КАЛЬКУЛЯТОР КОРНЕЙ ФУНКЦИЙ НА БАЗЕ МЕТОДА ЧЕБЫШЕВА 4-ГО ПОРЯДКА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГИПЕР-ДУАЛЬНЫХ ЧИСЕЛ

Представляемый пилотный проект является интерактивным (online) калькулятором аналогичным [1], но позволяющим вычисление значения (с точностью 15 знаков после запятой) локального корня функции итерационным методом Чебышева 4-го порядка [2].
Из предположения, что вещественная функция $f(x)$ является гладкой, монотонной и однозначной на интервале $[a,\ b]$ итерационная формула Чебышева 4-го порядка имеет вид:

$$x_{i+1} = x_i - [1 + (L_i + L_i^2)/2 - K_i/6]D_i, \qquad i = 0,1,2,\dots, \tag{1}$$

где: $L_i = D_i \cdot f''(x_i)/f'(x_i),\ K_i = D_i^2 \cdot f'''(x_i)/f'(x_i),\ D_i = f(x_i)/f'(x_i)$
Если положить $L_i^2 = K_i = 0$, то получим формулу Чебышева с кубической сходимостью, а при $L_i = L_i^2 = K_i = 0$ формулу Ньютона с квадратичной сходимостью.
Первым требованием к реализации итерационной формулы (1) является условие $f'(x) \neq 0$ на интервале $[a,\ b]$. Второе требование связано с небходимостью наличия способа вычисления $f(x)$, $f'(x)$, $f''(x)$ и $f'''(x)$ когда $f(x)$ имеет сложное аналитическое выражение или представлена сложным программный кодом. В этом случае, как правило, используются методы численного дифференцирования с применением различных моделей аппроксимации. Последнее приводит к возникновению неустранимой вычислительной погрешности, связанной с погрешностью самой модели аппроксимации.

С появлением современных вычислительных устройств и высокоуровневых алгоритмических языков программирования, позволяющих работать с нестандартными типами данных, стал успешно применяться метод автоматического дифференцирования (AD) [3], суть которого заключается в создании нового типа данных и переопределение операций и базовых функций над ними. Этот подход позволяет вычислять точные (с машинной точностью) значения функции и ее производных. Если использовать гипер-дуальные числа третьего класса (HDN3) [4], то за одно обращение к перезагруженной функции вычисляются значения самой функции и её первых трех производных.

Гипер-дуальные числа (HDN3) находять достаточно широкое применение в самых разнобразных задачах прикладной математики (см., например, веб-ресурс: HDN3).
Эти числа (HDN3) имеют представление в виде $X = x + x_1\boldsymbol{\varepsilon} + x_2\boldsymbol{\omega} + x_3\boldsymbol{\gamma}$, $(x, x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}$. 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 $\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\gamma}$ образуют базис мнимых частей гипер-дуального числа, отвечающий следующими правилам: $\boldsymbol{\varepsilon}^2 = 2\boldsymbol{\omega}$, $\boldsymbol{\varepsilon\omega} = 3\boldsymbol{\gamma}$, $\boldsymbol{\varepsilon\gamma} = \boldsymbol{\omega\gamma} = \boldsymbol{\gamma}^2 = \boldsymbol{\omega}^2 = 0$. Алгебраические операции над дуальными числами HDN3 определяются формулами:

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

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

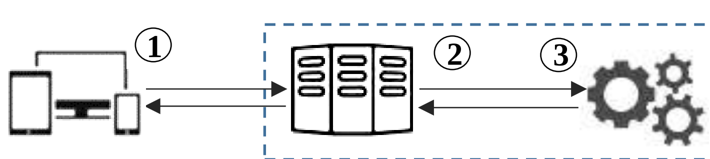
$$
F(X) = f(x) + x_1 f'(x)\boldsymbol{\varepsilon} + [x_2 f'(x) + x_1^2 f''(x)]\boldsymbol{\omega} + [x_3 f'(x) + 3x_1 x_2 f''(x) + x_1^3 f'''(x)]\boldsymbol{\gamma} \tag{3}
$$

При $x_1 = 1$ и $x_2 = x_3 = 0$ соотношение (3) принимает форму:

$$
\begin{aligned}
&F(x + \boldsymbol{\varepsilon} + 0\boldsymbol{\omega} + 0\boldsymbol{\gamma}) = f(x) + f'(x)\boldsymbol{\varepsilon} + f''(x)\boldsymbol{\omega} + f'''(x)]\boldsymbol{\gamma},\\
&f(x) = F(x + 0\boldsymbol{\varepsilon} + 0\boldsymbol{\omega} + 0\boldsymbol{\gamma})
\end{aligned}
\tag{4}
$$

Тогда $f(x) = F(X).Re$, $f'(x) = F(X).Im1$, $f''(x) = F(X).Im2$, $f'''(x) = F(X).Im3$ при $X = x + \boldsymbol{\varepsilon} + 0\boldsymbol{\omega} + 0\boldsymbol{\gamma}$, что позволяет реализовать итерационную формулу (1).

На практике использование AD предполагает что целевая функция $f(x)$ уже определена до этапа компеляции программы. Для возможности изменения целевой функции во время работы уже откомпелированной программы будем использовать парсинг/разбор математического выражения. Ниже представлена функциональная схема предлагаемого калькулятора.



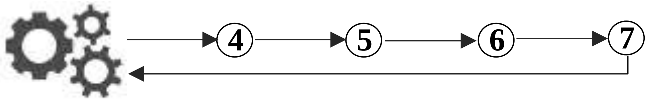


Рис.1. Функциональна схема калькулятора

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 в формате польской нотации (RPN);
⑦ – вычисление токенизированного выражения с использованием автоматического дифференцирования (AD) на базе гипер-дуальных чисел (HDN3) и реализация итерационной формулы (1);

Интерфейс пользователя представлен на рис. 2.

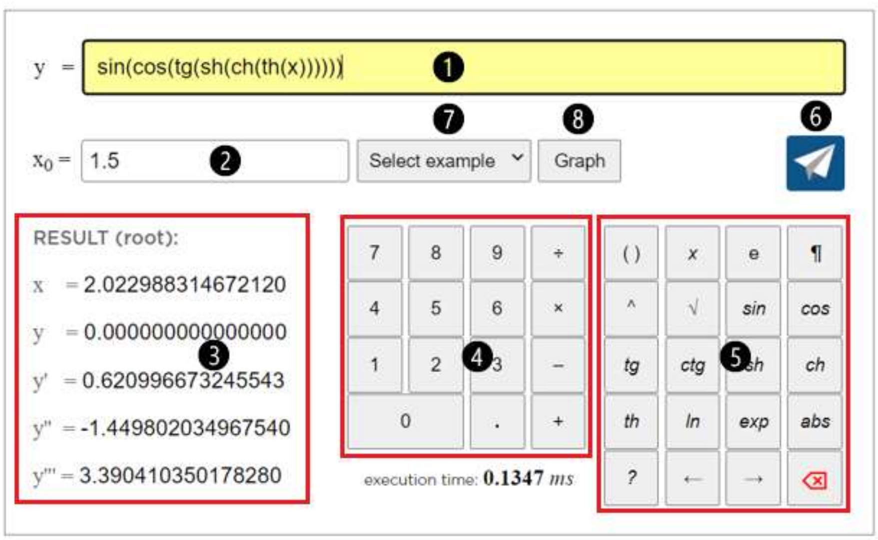


Рис.2. Интерфейс пользователя

❶ - поле ввода функции;
❷ - поле ввода начального значения аргумента;
❸ - блок результата расчета;
❹ - клавиатура ввода цифр и операндов;
❺ - клавиатура ввода функции;
❻ - кнопка выполнения;
❼ - список примеров функций (ввод выбранного примера функции в поле ❶);
❽ - кнопка для открытия графического калькулятора;

Важное значение для реализации любого итерционного процесса является правильный выбор его начального приближения x_0, которое должно быть максимально близко к исследуемому корню. Точка начального приближения x_0 должна лежать в окрестности ожидаемого корня и в этой окрестности функция должна быть монотонной, а также выполнятся условия $f'(x_0) \neq 0$ и $f(x_0) \cdot f''(x_0) > 0$.

Для выбор начального приближения x_0 целесообразно использовать графический калькулятор, интерфейс которого представлен на рис. 3.

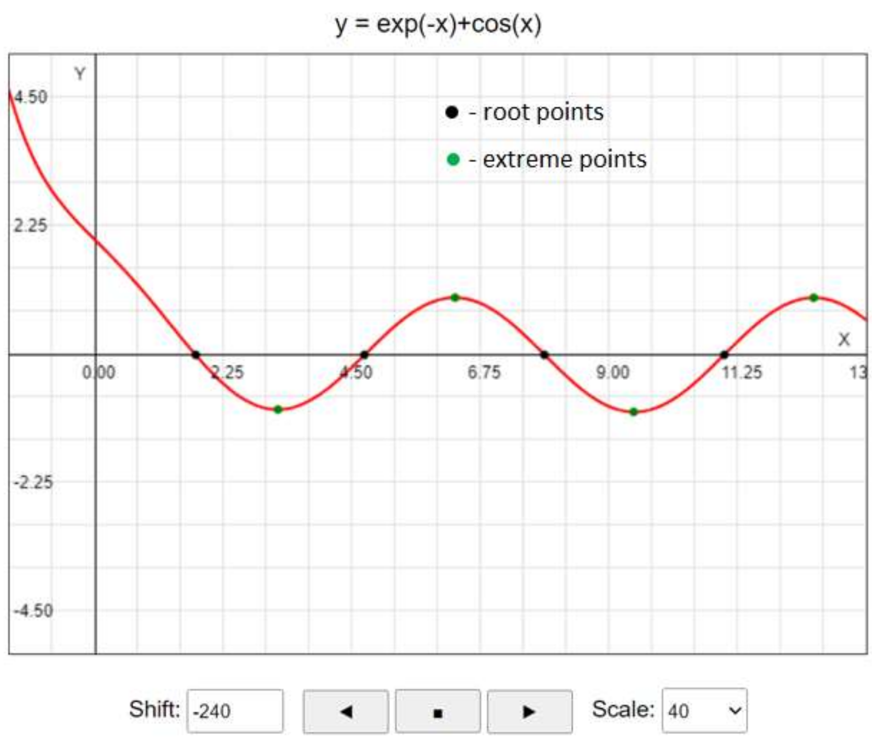


Рис.3. Интерфейс графического калькулятора

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 тестикуемых функций было не более 2.5 ms; для сравнения, на локальном веб-сервере оно не превышало 0.5 ms. Точность получаемых результатов составляет 15 знаков после запятой.

Рабочая версия представленного калькулятора находится по адресу HDN Calculator.

Литература

1. *Олифер В. И.* Калькулятор гипер-дуальных чисел. – URL:http://viosolutions.amerihomesrealty.com/pdf/калькулятор_гипер.pdf, 2024.
2. *Олифер В. И.* Численное исследование метода чебышева 4-го порядка с использованием супер-дуальных чисел 3-го класса. – URL:http://viosolutions.amerihomesrealty.com/pdf/численное_исследование_метода_чебышева_4-го_порядка.pdf, 2023.
3. *Fike J.A.* Multi-objective optimization using hyper-dual numbers. Ph.D. Dissertation, Stanford University, 2013.
4. *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 значения локального корня функции и её первых трех производных. Решение строится на основе автоматического дифференцирования с использованием специальных дуальных чисел (супер-дуальных чисел 3-го класса), итерационной процедуры Чебышева четвертого порядка и парсинга строкового математического выражения This publication discusses a pilot project of an interactive (online) calculator that allows calculating the value of a local root of a function and its first three derivatives. The solution is based on automatic differentiation using special dual numbers (super-dual numbers of the 3rd class), the fourth-order Chebyshev iteration procedure, and parsing of a string mathematical expression.

Ключевые слова: *дуальные числа, гипер-дуальные числа, супер-дуальные числа, автоматическое дифференцирование, калькулятор, корни уравнения, метод Чебышева, парсинг, токенизация, dual numbers, hyper-dual numbers, super-dual numbers, automatic differentiation, calculator, roots of an equation, Chebyshev's method, parsing, tokenization*

20 ноября 2024 г.