

КАЛЬКУЛЯТОР ГИПЕР-ДУАЛЬНЫХ ЧИСЕЛ

Олифер В. И.

Представляемый пилотный проект является интерактивным (online) калькулятором, позволяющим вычисление значений (с точностью 15 знаков после запятой) функции и её первых трех производных при заданной величине аргумента.

На практике численное дифференцирование сложных функций в большинстве случаев осуществляется методом конечных разностей, недостатком которого считается неустранимая погрешность вычисления неограниченно возрастающая при стремлении шага разности к нулю. Поэтому задача численного дифференцирования считается некорректно поставленной.

С развитием вычислительной техники возникло новое направление в вопросах численного дифференцирования – автоматическое дифференцирование [1, 2], связанное с точным (точностью представления чисел в компьютерной системе) вычислением производных сложных композитных математических функций. Автоматическое дифференцирование (AD) позволяет избежать дублирование функциональности программного кода (изменение кода функции не требует изменения кода ее производной). Для компьютерной реализации AD необходимо создать новый тип данных, перезагрузить базовые математические функции и операции над ними. Если новый тип данных строится на основе гипер-дуальных чисел [3, 4], то за одно обращение к перезагруженной функции точно вычисляются значения самой функции и её первой и второй производных. Если же использовать гипер-дуальные числа третьего класса (HDN3) [5], то за одно обращение к перезагруженной функции уже вычисляются значения самой функции и её первых трех производных.

Гипер-дуальные числа (HDN3) находят достаточно широкое применение в самых разнообразных задачах прикладной математики (см., например, веб-ресурс: [HDN3](#)).

HDN3 имеют представление в виде $X = x + x_1\varepsilon + x_2\omega + x_3\gamma$, $(x, x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}$. Параметр x называется главной (*Re* - действительной) частью гипер-дуального числа, а x_1, x_2, x_3 – его мнимыми (*Im1, Im2, Im3* - инфинитезимальными) частями. Абстрактные элементы $\varepsilon, \omega, \gamma$ образуют базис мнимых частей гипер-дуального числа, отвечающий следующими правилам: $\varepsilon^2 = 2\omega$, $\varepsilon\omega = 3\gamma$, $\varepsilon\gamma = \omega\gamma = \gamma^2 = \omega^2 = 0$. Алгебраические операции над дуальными числами HDN3 определяются формулами:

$$\begin{aligned}
 X &= x + x_1\varepsilon + x_2\omega + x_3\gamma, & Y &= y + y_1\varepsilon + y_2\omega + y_3\gamma \\
 X + Y &= x + y + (x_1 + y_1)\varepsilon + (x_2 + y_2)\omega + (x_3 + y_3)\gamma, \\
 X \cdot Y &= x \cdot y + (x \cdot y_1 + y \cdot x_1)\varepsilon + (x \cdot y_2 + 2x_1 \cdot y_1 + y \cdot x_2)\omega + (x \cdot y_3 + y \cdot x_3 + 3(x_1 \cdot y_2 \\
 &\quad + y_1 \cdot x_2))\gamma, \\
 Y^{-1} &= x^{-1} - x^{-2} \cdot x_1\varepsilon + x^{-2}(2 \cdot x_1^2 \cdot x^{-1} - x_2)\omega + a^{-2}(6x_1 \cdot x^{-1}(x_2 - x_1^2 \cdot x^{-1}) - x_3)\gamma, \\
 X/Y &= X \cdot Y^{-1},
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

а функция гипер-дуального аргумента HDN3, после ее разложения в ряд Тейлора, имеет вид

$$\begin{aligned}
 F(X) &= f(x) + x_1 f'(x)\varepsilon + [x_2 f'(x) + x_1^2 f''(x)]\omega + [x_3 f'(x) + 3x_1 x_2 f''(x) + \\
 &\quad x_1^3 f'''(x)]\gamma
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

При $x_1 = 1$ и $x_2 = x_3 = 0$ соотношение (2) принимает форму:

$$\begin{aligned}
 F(x + \varepsilon + 0\omega + 0\gamma) &= f(x) + f'(x)\varepsilon + f''(x)\omega + f'''(x)]\gamma, \\
 f(x) &= F(x + 0\varepsilon + 0\omega + 0\gamma)
 \end{aligned}
 \tag{3}$$

Тогда $f(x) = F(X).Re$, $f'(x) = F(X).Im1$, $f''(x) = F(X).Im2$, $f'''(x) = F(X).Im3$ при $X = x + \varepsilon + 0\omega + 0\gamma$.

На практике использование AD предполагает что целевая функция уже определена до этапа компиляции программы. Для возможности изменения целевой функции во время работы уже откомпилированной программы будем использовать парсинг/разбор математического выражения. Ниже представлена функциональная схема предлагаемого калькулятора.

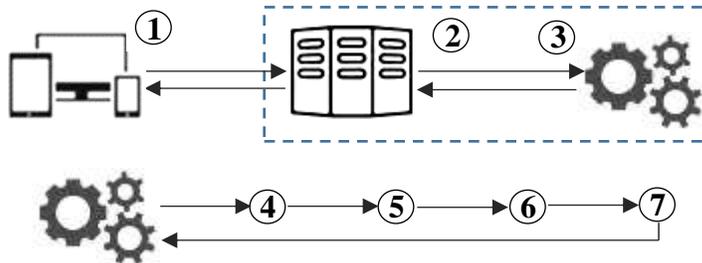


Рис.1. Функциональна схема калькулятора

На рис.1:

- ① – интерфейс пользователя из которого осуществляется запрос к веб-серверу;
- ② – веб-сервер;

- ③ – блок решения задачи;
- ④ – анализ и форматирование строки математического выражения;
- ⑤ – разбор математического выражения;
- ⑥ – токенизация выражения с использованием польской нотации (RPN);
- ⑦ – вычисление токенизированного выражения с использованием автоматического дифференцирования (AD) на базе гипер-дуальных чисел (HDN3);

Следует отметить, что на этапе ④ происходит преобразование констант, переменных и функций к гипер-дуальному виду: $c \rightarrow c + 0\varepsilon + 0\omega + 0\gamma$, $x \rightarrow x + 1\varepsilon + 0\omega + 0\gamma$, $f(x) \rightarrow F(X)$. Разбор (parsing) ⑤ математического выражения включает преобразование строкового представления математического выражения в формат, который компьютер может понять и оценить. При этом используется обратная польская нотация (RPN), что упрощает процесс токенизации ⑥ (разбивка исходного математического выражения на токены). Токен (token) – примитивный объект, имеющий признак и приоритет выполнения, например, элементарная функция, переменная, константа или операция (+, -, *, /). На ⑦ этапе последовательно реализуются токены, полученные из ⑥ этапа, и окончательный результат в виде значений $y(x)$, $y'(x)$, $y''(x)$ и $y'''(x)$ возвращается в интерфейс пользователя:

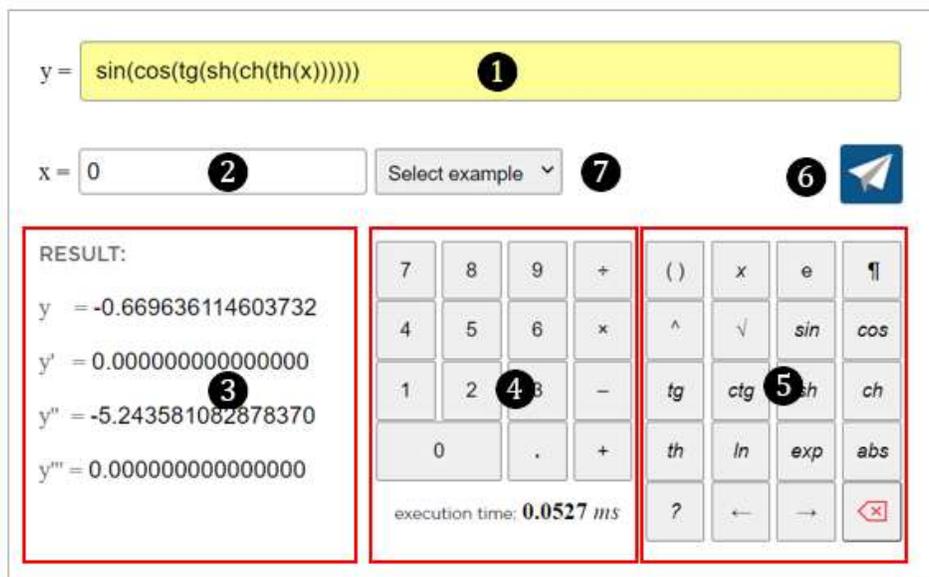


Рис. 2. Интерфейс пользователя

- ① - поле ввода функции;
- ② - поле ввода аргумента;
- ③ - блок результата расчета;

- ④ - клавиатура ввода цифр и операндов;
- ⑤ - клавиатура ввода функции;
- ⑥ - кнопка выполнения;
- ⑦ - список примеров функций (ввод выбранного примера функции в поле ①);

Интерфасе пользователя выполнен на ASP.NET C#.

Для реализации ③-го блока решения задачи (см. рис. 1) на языке C# разработаны две статические библиотеки Sdn3Lib.dll и MathParserVIO.dll. Первая из них реализует гипер-дуальные числа (HDN3), а вторая – парсинг строки исходного математического выражения.

При расстоянии от пользователя до веб-сервера не более 4000 км время выполнения запроса (при скорости интернета ~900 Mbps) для тестируемых функций было порядка 0.25 ms в то время, как на локальном веб-сервере оно составило около 0.05 ms. Точность получаемых результатов составляет 15 знаков после запятой.

Рабочая версия представленного калькулятора находится по адресу [HDN Calculator](#).

Литература

1. *Naumann U.* The art of differentiating computer programs. Society for industrial and applied mathematics, Philadelphia, USA, 2012.
2. *Corliss G., Faure C., Griewank A., Hascolt L., Naumann U.* Automatic Differentiation Bibliography // Automatic Differentiation of Algorithms: From Simulation to Optimization. Springer, 2002. p. 383—425.
3. *Fike J.A., Alonso J.J.* The development of hyper-dual numbers for exact second derivative calculations. AIAA paper 2011-886, 49th AIAA Aerospace Sciences Meeting, January 4-7, 2011.
4. *Fike J.A.* Multi-objective optimization using hyper-dual numbers. Ph.D. Dissertation, Stanford University, 2013.
5. *Олифер В. И.* Автоматическое дифференцирование на основе супер-дуальных чисел. – URL:http://viosolutions.amerihomesrealty.com/pdf/Автоматическое_дифференцирование_на_основе_супер-дуальных_чисел.pdf, 2020.

Абстракт

В данной публикации рассматривается пилотный проект интерактивного (online) калькулятора, позволяющего вычисление значений функции и её первых трех производных при заданной величине аргумента. Решение строится на основе автоматического дифференцирования с использованием специальных дуальных чисел (супер-дуальных чисел 3-го класса) и парсинга строкового математического выражения. This publication discusses a pilot project of an interactive (online) calculator that allows calculating the values of a function and its first three derivatives for a given argument value. The solution is based on automatic differentiation using special dual numbers (super-dual numbers of the 3rd class) and parsing a string mathematical expression.

Ключевые слова: дуальные числа, гипер-дуальные числа, супер-дуальные числа, автоматическое дифференцирование, калькулятор, dual numbers, hyper-dual numbers, super-dual numbers, automatic differentiation, calculator

20 октября 2024 г.