

О ВЛИЯНИИ ПОГРЕШНОСТИ ВЫЧИСЛЕНИЙ НА СХОДИМОСТЬ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ ИНТЕГРИРОВАНИЯ

И.М. Куликов, И.Г. Черных

В последнее время, в связи со стремительным ростом вычислительных мощностей, а также с бурным развитием вычислительной математики и алгоритмов, появился целый ряд работ и программ, "облегчающий" жизнь специалистам в различных областях наук.

Быстро развивается сфера приложений приближенных формул для моделирования различных природных процессов. Объектами приближения служат при этом как решения краевых задач для уравнений и систем уравнений с частными производными, так и обобщенные функции, когда речь идет о кубатурных формулах. В каждом случае использование приближенных формул связано с компьютерными вычислениями и в этой связи очень важно знать, в какой степени гарантирована точность численного результата. Насколько решение близко по отношению к точному теоретическому или насколько оно точно описывает реальный процесс.

Например, в задачах вычислительной линейной алгебры операция вычисления скалярного произведения является базовой для остальных операций. В настоящее время размерность пространств решения систем линейных алгебраических уравнений редко бывает меньше миллиона. Поэтому для всех операций вычислительной линейной алгебры необходима оценка гарантированной точности вычислений. Стоит также отметить, что во многих современных библиотеках не заложены способы оценки точности вычислений. Хотя, такие библиотеки, в небольшом количестве, существуют.

Для суммирования большого числа элементов помимо тривиального суммирования разработан ряд алгоритмов, в том числе с оценкой гарантированной точности результата. Особенно перспективным является алгоритм Кохана, исследованиям и модификациям которого посвящен ряд публикаций. В дальнейшем алгоритм Кохана может быть расширен на вычисление определителя с введенным понятием точного произведения.

Помимо стандартного вещественного числа вводится понятие интервальной арифметики. В этом случае вещественное число представляется своим интервалом локализации. Для интервалов вводятся арифметические операции и трансцендентные функции. В основе интервальной арифметики "метод границ" - способ организации вычислений, приводящий к достоверным двусторонним границам точного значения вычисляемого результата, что является его несомненным достоинством. Однако, в реальных расчетах на суперЭВМ, когда количество арифметических операций может достигать до 1 000 000 000 000 000 (суперЭВМ петафлопного класса) величина интервала локализации результата может достигать слишком большой величины.

В любом случае операция суммирования вещественных чисел является базовой для любого вида арифметики. Основная проблема вещественных чисел - возможность представления необходимого количества знаков мантиссы. Для решения этой проблемы создано множество библиотек, которые позволяют производить вычисления с большей точностью. Существуют реализации таких библиотек для языков C/C++, C#, Java, для языка Fortran такие типы данных предусмотрены в спецификации.

Для исследования влияния погрешности вычислений на сходимость численных методов используем задачу численного интегрирования. При решении ресурсоемких задач (особенно на суперЭВМ) количество операций становится очень большим. В следствии этого, погрешность, связанная с ошибками округления стремительно растет. Необходимо учитывать это при разработке алгоритмов и программной реализации. Хотя в настоящее время использование двойной точности для большинства задач является удовлетворительным условием. Однако для проверки правильности решения можно рекомендовать использование четверной точности.

В докладе приведена экспериментальная зависимость относительной погрешности численного интегрирования от количества интервалов разбиения при разном количестве значащих знаков мантиссы. Получена экспериментальная оценка минимального значения относительной погрешности численного интегрирования при фиксированном количестве значащих знаков мантиссы.

Работа выполнена при финансовой поддержке междисциплинарного интеграционного проекта № 40, ведущей научной школы НШ-4292.2008.1, федеральной целевой программы "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009 - 2013 год" (контракт П1246).