О достижении машинной точности при численном решении краевых задач Неймана–Дирихле

Семисалов Борис Владимирович
Конструкторско-технологический институт вычислительной техники СО РАН (Новосибирск)
e-mail: `ViBiS@ngs.ru`

Построение численных алгоритмов повышенной точности и устойчивости является ключевым пунктом при решении сложных вычислительных проблем различных областей науки и техники. В этом контексте достижение точности арифметики ЭВМ при использовании любых типов действительных чисел (float, double, quadruple и других) является тем идеалом, к которому должен стремиться каждый специалист по вычислениям. Конструирование алгоритмов, позволяющих получить такую точность при решении краевых задач для уравнений в частных производных, наталкивается на ряд фундаментальных проблем:

— метод приближения, используемый для аппроксимации решения, должен иметь максимальный порядок точности;

— задача линейной алгебры, которая соответствует исходной краевой задаче, должна быть хорошо обусловленной;

— алгоритм должен обладать максимальной скоростью сходимости при использовании минимального объёма памяти.

Выполнение таких требований необходимо для корректного решения многих классов сложных вычислительных проблем: задач с малыми параметрами и большими градиентами, задач оптимизации, многомерных (4D–10D) задач и других.

Отметим, что большинство существующих численных методов не удовлетворяют перечисленным требованиям. Например, метод конечных разностей с трёхточечной аппроксимацией второй производной для решения уравнения Пуассона в кубе с точностью в 16 знаков (double) требует порядка 10^{24} операций и $10^{24}s$ байт памяти, где s — объём памяти, занимаемый одним числом double. Очевидно, что даже мощнейший из современных суперкомпьютеров с такой задачей не справится.

В работе предлагается новый подход к численному решению краевых задач Неймана–Дирихле на основе нелокальных аппроксимаций неизвестных функций полиномами с узлами в нулях многочленов Чебышёва. Такой подход основан на идеях схем без насыщения [1] и спектральных методов [2], получивших развитие в работе автора [3].

Предложенный подход апеллирует к фундаментальному свойству рассматриваемых задач — информации о гладкости их решений и для любой степени гладкости r (в том числе $r = \infty$) позволяет получить асимптотику погрешности наилучшего приближения n^{-r} в супремум норме, где n — количество узлов интерполяции. Замечательным свойством предложенного подхода является возможность контроля погрешности (численной устойчивости) вычислений на основе анализа разложений матриц, аппроксимирующих производные.

Реализованный алгоритм позволяет достичь машинной точности только в случае высокой гладкости искомых решений и в областях канонической формы. В докладе намечены пути развития описанных идей для решения задач с потерей гладкости искомых функций в областях сложных форм.

Список литературы

[1] Бабенко К. И. Основы численного анализа. М.;Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2002.

[2] Boyd J. Chebyshev and Fourier Spectral Methods. Sec. Ed., University of Michigan, 2000.

[3] Семисалов Б. В. Нелокальный алгоритм поиска решений уравнения Пуассона и его приложения // Выч. мат. и мат. физ. 2014. Т. 54. №7. С. 1110–1135.