Karl L. E. Nickel

Bericht über neue Karlsruher Ergebnisse bei der Fehlererfassung von numerischen Prozessen

Aplikace matematiky, Vol. 13 (1968), No. 2, 168–173

Persistent URL: `http://dml.cz/dmlcz/103150`

BERICHT ÜBER NEUE KARLSRUHER ERGEBNISSE BEI DER FEHLERERFASSUNG VON NUMERISCHEN PROZESSEN

K. Nickel

Seit Frühjahr 1966 werden an der Technischen Hochschule Karlsruhe (Bundesrepublik Deutschland) „Fehlerschranken-Zahlen" und „Intervall-Zahlen" untersucht mit dem Ziel, die bei numerischen Prozessen unvermeidlichen Rundungsfehler unter Kontrolle zu bekommen. Der folgende Bericht soll erstmalig eine Übersicht über die bisher erzielten Ergebnisse geben.

I. INTERVALL-ZAHLEN

„Intervall-Zahlen" (englisch: „interval-numbers") wurden wohl zuerst von R. E. Moore (siehe etwa [4] und die dort zitierte Literatur) in die Numerische Mathematik eingeführt mit dem Zweck, exakte untere und obere Schranken für das Ergebnis eines numerischen Algorithmus zu erhalten. Insbesondere ging es ihm um die exakte Erfassung der unvermeidlichen Rundungsfehler bei den arithmetischen Operationen. Die von Moore erzielten numerischen Ergebnisse sind sehr eindrucksvoll, man vergleiche dazu [4].

Eine Intervall-Zahl Z nach Moore ist ein Zahlenpaar $[z_1, z_2]$ derart, dass für den exakten Zahlenwert von Z (der i. a. unbekannt ist!) die Ungleichung $z_1 \leqq Z \leqq z_2$ gilt. Z. B. kann $\pi := 3.141592 \ldots$ als $\pi := \langle 3.1415, 3.1416 \rangle$ dargestellt werden. Die theoretischen Hintergründe des Rechnens mit Intervall-Zahlen waren bis vor kurzem jedoch zunächst weitgehend ungelöst, ihre Anwendung war zum Teil mehr eine Kunst als eine Wissenschaft. Im Sommer 1966 begannen U. Kulisch und N. Apostolatus in Karlsruhe mit der Untersuchung der Menge $I(R)$ aller Intervall-Zahlen über dem Körper der reellen Zahlen R und mit den zugeordneten arithmetischen Operationen. Bis jetzt liegen zwei Arbeiten vor: „Grundlagen einer Maschinenintervallarithmetik" [1], und „Approximation der erweiterten Intervallarithmetik durch die einfache Maschinenintervallarithmetik" [2]. Es gelang darin, die in $I(R)$ vorliegenden algebraischen Strukturen vollständig zu beschreiben. Z. B. ist $I(R)$ kein Körper; zwar gelten assoziatives und kommutatives Gesetz, doch gibt es i. a. keine Inverse zur

Addition und Multiplikation und statt des distributiven Gesetzes gibt es nur eine Subdistributivität. Definiert man in naheliegender Weise rationale Intervallausdrücke und will mit ihnen in der gewohnten Weise rechnen, so ist fast zwangsläufig eine neue, „erweiterte“ Intervallarithmetik einzuführen. Bezüglich der Eigenschaften dieser erweiterten Intervallarithmetik und ihrer Approximation in einem Rechenautomaten verlgleiche man [1] und [2].

II. TRIPLEX-ZAHLEN

Trotz der grossen numerischen Erfolge, die mit den Moore-schen Intervallzahlen erzielt werden konnten, haben diese Zahlen zwei wesentliche Nachteile:

1. Wird ein numerischer Algorithmus einmal mit den bisher üblichen Gleitkommazahlen (engl. real numbers) und einmal mit Intervallzahlen durchgerechnet, so sind die beiden Ergebnisse nicht miteinander vergleichbar. Der Gleitkommawert brauchte sogar im Prinzip noch nicht einmal innerhalb des Intervalls der zugehörigen Intervallzahl zu liegen (obwohl das i. a. der Fall sein wird)!

2. Da sich Rundungsfehler i. a. weitgehend gegenseitig aufheben, kann es bei längeren Rechnungen durchaus vorkommen, dass die ersten Ziffern des (üblichen) Gleitkommawertes des Ergebnisses richtig sind, während durch die Schranken der entsprechenden Intervallzahl noch nicht einmal das Vorzeichen des Ergebnisses gesichert wird. Bei der alleinigen Verwendung von Intervallzahlen verzichtet man also in diesem Fall auf eine wertvolle Information.

Um diese Nachteile zu beheben, wurde in Karlsruhe der neue Begriff der „TRIPLEX-Zahl“ geschaffen (früher auch Fehlerschranken-Zahl gennant). Eine Triplex-Zahl Z repräsentiert ein Intervall plus „Mittelwert“ z und kann *entweder* als Zahlentripel $[\underline{z}, z, \bar{z}]$ mit $\underline{z} \leqq z \leqq \bar{z}$ und $\underline{z} \leqq Z \leqq \bar{z}$ dargestellt werden *oder* als Zahlentripel $(z, \underline{\xi}, \bar{\xi})$ mit $z - \underline{\xi} \leqq Z \leqq z + \bar{\xi}$.

Die beiden Darstellungen sind gleichwertig, die erste ist etwas einfacher zu beschreiben, während die zweite Vorteile bei der internen Darstellung und Verarbeitung in einen Rechenautomaten verspricht. Man kann die Triplex-Zahlen daher als Kombination der Intervallzahlen mit den üblichen Gleitkommazahlen ansehen, wodurch die Vorteile beider Schreibweisen erhalten bleiben (um den Preis eines grösseren Speicher- und Rechenaufwandes). Insbesondere genügt der Mittelwert z dem „Permanenzprinzip“ (vergl. [6]). Beispiele: $\pi := 3.14159265\ldots$ kann dargestellt werden als $\pi := (0.31415_{10}1,\ 0.31416_{10}1,\ 0.31416_{10}1)$ oder als $\pi := (0.31416_{10}1,\ 0.74_{10}-5,\ -0.73_{10}-5)$; die erste Verwirklichung liefert mit 18 Ziffern (ohne die führenden Nullen und die tiefgestellte Zehn) 5 „gültige“ Ziffern für π, während die zweite mit nur 12 Ziffern sogar 8 „gültige“ Ziffern sichert.

Im Bereich wissenschaftlicher Rechnungen werden heute fast ausschliesslich problemorientierte Programmiersprachen angewendet. Daher sollten alle Hilfsmittel, die zur Handhabung von Triplexzahlen erforderlich sind, im Rahmen einer dieser Sprachen zur Verfügung gestellt werden. Zu diesen Hilfsmitteln zählen Programme, die die arithmetischen Verknüpfungen von Triplexzahlen durchführen, Ein- und Ausgabe vermitteln, Typumwandlungen durchführen, Vergleichsoperationen realisieren, Standardfunktionen auf Triplexbasis auswerten usw. Aus diesem Grunde wurden die Triplexzahlen in die Sprache ALGOL 60 eingebaut, indem die dort verwendeten Zahlentypen „integer" und „real" noch um den Typ „triplex" erweitert werden. Eine Beschreibung dieser Erweiterung „TRIPLEX-ALGOL" findet man in H. W. WIPPERMANN, Definition von Schrankenzahlen in Triplex-ALGOL [10]. Von Herrn Wippermann wurde für den Karlsruher Rechenautomaten ZUSE Z23 (8K) ein Compiler erstellt. Die benutzten Techniken sind in [11] beschrieben, ein Bedienungs-Manual liegt vor [9]. Damit ist es nunmehr möglich geworden, das zunächst rein theoretische Triplex-ALGOL-Konzept in der Praxis zu erproben. Das System Triplex-ALGOL Karlsruhe wird seit dem Frühjahr 1967 in der Forschung und auch in der Studentenausbildung eingesetzt.

III. LOGISCHE ASPEKTE

In einer Note „Über die Notwendigkeit einer Fehlerschrankenarithmetik für Rechenautomaten" [5] wurde 1966 wohl erstmals gezeigt, dass die Anwendung von Intervall- oder Triplex-Zahlen nicht nur aus numerischen Gründen nützlich oder sogar notwendig ist. Vielmehr ist die saubere algorithmische und logische Beschreibung eines numerischen Prozesses im allgemeinen gar nicht möglich, wenn nicht eine exakte Erfassung oder wenigstens Abschätzung der Rundungsfehler vorgenommen werden kann. Insbesondere ist zum rechtzeitigen Beenden eines Algorithmus wie auch zum Verlassen der darin i. a. auftretenden Zyklen eine Kenntnis dieser Fehler zwingend erforderlich.

IV. EINIGE NUMERISCHE BEISPIELE

Die Note „Anwendung einer Fehlerschrankenarithmetik" [6] befasst sich mit der numerischen Berechnung von einigen in der Angewandten Mathematik benutzten Normen. Ihr sind die beiden folgenden Beispiele entnommen:

1. Berechnung von $S := \sum_{i=1}^{n} x_i^2$ mit

$$x_i := \frac{(i-1)(i-2)(i^2-2)}{(i+1)(i+2)(i^2+2)} - 1 .$$

Die numerischen Werte der Triplex-Zahl $S = [\underline{s}, s, \bar{s}]$ für $n = 1, 10, 100, 1000,$

10 000 sind:

n	$\underline{s}, s, \bar{s}$
1	1.000000000000000
	95
10	5.812423221351585
	82
	136
100	8.232033146658084
	052
	537
1 000	8.546157822443256
	188
	9536
10 000	8.578457069097228
	7124

Man beachte, dass für $n = 10\,000$ insgesamt rund 150 000 arithmetische Operationen auszuführen sind!

2. Berechnung von $\underset{1 \leqq t \leqq 2}{\operatorname{Min}} x(t)$ und $\underset{1 \leqq t \leqq 2}{\operatorname{Max}} x(t)$

für
$$x(t) := 1 + 16 \frac{(t-1)(t-2)(t^2-2)}{(t+1)(t+2)(t^2+2)} .$$

Unterteilung des Intervalls $1 \leqq t \leqq 2$ in 1000 Teilintervalle liefert

$$0.93806 \leqq \operatorname{Min} x(t) \leqq 0.93868 ,$$
$$1.06124 \leqq \operatorname{Max} x(t) \leqq 1.06201 .$$

In zwei Noten [7] und [3] werden nach zwei verschiedenen Verfahren die Nullstellen einer Funktion $F(t)$, d. h. die Lösungen von $F(t) = 0$ mit Fehlerschranken bestimmt. Z. B. ergibt die Auswertung der n-fachen Nullstelle $t = \frac{1}{2}$ der Gleichung $F(t) := (1-2t)^n = 0$ auf der ZUSE Z23 die Zahlenwerte $Z = [\underline{z}, z, \bar{z}]$:

n	$\underline{z}$	z	$\bar{z}$
1	0.499999999	0.500000000	0.500000001
3	0.499999999	0.500000000	0.500000001
5	0.499999991	0.500000000	0.500000009
7	0.499998582	0.500000000	0.500001417
9	0.499975778	0.500000000	0.500024222
11	0.499852528	0.500000000	0.500147472
51	0.413395353	0.500000000	0.586604646

Eine genaue Analyse ergibt, dass diese Werte optimal(!) sind, d. h. dass sie im Rahmen der Maschinengenauigkeit der Z23 nicht mehr verbessert werden können! Die Berechnung der (einfachen!) Nullstellen des TSCHEBYSCHEFF-Programms T_9 ergab im Intervall $0 \leqq t \leqq 1$ mit der neunziffrigen Maschine ZUSE Z23 die Schranken [0,0.000000003], [0.342020135, 0.342020150], [0.642787572, 0.642787643], [0.866025317, 0.866025507], [0.984807685, 0.984807815]. In der Note „Quadraturverfahren mit Fehlerschranken" [8] werden Formeln für bestimmte Integrale plus Fehlerschranken angegeben, ohne dass weitere Informationen über den Integranden gefordert werden (wie etwa Schranken für die Ableitungen, etc.). Es lassen sich Formeln für jede Genauigkeitsordnung aufstellen, die Ordnung für den Näherungswert ist i. a. um Eins höher als für die Zahlenschranken. Die folgende Tabelle zeigt Werte für

$$S := \int_0^1 \frac{dx}{1 + x} = \ln 2$$

bei der Unterteilung des Grundintervalls in n Teilintervalle nach einem Verfahren der Ordnung 7. Der Wert von S ist als Triplex-Zahl $S = [\underline{S}, S, \bar{S}]$ dargestellt, gültige Ziffern sind unterstrichen. Man beachte, dass diese Sicherheit für $\underline{S}$ und $\bar{S}$ *allein* aus der Rechnung stammt, ohne jede Kenntnis des exakten Integralwerte ln 2; während für die Unterstreichungen von S diese Kenntnis notwendig ist.

n	$\underline{S}$	S	$\bar{S}$
1	0.6931327160493801	0.6931547619047617	0.6931657848324568
2	0.6931469620747004	0.6931472426933734	0.6931474311115230
4	0.6931471783164204	0.6931471808897547	0.6931471829699344
8	0.6931471805407192	0.6931471805613659	0.6931471805798838
16	0.6931471805597900	0.6931471805599507	0.6931471805601043
32	0.6931471805599430	0.6931471805599446	0.6931471805599488
64	0.6931471805599438	0.6931471805599441	0.6931471805599500
128	0.6931471805599433	0.6931471805599436	0.6931471805599555
256	0.6931471805599427	0.6931471805599430	0.6931471805599665
512	0.6931471805599419	0.6931471805599422	0.6931471805599889
1024	0.6931471805599411	0.6931471805599416	0.6931471805600350

Literatur

[1] *N. Apostolatos* und *U. Kulisch:* „Grundlagen einer Maschinenintervallarithmetik". Computing, *2* (1967), 89–104.

[2] *N. Apostolatos* und *U. Kulisch:* „Approximation der erweiterten Intervallarithmetik durch die einfache Maschinenintervallarithmetik". Computing, *2* (1967), 181–194.

[3] *N. Apostolatos* und *U. Kulisch und K. Nickel:* „Ein Einschliessungsverfahren für Nullstellen". Computing, *2* (1967), 195—201.
[4] *Ramon E. Moore:* „Intervall analysis". Englewood Cliffs, N. J.: Prentice-Hall, Inc. 1966.
[5] *K. Nickel:* „Über die Notwendigkeit einer Fehlerschranken-Arithmetik für Rechenautomaten", Num. Math. *9*, 69—79.
[6] *K. Nickel:* „Anwendungen einer Fehlerschranken-Arithmetik". Erscheint in: Numerische Mathematik, Differentialgleichungen. Approximationstheorie. Internationale Schriftenreihe zur Numerischen Mathematik. Birkhäuser—Basel. 1968.
[7] *K. Nickel:* „Die vollautomatische Berechnung einer einfachen Nullstelle von $F(t) = 0$ einschliesslich einer Fehlerabschätzung". Computing, *2* (1967), 232—245.
[8] *K. Nickel:* „Quadraturverfahren mit Fehlerschranken". Erscheint in der Zeitschrift „Computing".
[9] *W. Hans Wippermann:* „Manual für das System Triplex-Algol". Karlsruhe, Institut für Angewandte Mathematik der TH Karlsruhe, Rechenzentrum.
[10] *W. Hans Wippermann:* „Definition von Schrankenzahlen in Triplex-Algol". Erscheint demnächst in der Zeitschrift „Computing".
[11] *W. Hans Wippermann:* „Realisierung einer Intervall-Arithmetik in einem ALGOL 60 — System." Elektronische Rechenanlagen 9 (1967), 224—233.

K. Nickel, (75) Karlsruhe, Elbingerstr. 44b, BRD.