

СЕРГІЄНКО

Іван Васильович — академік НАН України, директор Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України

ЗАДІРАКА

Валерій Костянтинович — академік НАН України, заступник академіка-секретаря Відділення інформатики НАН України

ШВІДЧЕНКО

Інна Віталіївна — кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України

ТЕОРІЯ ОБЧИСЛЕНЬ: ВІД ГАРАНТОВАНИХ ОЦІНОК ПОХИБОК ДО СУЧАСНИХ КОМП'ЮТЕРНИХ ТЕХНОЛОГІЙ

У статті простежено шлях розвитку теорії обчислень: від аналізу точності та ефективності обчислювальних алгоритмів, тестування їх якості, побудови оптимальних алгоритмів, пошуку резервів оптимізації обчислень до побудови сучасних комп'ютерних технологій розв'язання задач прикладної та обчислювальної математики із заданими значеннями характеристик якості за точністю та швидкодією. Коротко охарактеризовано наукові напрями досліджень у галузі обчислювальної математики, за якими Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України має унікальні досягнення світового рівня.

Ключові слова: теорія похибок, тестування якості, оптимальні алгоритми, оптимізація обчислень, комп'ютерні технології.

Теорія похибок. У зв'язку зі збільшенням кількості задач, що потребують розв'язування за допомогою комп'ютерів, та їх ускладненням постійно зростають вимоги до ефективності відповідних методів обчислення.

Важливість оцінки різних похибок не викликає сумнівів, оскільки саме поняття наближеного розв'язку містить у собі певні відомості про похибки знайденого наближення. По суті, всі теоретичні результати та проблеми в галузі обчислювальної математики донедавна зосереджувалися переважно навколо аналізу всіх видів похибок. В останні десятиліття у зв'язку із застосуванням комп'ютерів для розв'язання задач трансобчислювальної складності все більше уваги приділяється аналізу та оптимізації алгоритмічних засобів за певними критеріями.

Проте одна справа отримати наближений розв'язок задачі, а інша — зробити діагностику його якості. Сьогодні це є надзвичайно важливим і актуальним завданням, оскільки дедалі частіше доводиться розв'язувати «важкі» задачі, наприклад задачі трансобчислювальної складності, а також застосовувати наближений розв'язок у різноманітних конструкціях, технологіях тощо. Якщо при цьому використовується неякісний

наближений розв'язок, це може призвести до аварій, катастроф, екологічних лих та інших небажаних наслідків.

Отже, йдеться про гарантовану оцінку якості наближеного розв'язку задачі. Для того щоб дати гарантію якості наближеного розв'язку задачі, слід ураховувати всі джерела похибок, які виникають під час її розв'язання.

Які ж це можуть бути джерела? Насамперед похибка методу, за допомогою якого отримують наближений розв'язок. По-друге, неусувна похибка, пов'язана з неточністю вхідної інформації. Зауважимо, що неусувна похибка залежить не від методу (або алгоритму), а лише від задачі, що розв'язується. І нарешті, це може бути похибка заокруглення, яка з'являється через те, що ми забезпечуємо замкненість системи числення, в якій працюємо. Кожна арифметична операція над дійсними числами робить свій внесок в оцінку похибки заокруглення, яка залежить від правила заокруглення конкретного комп'ютера.

Повна похибка обчислювального алгоритму (о.а.) [1] акумулює усі три зазначені види — похибку методу, неусувну похибку та похибку заокруглення. Абсолютна повна похибка за нерівністю трикутника не перевищує суми абсолютних похибок методу, неусувної та заокруглення.

Оскільки оцінка, крім характеристики величини тієї чи іншої похибки, дає також можливість оцінити обсяг обчислювальних ресурсів, потрібних для розв'язування задачі з необхідною якістю, постає важливе питання про якість такої оцінки.

Так, груба оцінка, навіть якщо ми розв'язали задачу з потрібною якістю, цього не покаже. З іншого боку, груба оцінка може давати перебільшений обсяг необхідних обчислювальних ресурсів, які не завжди можна забезпечити. Тому з теоретичної точки зору більш привабливими є непокрашувальні оцінки як повної похибки, так і її складових. Такі оцінки досягаються на «поганих» задачах класу. Тобто теоретично непокрашувальні оцінки — це суперрезультати, але якщо подивитися на них з практичної точки зору, то виявляється, що «погані»

задачі мають, як правило, екзотичний характер і на практиці трапляються дуже рідко. Через це непокрашувальні оцінки також є завищеними для практичних задач.

Чи існує якийсь вихід з цієї ситуації? Принаймні два: звуження класу задач та побудова імовірнісних оцінок похибок [2].

Звуження класу можна здійснити ітераційним способом: на кожній ітерації «викидаються» «погані» задачі класу і тим самим звужується клас. До звуженого класу далі застосовують такий самий процес доти, доки серед «поганих» задач класу не з'являться практичні задачі, після чого ітераційний процес зупиняють. Оцінкам, отриманим для цих звужених класів, можна довіряти.

Слід згадати ще про асимптотичні оцінки похибок, які мають місце в околі граничних значень параметрів, за якими проводиться розклад похибки. Ці оцінки добре відображують характер поведінки похибки, але їх використання пов'язане з додатковими обчисленнями.

Які саме оцінки використовувати (апостеріорні, апостеріорні, мажорантні, асимптотичні, детерміновані, статистичні), залежить від обчислювальної ситуації.

Отже, перший блок проблем теорії обчислень полягає в отриманні **гарантованих** оцінок якості наближеного розв'язку задачі та оцінок інших характеристик обчислювального алгоритму — часу розв'язування задачі та необхідної пам'яті комп'ютера.

Тестування якості прикладного програмного забезпечення. Другий блок проблем — це тестування якості обчислювального алгоритму та оцінок його характеристик. Тобто тестується не правильність кодування алгоритму, а якість програми та оцінок її характеристик (точність, швидкодія, пам'ять). Тестування виконують на певному тестовому наборі задач, який щільно [3] покриває предметну область. Висновки, зроблені після оброблення результатів тестування, є справедливими відносно даного тестового набору задач. У разі зміни тестового набору задач висновки також можуть змінитися.

Зауважимо, що обчислювальний алгоритм відрізняється від програми лише наявністю у програмі похибки заокруглення; при тестуванні нас цікавить, як «родзинки» обчислювального алгоритму «перекочували» в програму, чи не загубилися вони у процесі програмування. Детальніше ці питання висвітлено в роботі [3].

Загальна теорія оптимальних алгоритмів. Третій блок проблем — це задачі побудови за наявної інформації про задачу оптимальних за точністю та оптимальних за швидкістю алгоритмів. Витоки такого підходу пов'язані з роботами С.М. Нікольського (оптимальні за точністю квадратурні формули на класах функцій) та В.М. Глушкова (з алгебри алгоритмів).

Формально поняття оптимальності обчислювального алгоритму задається за допомогою певного критерію. Таким критерієм може бути вимога, щоб розв'язок мав задану похибку або щоб алгоритм мав найбільшу можливу швидкість збіжності. Для застосувань конкретний зміст критерію має важливе значення.

Одним з основних критеріїв оптимальності наближеного розв'язання задач може слугувати вимога щодо його максимальної точності (або мінімальної похибки) при заданих обчислювальних ресурсах, які можна використати в процесі розв'язання задачі. До поняття ресурсу входять обсяг і точність вхідних даних задачі, обсяг вільної для використання пам'яті комп'ютера, ліміт часу обчислень на конкретному комп'ютері, запас математичного забезпечення комп'ютера тощо.

Великий внесок у цю проблематику зробили М.С. Бахвалов, Дж. Трауб, Х. Вожняковський, В.В. Іванов, В.К. Задірака, А.І. Березовський та ін.

М.С. Бахвалов запропонував метод «капель» для отримання оцінок знизу похибок методу на класі задач. Якщо похибка знизу ϵ , то, порівнюючи її з похибкою зверху для конкретного обчислювального алгоритму, можна зробити висновок щодо якості цього обчислювального алгоритму: оптимальний, асимптотично оптимальний або оптимальний за порядком точності. Зауважимо, що оцінка знизу

не залежить від самого обчислювального алгоритму.

В.В. Іванов разом зі своїми учнями запропонував будувати оптимальні за точністю обчислювальні алгоритми в умовах найбільш повного використання інформації про задачу, враховуючи при цьому неточність вхідної інформації. Тобто конкретна задача «занурюється» у більш вузький клас задач і при цьому збільшується оцінка знизу похибки (чим більша оцінка знизу, тим краще). Метод, який при цьому використовується, отримав назву «метод граничних функцій» [1, 2].

Обидва методи було запропоновано майже одночасно: метод «капель» у 1970 р., а метод граничних функцій (МГФ) у 1971 р. Результати Дж. Трауба і Х. Вожняковського із загальної теорії оптимальних алгоритмів з'явилися в 1983 р. [4].

Порівнюючи ці два методи, можна дійти висновку, що метод граничних функцій більш громіздкий порівняно з методом «капель», але він дозволяє будувати в точності оптимальні за точністю алгоритми, тоді як метод «капель» — лише оптимальні за порядком точності. Крім того, метод граничних функцій працює в умовах наближеного задання вхідної інформації. Інакше кажучи, він дозволяє отримати кращу точність за рахунок погіршення оцінки складності. Безумовно, метод граничних функцій доцільніше використовувати для розв'язання високоточних задач.

По суті, максимальне використання апріорної інформації про задачу є одним з резервів оптимізації обчислень в умовах, найбільш наближених до практики (апріорна інформація, оскільки розв'язується конкретна задача, у нас є, і вона, як правило, задана наближено).

Резерви оптимізації обчислень. Четвертий блок проблем — виявлення резервів поліпшення характеристик якості розв'язку та обчислювального процесу, які використовуються в сучасних комп'ютерних технологіях (КТ) розв'язання задач із заданими значеннями характеристик якості. Наведемо деякі з них.

Резерви зменшення похибок:

1) внаслідок неточності вхідних даних:

- уточнення класу задач;
 - коригування вхідної інформації;
 - підвищення точності вхідної інформації;
- 2) методу:
- використання оптимальних та оптимальних за порядком точності обчислювальних алгоритмів;
 - оптимізація інформаційного набору функціоналів (наприклад, оптимальна сітка вузлів при числовому інтегруванні);
 - збільшення кількості функціоналів в інформаційному наборі;
 - перехід в інший клас інформаційних операторів, що забезпечує кращий оптимальний порядок обчислювального алгоритму, ніж у даному класі інформаційних операторів;
 - повне використання вхідної інформації для звуження класу задач;
- 3) заокруглень:
- звуження класу задач (з метою зменшення кількості функціоналів в інформаційному наборі);
 - використання схем обчислень, що мінімізують швидкість накопичення похибок заокруглень;
 - збільшення довжини розрядної сітки;
 - вибір та моделювання правила заокруглення.
- Резерви зменшення процесорного часу:
- уточнення класу задач;
 - використання методів оптимального порядку точності;
 - поліпшення точності оцінок методу та заокруглень;
 - підвищення точності обчислення параметрів обчислювального процесу;
 - узгодження обчислювального алгоритму з архітектурою комп'ютера;
 - використання «швидкої арифметики» [5];
 - розпаралелювання обчислень [6];
 - використання спеціалізованих обчислювачів (вибір архітектури комп'ютера, що краще узгоджується з обчислювальним алгоритмом розв'язання задач певного класу).

Комп'ютерні технології. П'ятий блок проблем — розроблення комп'ютерних технологій розв'язання задач прикладної та об-

числювальної математики із заданими значеннями характеристик якості за точністю та швидкістю [3].

Концепція цієї технології полягає в наступному:

- виходячи з умов використання шуканого розв'язку прикладної задачі, яка описується деякою математичною моделлю, задають вимоги: до точності, з якою слід обчислити наближений розв'язок відповідної задачі обчислювальної математики; до процесорного часу обчислення розв'язку; до деяких інших характеристик обчислювального процесу побудови розв'язку; до інтерпретації отриманого розв'язку з урахуванням оцінок характеристик цього розв'язку та обчислювального процесу;

- з деякої множини відомих (або тих, що розробляються) обчислювальних алгоритмів і програм, орієнтованих на розв'язання класу задач обчислювальної математики, до якого зведена задана прикладна задача, за допомогою оцінок вказаних характеристик знаходять (або розробляють) о.а.-програму, яка зможе забезпечити на відповідному комп'ютері побудову розв'язку прикладної задачі із заданими обмеженнями на значення цих характеристик якості, або встановлюють, що о.а.-програми з вказаними властивостями для розв'язуваної задачі при заданій вхідній інформації на цей час не існує;

- за допомогою розробленої або наявної з необхідними властивостями о.а.-програми обчислюють розв'язок прикладної задачі із заданими значеннями характеристик якості, використовуючи при цьому вибрані комп'ютер і програмну систему.

Описана комп'ютерна технологія дає можливість:

- використати системний підхід як до самої постановки прикладної задачі, так і до її розв'язання;

- вивчити обчислювальну ситуацію для розв'язання прикладної задачі і виявити всі кроки, які потрібно зробити, щоб забезпечити розв'язання задачі із заданими значеннями характеристик якості розв'язку;

- на підставі обчислювальної ситуації розробити відповідну о.а.-програму для розв'язання задачі;

- виконати (за потреби) тестування для виявлення тієї програми, яка забезпечує розв'язання прикладної задачі із заданими значеннями характеристик якості розв'язку;

- використати запропоновану комп'ютерну технологію для розв'язання прикладної задачі з підвищеними вимогами до значень характеристик якості її розв'язку.

Наукові форуми «Питання оптимізації обчислень». Розвиток цієї тематики підтримується науковими форумами «Питання оптимізації обчислень», які проводяться в Інституті кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України починаючи з 1969 р. [7]. З 24 по 27 вересня 2019 р. на базі Інституту відбувся XLVI Міжнародний науковий симпозіум «Питання оптимізації обчислень» [8], присвячений 50-річчю від дня проведення I симпозіуму та літньої математичної школи з питань точності та ефективності обчислювальних алгоритмів.

Організаторами форуму виступили Міністерство освіти і науки України, Національна академія наук України, Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Кам'янець-Подільський національний університет імені Івана Огієнка, Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна та АТ «Інститут інформаційних технологій» (м. Харків). У роботі симпозіуму взяли участь вчені з різних країн — Білорусі, Німеччини, Польщі, Росії, Швейцарії, України (загалом 114 учасників).

Пріоритетними напрямками доповідей були такі:

- побудова гарантованих оцінок якості наближеного розв'язку задачі;

- побудова оцінок знизу точності та швидкодії типових задач обчислювальної математики;

- виявлення та уточнення апіорної інформації про задачу;

- побудова оптимальних та асимптотично оптимальних алгоритмів розв'язання типових задач обчислювальної математики;

- побудова оптимальних оцінок з урахуванням вибору найкращого інформаційного оператора для певного класу задач;

- побудова ефективних алгоритмів розв'язання типових класів задач обчислювальної та прикладної математики в різних моделях обчислень: послідовній, паралельній, квантовій, оптичній, в системі залишкових класів;

- побудова доказово стійких криптографічних та стеганографічних систем;

- побудова комп'ютерних технологій розв'язання задач прикладної та обчислювальної математики із заданими значеннями характеристик якості за точністю та швидкодією.

Отже, розглянута у статті тематика є актуальною і спрямованою на побудову ефективних (у тому числі оптимальних) методів розв'язання складних задач, використання методів паралельної математики, застосування комп'ютерних технологій розв'язання задач прикладної та обчислювальної математики із заданими значеннями характеристик якості за точністю та швидкодією.

REFERENCES

[СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ]

1. Ivanov V.V. *Metody vychisleniy na EVM* (spravocnoe posobie). Kyiv: Naukova Dumka, 1986.
[Иванов В.В. *Методы вычислений на ЭВМ* (справочное пособие). К.: Наук. думка, 1986.]
2. Zadiraka V.K. *Teoriya vychisleniya preobrazovaniya Fur'є*. Kyiv: Naukova Dumka, 1983.
[Задірака В.К. *Теорія вычислення преобразования Фурье*. К.: Наук. думка, 1983.]
3. Sergienko I.V., Zadiraka V.K., Lytvyn O.M. *Elementy zahalnoi teorii optymalnykh alhorytmiv ta sumizhni pytannia*. Kyiv: Naukova Dumka, 2012.
[Сергієнко І.В., Задірака В.К., Литвин О.М. *Елементи загальної теорії оптимальних алгоритмів та суміжні питання*. К.: Наук. думка, 2012]
4. Traub J.F., Wozniakowski H. *A General Theory of Optimal Algorithms*. Academic Press Inc. USA, 1980.
[Трауб Дж., Вожняковський Х. *Общая теория оптимальных алгоритмов*. М.: Мир, 1983.]
5. Zadiraka V.K., Oleksiuk O.S. *Kompiuterna aryfmetyka bahatorozriadnykh chysel*. Kyiv: Ekonomichna Dumka, 2003.
[Задірака В.К., Олексюк О.С. *Комп'ютерна арифметика багаторозрядних чисел*. К.: Економічна думка, 2003.]
6. Sergienko I.V., Khimich A.N. Mathematical modeling: from MESM to exaflops. *Visn. Nac. Akad. Nauk Ukr.* 2019. (8): 37. DOI: <https://doi.org/10.15407/visn2019.08.037>
[Сергієнко І.В., Хімич О.М. Математичне моделювання: від МЕЛМ до ексафлопсів. *Вісн. НАН України*. 2019. № 8. С. 37–50.]
7. Sergienko I.V., Zadiraka V.K., Babych M.D. *Pytannia optymizatsii obchyslen (1969–2009)*. Kyiv, 2009.
[Сергієнко І.В., Задірака В.К., Бабич М.Д. *Питання оптимізації обчислень (1969–2009)*. К.: Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, 2009.]
8. Sergienko I.V., Zadiraka V.K., Shvidchenko I.V. International Scientific Symposium «The issues of calculation optimization» (ISCOPT-XLVI), devoted to the 50th anniversary of the First Symposium and Summer Mathematical School on accuracy and efficiency of computational algorithms. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2020. (1): 200.
[Сергієнко І.В., Задірака В.К., Швідченко І.В. Міжнародний науковий симпозиум, присвячений 50-річчю від дня проведення I симпозиуму та літньої математичної школи з питань точності та ефективності обчислювальних алгоритмів. *Кібернетика і системний аналіз*. 2020 № 1. С. 200–202.]

I.V. Sergienko, V.K. Zadiraka, I.V. Shvidchenko

Glushkov Institute of Cybernetics of the National Academy of Sciences of Ukraine (Kyiv)

THEORY OF COMPUTATION: FROM GUARANTEED ESTIMATION OF ERRORS TO MODERN COMPUTER TECHNOLOGIES

The article traces the development of the theory of computation from the analysis of accuracy and efficiency of computational algorithms, testing their quality, construction of optimal algorithms, search of reserves of optimization of computation to construction of modern computer technologies for solving problems of applied and computational mathematics with set values of quality characteristics for accuracy and fast operation. The scientific research areas are briefly characterized, in which the Glushkov Institute of Cybernetics of NAS of Ukraine has unique world-class achievements in computational mathematics.

Keywords: error theory, quality testing, optimal algorithms, optimization of computation, computer technologies.