлагаемой методики.

Ключевые слова: оценка погрешности, повышение надежности вычислений, постпроцессорная обработка данных.

THE RESEARCH OF THE NUMERICAL FILTERING METHOD BY EXAMPLE CALCULATING THE VALUES OF THE DERIVATIVE OF A SIMPLE FUNCTION

Sokolova Alexandra Alekseevna, assistant
Ufa State Aviation Technological University
(450077, Russia, Ufa, Karl Marx street, 12, e-mail: alexandrakrasich@gmail.com)

Abstract. Currently, almost all mathematics is presented in electronic computing systems and packages, which are indispensable in solving mathematical problems. Despite on the intensive using of numerical methods for modeling and designing various systems, as well as the presence of a large number of mathematical software packages, the problem of computational errors is very acute. A method of filtering numerical results for the solutions of different problems is presented for estimating the errors and increasing the accuracy. It's shown that the proposed method avoids the uncertainty and limitations of the Runge's rule for estimating errors in numerical data. Using the example of calculating the value of the derivative of a simple function at a point, it was shown that after processing the calculated values using the proposed method, they can actually be refined to the reference ones in several iterations. The technique under consideration was previously used for complex modeling tasks, which led to a lack of understanding of its practical value. Therefore, in this work, a study was carried out using a simple function as an example, demonstrating the effectiveness of the proposed technique.

Key words: error estimation, improving the reliability of calculations, data processing.

Введение. Идея использования численной фильтрации в качестве постпроцессорной обработки вычисленных данных была предложена В.П. Житниковым и Н.М. Шерыхалиной [1]. Основная идея методики – составление математической модели погрешности в виде сумм слагаемых некоторого вида и последовательное подавление этих слагаемых. Идея не имеет строгого математического доказательства, методика сугубо эвристическая. Однако ее проверка на многих сложных задачах моделирования показала эффективные результаты [2, 3]. Проведенные исследования показали, что разработанная в [1] методика позволяет получить достоверные оценки численных результатов, и на основании их делать практические выводы о моделируемых явлениях. Применение технологии фильтрации численных результатов позволяет делать эти выводы с высокой точностью.

К сожалению, в силу сложности задач, которые были рассмотрены, сама методика отошла на второй план для научного сообщества. В данной работе предлагается отойти от сложных моделей и сосредоточиться на исследовании процесса фильтрации на примере расчета значений элементарных функций.

Методы и материалы исследования. *Получение численных данных.* Итак, рассмотрим простой пример вычисления правой производной функции *cos(x)* в точке *x=0,5*. Будем приближаться к точке, сокращая интервал вдвое. Программная реализация рассматриваемого вычисления проста (выбираются переменные типа *double*):

```
for (int i = 0; i < N; i++)
{
```

```
   h[i] = 1.0/n;
   fright[i] = (f(x + h[i]) - f(x)) / h[i];
   fcentral[i] = (f(x + h[i]) - f(x - h[i]))
/ (2 * h[i]);
   n = n * 2.0;
   }
```

Получаем набор значений правой *fright[i]* и средней *fcentral[i]* производных в количестве 20×2 (для *n=1, 2, 4, 8,…524248*) (табл.1).

Таблица 1 – Вычисленные значения производной в точке

n	fright	fcentral
1	-0,80684536	-0,40342268
2	-0,674560512	-0,459697694
4	-0,583574772	-0,474447106
8	-0,532955539	-0,47817801
16	-0,506529003	-0,479113474
32	-0,493058623	-0,479347511
64	-0,486262005	-0,479406031
128	-0,482848701	-0,479420662
256	-0,481138346	-0,479424319
512	-0,480282248	-0,479425234
1024	-0,479853969	-0,479425462
2048	-0,479639773	-0,47942552
4096	-0,479532661	-0,479425534
8192	-0,479479101	-0,479425537
16384	-0,47945232	-0,479425538
32768	-0,479438929	-0,479425539
65536	-0,479432234	-0,479425539
131072	-0,479428886	-0,479425539
262144	-0,479427212	-0,479425539
524288	-0,479426376	-0,479425539

Стандартное значение *cos(0,5),* декларируемое известными онлайн-калькуляторами и математическими пакетами *cos(0,5)=-0,479425539*. Такое значение наблюдается, начиная с *n=16384* при рассмотрении средней производной и не наблюдается при работе с правой производной. Таким образом, возникает вопрос: сколько верных знаков присутствует в полученном результате? Какое из множества возможных численных значений одного и того же параметра используется при дальнейшем решение задачи? На сколько накопилась общая ошибка вычисления, обусловленная неточными используемыми значениями?

Численная фильтрация. Аппаратом многокомпонентного анализа, представленного в [1] является процесс, который авторы назвали «фильтрацией». В данном контексте фильтрация – это набор алгоритмов и аналитических правил, которые можно применить к последовательностям вычисленных значений искомого параметра. Основная идея алгоритмов фильтрации – это использование модели погрешности вычисленного значения как суммы нескольких слагаемых с неизвестными коэффициентами

$$b_n - b = c_1 n^{-k_1} + c_2 n^{-k_2} + \dots + c_L n^{-k_L} + \Delta(n), \qquad (1)$$

в данном представлении b_n – приближенный результат (значения b_n для нашего случая представлены в правых столбцах рисунка 1); b – точное значение. Разность между точным и приближенным решением является погрешностью и выражается правой частью равенства (1). c_j – неизвестные коэффициенты; $k_1,\dots k_L$ – произвольные действительные числа (известные), такие, что $k_1<k_2<\dots<k_L$. В большинстве случаев $\Delta(n)$ принимают за бесконечно малую величину. Однако мы полагаем, что величина $\Delta(n)$ не имеет априорной оценки. Более того, допускается возможным возрастание этой величины при увеличении n (погрешность округления, не вошедшие в сумму слагаемые, остаточный член ряда). Также на $\Delta(n)$ может влиять несовершенство самого численного метода, а также его программно-аппаратная реализация. Последний фактор напрямую зависит от конкретного разработчика, оборудования и инструментов разработки, которыми он пользуется. Поэтому оценить величину возможной ошибки или недочета заранее не предполагается возможным. Следовательно, нельзя заранее считать $\Delta(n)$ бесконечно малой величиной. Основная задача фильтрации – поэтапное избавление от степенных составляющих суммы (1). В данной работе рассматривается фильтрация при кратном увеличении числа узлов (сокращении интервала определения производной) $n_i=2n_{i-1}$.

Теоретические основы процесса отражены в работах [1, 4]. Согласно [4], в текущем случае процесс фильтрации совпадает с формулой Ричардсона:

$$b_{n_i}^{(j)} = b_{n_i}^{(j-1)} + \frac{b_{n_i}^{(j-1)} - b_{n_{i-1}}^{(j-1)}}{Q^{k_{j-1}}}, \quad Q=2. \qquad (2)$$

Так мы проводим процедуру по всем парам значений $b_{n_{i-1}}$, b_{n_i}. Получается зависимость, в которой значение на каждом последующем шаге фильтрации j выражается через значения, полученные на предыдущем шаге процедуры *j–1*. Таким образом, получается зависимость, которая уже не содержит члена с n^{-k_j}):

$$b_n^{(j)} = b + c_{j+1}^{(j)} n^{-k_{j+1}}) + \dots + c_L^{(j)} n^{-k_L} \Delta^{(j)}(n), \qquad (3)$$

в рассматриваемом примере, на практике, получаемые отфильтрованные последовательности значений правой производной выглядят следующим образом:

Таблица 2 – Результаты фильтрации

n	1 фильтрация	2 фильтрация
1		
2	-0,542275664	
4	-0,492589032	-0,476026821
8	-0,482336306	-0,478918731
16	-0,480102466	-0,479357853
32	-0,479588243	-0,479416835
64	-0,479465388	-0,479424436
128	-0,479435397	-0,4794254
256	-0,47942799	-0,479425521
512	-0,47942615	-0,479425536
1024	-0,479425691	-0,479425538
2048	-0,479425577	-0,479425539
4096	-0,479425548	-0,479425539
8192	-0,479425541	-0,479425539
16384	-0,479425539	-0,479425539
32768	-0,479425539	-0,479425539
65536	-0,479425539	-0,479425539
131072	-0,479425539	-0,479425539
262144	-0,479425539	-0,479425539
524288	-0,479425539	-0,479425539

Отфильтрованная j раз последовательность содержит на один член меньше, чем $b_{n_i}^{(j-1)}$. Операции фильтрации можно последовательно повторять для $n^{-k_1}\dots n^{-k_L}$, если исходная последовательность содержит достаточное количество членов. Так как рассматриваемая функция проста, некоторые выводы можно сделать уже по двум новым последовательностям значений (табл. 2). Во-первых, очевидно, что уже после 1 фильтрации получается последовательность (3), близкая к эталонному значению (даже 1-е значение, изначально почти в 2 раза ошибочное). Во-вторых, при проведении второй процедуры фильтрации (*j=2*), получаются значения, практически каждому из которых уже можно доверять при условии использования 4 знаков после запятой. В общем случае получаемые таким образом числовые значения должны быть подвергнуты анализу с целью оценки погрешности и обоснованию достоверности этих оценок.

Данный метод фильтрации вычисленных значений имеет ряд ограничений для его применения. Главное его ограничение – наличие составляющей *Δ(n)* погрешности, значение которой, естественно, неизвестно.

Конечно, уже существуют способы определения оценки погрешности. К примеру, правило Рунге. Однако данное правило дает существенный результат только в том случае, если в рассматриваемой модели доминирует слагаемое, удаляемое на данном этапе. Повторю, что мы не отрицаем возможности преобладания и последнего слагаемого *Δ(n)* над остальными. В таком случае, оценки по правилу Рунге могут оказаться намного меньше действительных.

Хочется особенно подчеркнуть, что фильтрация предоставляет лишь дополнительную информацию для исследователя в виде последовательностей численных данных (в отличие от методов ускорения сходимости). На основании новых полученных закономерностей проводится дальнейший анализ полученного набора решений b_n.

Результаты исследования. Одним из удобных способов анализа полученных результатов фильтрации является графический способ (рис. 1). Где, *lgδ* – десятичный логарифм абсолютной или относительной погрешности, *lg n* – десятичный логарифм параметра дискретизации (количество отрезков разбиения, например). Тем самым мы отображаем точность, выраженную в количестве точных десятичных знаков. При этом каждая компонента зависимости (1) представляется на таком графике отрезком прямой.

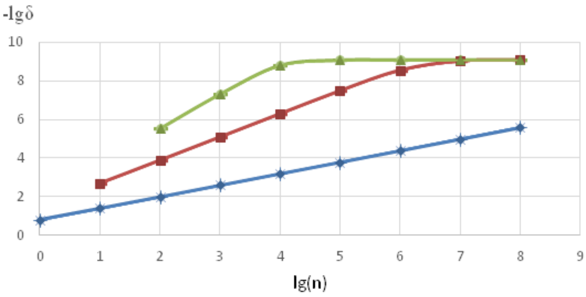

Рисунок 1 – Погрешность вычисления cos'(x), x=0,5

Ниже изложены разработанные правила, которых следует придерживаться при дальнейшем анализе графика отображения численных данных. Вышеупомянутая линия используется для оценки размытия оценки ошибки; вторая строка сверху используется для оценки ошибки.

1. Мы не используем верхнюю линию для оценки погрешности. Она визуализирует размытость оценки погрешности. Для погрешности (оценки) берется вторая сверху линия.

2. Свидетельством убывания погрешности с увеличением *n* является приближенность всех линий графика по форме к прямым. Если линии загибаются вверх, это может быть сигналом того, что погрешность проходит через локальный минимум (либо меняет знак). При обнаружении данного факта следует провести дополнительный анализ.

3. Плотность точек на графике и постоянство знака оценки погрешности также играют роль. Если точки расположены редко, есть опасность спутать с прямую с той, которая не является прямой линией. Однако можно использовать разные методы для увеличения количества точек без увеличения верхнего порога количества узлов *n.*

Вычисляя относительную размытость оценки, становится очевидным, что проведения 2 этапов фильтрации (исключения 2 компонент (1)) достаточно для получения точности 10^{-9} на 10 итерациях.

Применение фильтрации в сложных моделях. В последних рассматриваемых нами задачах использовался интеграл Шварца вместо степенного ряда [2]. Имеем генеральную сетку, и на каждом отрезке интеграл считается по двухточечной формуле Гаусса, имеющей 4-й порядок точности относительно длины отрезка интегрирования. Почему? Формула Гаусса не требует вычисления подынтегральной функции на границах отрезка, а это важно. Для некоторых интегралов на границах имеется особенность вида 0/0, это требует применения правил Лопиталя, что приводит к дополнительным затратам времени расчета. При применении формулы Гаусса этого не нужно. Но нужно многократное вычисление входящих в подынтегральную функцию значений. Чтобы избежать повторных вычислений, эти значения заранее рассчитываются и запоминаются. И далее происходит пересчет с запомненными числами. Все равно, это, конечно сложнее и дольше, чем вычислить частичную сумму ряда. Но это дает эффект по точности при одинаковой размерности. Один из влияющих на это факторов – это возможность применения неравномерных сеток и подбора вида этой неравномерности. При использовании степенного ряда (на окружности он превращается в ряд Фурье, т.е. в периодические функции, что требует равномерных сеток). А это иногда фатально. Однако особенности разработанных численно-аналитических методов требуют вычисления еще и интегралов функций, имеющих, к примеру, дробно-степенные особенности. Замена переменной интегрирования не эффективна, так как функции, зависящие от x в первой и других целых степенях, превращаются дробно-степенные. В данной ситуации нам на помощь приходит фильтрация (+ неравномерное разбиение отрезка интегрирования). То есть, есть генеральная сетка, есть дополнительное разбиение отрезка, ближайшего к особенности, и есть вычисление интеграла на каждом частичном отрезке на своей сетке с уменьшающимся шагом. Применяется метод средних прямоугольников, поскольку он не требует вычисления подынтегральной функции на границах отрезка интегрирования, где может быть особенность.

Заключение. Рассмотренный процесс косвенно демонстрирует жизнеспособность идеи фильтрации. Очевидно, что идея уточнения значений и оценка погрешности с помощью фильтрации дает качественное улучшение и уточнение вычисленных значений. Конечно, на таких простых примерах практическая польза подхода не очевидна, так как значения производной косинуса в точке 0,5 известно с высокой точностью. Однако для сложных вычислительных алгоритмов возможность достоверной оценки погрешности и уточнения результатов «на выходе» незаменима. Результаты оценки для таких задач проверялись с помощью получения вычисленных более точных значений (с использованием типа данных повышенной точности) [7]. На практике ведение расчетов задач численного моделирования с помощью типа данных максимальной точности не рационально и не всегда возможно.

Таким образом, предложенный подход позволяет получать более точные данные и достоверные оценки, не прибегая при этом к сложным вычислительным процессам с использованием типа данных завышенной точности, проведению множества экспериментов на разных множествах входных значений и так далее.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Шерыхалина Н.М. Математическое моделирование технических объектов и процессов на основе методов многокомпонентного анализа результатов вычислительного эксперимента: Дисс. ... д-ра техн. наук. Уфа, 2012. – 376 с.

2. Соколова А.А. Кавитационное обтекание оболочки по несимметричной схеме Рябушинского // Межвузовский научный конгресс. Высшая школа: Научные исследования. Москва, 27 сентября, 2019г. Изд. Инфинити. С. 220 – 230.

3. Житников В. П., Шерыхалина Н. М., Соколова А. А. Предельно-квазистационарное копирование круглого электрод-инструмента // Вестник УГАТУ. 2017. Т. 21, №1. С. 173–179.

4. Zhitnikov V. P., Sherykhalina N.M., Sokolova A.A. Problem of Reliability Justification of Computation Error Estimates. Mediterranean Journal of Social Sciences, 2015, Vol. 6, No. 2, pp. 65 – 78.

5. Амосов А.А., Дубинский Ю.А., Копченова Н.В. Вычислительные методы. М.: Изд. дом МЭИ, 2008. 672 с.

6. Житников В.П., Шерыхалина Н.М., Поречный С.С. Об одном подходе к практической оценке погрешностей численных результатов // Научно-техн. ведомости СПбГПУ. 2009. № 3(80). С. 105–110.

7. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ РФ №2018619757. Программа расчета параметров солитона Стокса / Житников В.П., Шерыхалина Н.М., Соколова А.А. Зарег. М.: Роспатент. 10.08.2018.

8. A. Bjoerck, G. Dahlquist, “Numerical mathematics and scientific computation,” vol. 1, 1999, 485 p.

9. L. W. Richargson “The deferred approach to the limit,” Phil. Trans. Roy. Soc. London, vol. 226, 1927, pp. 299 – 361.

10. V. P. Zhitnikov, N. M. Sherykhalina “Accuracy increase of complex problems solutions by numerical data post-processor handling,” Computational technologies, vol. 13, no. 6, 2008, pp. 61 – 65.

11. Paluri N.S.V., Sondur S. Experiments with Range Computations Using Extrapolation // Reliable Computing. 2007. Vol. 13. No 1. P. 1 – 23.

12. Житников В.П., Шерыхалина Н.М. Многокомпонентный анализ численных результатов. Saarbrucken, Germany: LAP LAMBERT Academic Publishing GmbH & Co. KG, 2012. 389 с.

13. Житников В.П., Шерыхалина Н.М. Оценка достоверности численных результатов при наличии нескольких методов решения задачи // Вычислительные технологии. 1999. Том 4, № 6. С. 77-87.

14. Житников В.П., Шерыхалина Н.М. Методы верификации математических моделей в условиях неопределенности // Вестник УГАТУ. 2000. № 2. – С. 53-60.

15. Каримов А.Х., Клоков В.В., Филатов Е.И. Методы расчета электрохимического формообразования. – Казань: КГУ, 1990. – 387 с.

16. Галанин М.П., Савенков Е.Б. Методы численного анализа математических моделей / М.П. Галанин, Е.Б. Савенков. – Москва; Изд-во МГТУ, 2010. – 590 с. : ил.; 24 см.

17. Житников В. П., Шерыхалина Н.М., Соколова А.А. Оценка погрешности и ее обоснование с помощью фильтрации численных результатов, полученных при разных числах узловых точек сетки // Известия Самарского научного центра РАН. 2017. Т.19, № 1(2). С. 401–405.

18. Житников В.П., Шерыхалина Н.М. Методы верификации математических моделей в условиях неопределенности // Вестник УГАТУ. 2000. № 2. -С. 53-60.

19. Sherykhalina N.M., Zhitnikov V.P. Application of extrapolation methods of numerical results for improvement of hydrodynamics problem solution // Computational Fluid Dynamics Journ. V. 10, N 3, 2001.

20. Smith D.A., Ford W.F. Numerical comparisons of nonlinear convergence accelerations. – Mathematics of Computation, 1982. V. 38. 158. P. 481 – 499.

Статья поступила в редакци 30.10.2021
Статья принята к публикации 07.12.2021