

УДК 519.6; 537.226.2

PACS 77.22.Ch; 77.22.Ej; 77.22.Gm; 02.30.Nw; 02.70.-c

## ВПЛИВ РОЗРЯДНОСТІ ЧИСЕЛ НА ПРАВИЛЬНІСТЬ ТА ТОЧНІСТЬ ЧИСЕЛЬНОГО РОЗРАХУНКУ ПЕРЕХІДНИХ ДІЕЛЕКТРИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК

О. Флюнт

*Львівський національний університет імені Івана Франка  
вул. Драгоманова, 50, 79005 Львів, Україна  
e-mail: flunt@electronics.lnu.edu.ua*

У роботі показано, що максимальної розрядності чисел (19-20 значущих цифр) найбільш поширених мов програмування часто недостатньо для чисельного розрахунку перехідних характеристик з діелектричних спектрів за допомогою інтегрального перетворення Фур'є методом апроксимації спектрів кубічними сплайнами. Значні похибки значень перехідних характеристик можуть виникати у тих діапазонах, де величини часів або частот відрізняються від одиниці на багато порядків. Виникнення похибок пояснено утворенням математичних доданків великого порядку, значення яких близькі за модулем, але протилежні за знаками. Збільшення розрядності чисел за допомогою бібліотек високоточних обчислень з довільною заданою розрядністю (GNU MP та MPFR) дає змогу отримати коректні результати у широких частотних та часових діапазонах, що розширює діапазон застосування та підвищує надійність методу обчислення перехідних характеристик.

**Ключові слова:** перехідна характеристика, діелектричний спектр, інтегральні перетворення Фур'є, високоточні чисельні обчислення

Перехідна діелектрична характеристика матеріалу за струмами поляризації  $f(t)$  описує струм розряду заповненого досліджуваним середовищем і попередньо зарядженого до одиничної напруги конденсатора після різкого закорочення його виводів [1, 2]. Вона пов'язана з частотними залежностями дійсної  $\chi_1(\omega)$  та уявної  $\chi_2(\omega)$  частин комплексної діелектричної сприйнятливості  $\chi^*(\omega) = \chi_1(\omega) - j\chi_2(\omega)$  (діелектричними спектрами) за допомогою інтегрального косинус-та-синус перетворення Фур'є, відповідно

$$f(t) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \chi_1(\omega) \cos(\omega t) d\omega = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \chi_2(\omega) \sin(\omega t) d\omega, \quad (1)$$

де  $j$  – уявна одиниця,  $\omega$  – циклічна (кутова) частота. Зворотнє перетворення Фур'є дає змогу отримати діелектричний спектр з відомої перехідної характеристики

$$\chi_1(\omega) = \int_0^{\infty} f(t) \cos(\omega t) dt \quad \chi_2(\omega) = \int_0^{\infty} f(t) \sin(\omega t) dt. \quad (2)$$

Прямі (1) і зворотні (2) перетворення Фур'є часто використовують при опрацюванні експериментальних результатів у діелектричній спектроскопії, зокрема, для аналізу процесів поляризації у часовому просторі. Все частіше використовують зворотнє перетворення Фур'є для отримання частотних спектрів за результатами вимірювань перехідних характеристик, що зумовлено значним збільшенням швидкодії аналогово-цифрових перетворювачів. Проте при обчисленні інтегральних перетворень Фур'є часто виникають проблеми, які насамперед пов'язані з осциляційним характером підінтегральних функцій та повільною збіжністю інтегралів, що зумовлює важливість розробки нових досконалих методів обчислення інтегралів Фур'є.

У статтях [3, 4] запропоновано метод чисельного розрахунку перехідних характеристик за струмами поляризації середовища з експериментальних діелектричних спектрів. Відповідно до методу, експериментальні діелектричні спектри у формі, наприклад, частотної залежності дійсної частини комплексної ємності  $C_1(\omega)$ , відомі в точках  $\omega_m$  інтервалу від  $\omega_{min}$  до  $\omega_{max}$ , апроксимують кубічними сплайнами

$$C_1(\omega) = a_{0,m} + a_{1,m}\omega + a_{2,m}\omega^2 + a_{3,m}\omega^3, \quad (3)$$

де  $m$  – номер інтервалу від частоти  $\omega_{m-1}$  до  $\omega_m$ . Комплексна ємність  $C^*(\omega) = C_1(\omega) - j C_2(\omega)$  пов'язана з комплексною діелектричною сприйнятливістю через постійний множник, який залежить від геометричних розмірів досліджуваного зразка. Надалі це приводить до обчислення інтегралів типу

$$a_i \int_{\omega_{m-1}}^{\omega_m} \omega^i \cos(\omega t) d\omega, \quad (4)$$

які можна обчислити аналітично. Метод можна використовувати не лише для розрахунку перехідних характеристик, але і для перевірки відповідності діелектричних спектрів співвідношенню Крамерса-Кроніга, шляхом послідовного обчислення прямого та зворотного перетворень Фур'є. Проте в процесі застосування методу було помічено, що у разі його використання для розрахунку перехідних характеристик можуть виникати значні відхилення від точного результату у тих діапазонах, де значення часів або частот на багато порядків відрізняються від одиниці. Мета цієї роботи – проаналізувати причини таких відхилень та запропонувати методи для їхнього усунення.

Для з'ясування причин виникнення некоректних значень перехідної характеристики у певних діапазонах значень часу проаналізуємо доданки, які виникають у процесі обчислення інтегралів типу (4). Для цього запишемо вираз для найскладнішого з них з  $i = 3$

$$\int_{\omega_{m-1}}^{\omega_m} \omega^3 \cos(\omega t) d\omega = \left\{ \frac{3\omega^2}{t^2} \cos(\omega t) - \frac{6}{t^4} \cos(\omega t) + \frac{\omega^3}{t} \sin(\omega t) - \frac{6\omega}{t^3} \sin(\omega t) \right\} \Big|_{\omega_{m-1}}^{\omega_m} \quad (5)$$

Він містить доданки, які відрізняються між собою за степенями  $t$  на три порядки. Якщо значення  $t$  і  $\omega$  відрізняються від одиниці на незначну кількість порядків, то ніякої проблеми при чисельному сумуванні не виникне. Проте якщо, наприклад,  $t = 10^{-6}$  с, то різниця порядків величин доданків буде не меншою ніж 18. Для доданків інтеграла з значеннями  $\omega$ , на порядки меншими від одиниці, відмінність порядків доданків буде ще більшою. У більшості мов програмування, відповідно до стандарту IEEE Std. 754-2008 [5], розрядність чисел з підвищеною подвійною точністю становить 19-20 десяткових значущих цифр. Зрозуміло, що у такому разі чисельний розрахунок сум доданків у виразі (5) з буде приводити до зовсім неадекватних значень. До того ж, у різних діапазонах за порядками значень  $t$  та  $\omega$  співвідношення між величинами доданків у виразі (5) та співвідношення між значеннями інтегралів (4) з різними степенями  $\omega$  переважно будуть зовсім іншими, що ускладнює вирішення цієї проблеми методом перегрупування доданків та використання наближених виразів для сум або різниць окремих з них.

Надалі проведемо дослідження залежності результату обчислення перехідних характеристики від розрядності чисел. Це зробимо з використанням спектрів з степеневими залежностями сприйнятливості або ємності від частоти з нецілими значеннями показника степеня  $0 < n < 1$

$$\chi^*(\omega) = \chi_1(\omega) - j \chi_2(\omega) = B \left\{ \sin \frac{n\pi}{2} - j \cos \frac{n\pi}{2} \right\} \frac{1}{\omega^{1-n}}, \quad (6)$$

де  $B$  – стала. Вибір спектрів саме з таким законом дисперсії, насамперед, зумовлений тим, що експериментальні діелектричні спектри часто підлягають степеневим залежностям (6), які відображають універсальний закон релаксації [1, 2]. Крім того, перехідні характеристики, які відповідають діелектричним спектрам зі степеневими залежностями відгуку від частоти, можна обчислити аналітично з залежності як дійсної, так і уявної частин комплексної сприйнятливості від частоти з допомогою виразів

$$f(t) = \frac{2}{\pi} B \sin \left\{ \frac{n\pi}{2} \right\} \int_0^{\infty} \frac{\cos(\omega t)}{\omega^{1-n}} d\omega = \frac{1}{\pi} B \Gamma(n) \sin(n\pi) \frac{1}{t^n} \quad (7)$$

$$f(t) = \frac{2}{\pi} B \cos \left\{ \frac{n\pi}{2} \right\} \int_0^{\infty} \frac{\sin(\omega t)}{\omega^{1-n}} d\omega = \frac{1}{\pi} B \Gamma(n) \sin(n\pi) \frac{1}{t^n}, \quad (8)$$

де  $\Gamma(n)$  – гама-функція від  $n$ . Це дає змогу порівнювати чисельно отримані перехідні характеристики з аналітичними функціями.

На рис. 1 показано залежність доданків виразу (5) від частотних інтервалів (значення  $m$ ), на яких вони обчислені. Обчислення проведені з застосуванням бібліотек високоточних розрахунків GNU MP (GMP) та MPFR, написаних мовою Сі для проведення розрахунків з довільно-заданою розрядністю чисел [6, 7]. Однією з переваг цих бібліотек є те, що результати обчислень зовсім не залежать від розрядності машинного слова `mp_bits_per_limb` (32, 64 біти або більше) і тому вони будуть однаковими на різних комп'ютерах. Також, точність виражену у кількості бітів можна встановити окремо для кожної використовуваної змінної (включаючи навіть дуже малі значення точності). Наприклад, розрахунки з точністю 53 біти повністю відповідають обчисленням, проведеним з використанням чисел подвійної точності з плаваючою комою у мові Сі. Бібліотека MPFR, створена на базі GMP, дозволяє проводити обчислення, зокрема, високоточних значень тригонометричних функцій. Фрагмент програми для обчислення найпростішого інтеграла типу (4) з  $i = 0$  з точністю 256 біт ( $\sim 77$  значущих десяткових цифр), який присвоює змінній  $y$  значення визначеного інтеграла від  $om1$  до  $om2$ , написаний мовою Сі++ з використанням бібліотеки MPFR має вигляд

```
# include <mpfr.h>
...
mpfr_t t, om1, om2, f1, f2, sin1, sin2, y;
mpfr_inits2 (256, t, om1, om2, f1, f2, sin1, sin2, y, (mpfr_ptr) 0);
...
mpfr_mul (f1, om1, t, MPFR_RNDU);
mpfr_mul (f2, om2, t, MPFR_RNDU);
mpfr_sin (sin2, f2, MPFR_RNDU);
mpfr_sin (sin1, f1, MPFR_RNDU);
mpfr_sub (y, sin2, sin1, MPFR_RNDU);
mpfr_div (y, y, t, MPFR_RNDU);
...
mpfr_clear (t, om1, om2, f1, f2, sin1, sin2, y);
```

З рис. 1 видно, що два доданки інтеграла (5) дуже близькі за абсолютними значеннями, але мають протилежні знаки; значення третього доданку приблизно того самого порядку. Тому значення інтегралів, рівні сумі доданків на кожному з проміжків, буде втрачене за недостатньої розрядності чисел. Найбільша відмінність порядків між різними доданками дорівнює майже 18, що вже досягає критичної межі, якщо оперувати числами підвищеної подвійної точності. З рис. 2 видно, що із-за недостатньої розрядності чисел за  $t \lesssim 10$  Гц (за розрядності 64 біти) отримуємо зовсім некоректні сумарні значення інтегралів типу (5) з  $i = 3$  на проміжках від  $\omega_{m-1}$  до  $\omega_m$ . Коливання значень інтегралів та його доданків за великих значень  $\omega$  зумовлені великими значеннями періоду підінтегральної синусоїди  $\cos(\omega t)$  від  $\omega$  і не залежать від розрядності чисел.

На рис. 3 показано перехідні характеристики отримані за допомогою косинус перетворення Фур'є з дійсної частини діелектричного спектра обчислені методом апроксимації спектрів кубічним сплайнами з використанням чисел з різною розрядністю – 32, 64 та 256 біт. Видно, що використання чисел з розрядністю 64 біти, які приблизно відповідають числам з максимальною точністю для більшості звичайних

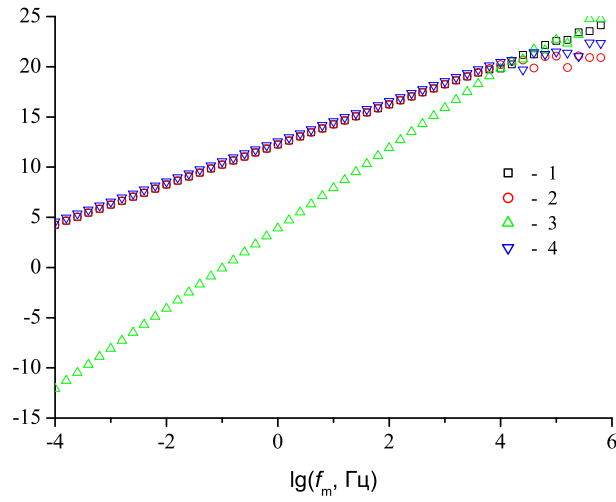


Рис. 1: Значення десяткових логарифмів різних доданків інтеграла (5) для якого  $i = 3$ ,  $t = 10^{-5}$  с обчислені у різних частотних інтервалах від  $\omega_{m-1}$  до  $\omega_m$  з використанням чисел з розрядністю 64 біти

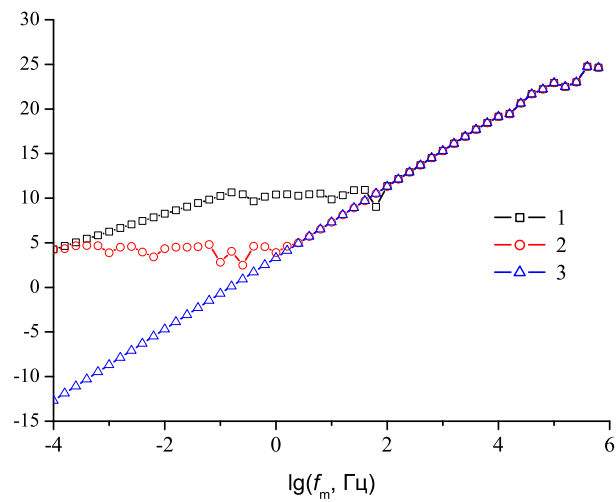


Рис. 2: Залежності значень десяткових логарифмів інтегралів (5) від частотних інтервалів від  $\omega_{m-1}$  до  $\omega_m$  на яких вони обчислені для  $t = 10^{-5}$  с з використанням чисел різної розрядності (1 – 32, 2 – 64, 3 – 256 біт)

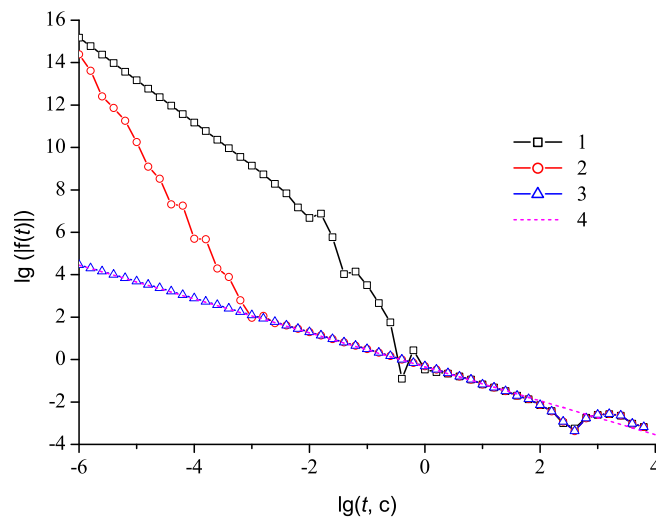


Рис. 3: Перехідна характеристика, обчислена за допомогою інтегрального косинус-перетворення Фур'є з частотної залежності дійної частини ємності, заданої у діапазоні від  $10^{-4}$  до  $10^6$  Гц, відповідно до степеневому закону  $\omega^{-(1-n)}$  з  $n = 0, 2$  з використанням чисел різної розрядності (1 – 32 біти, 2 – 64 біти, 3 – 256 біт). Пунктирна лінія (4) відповідає перехідній характеристиці, обчисленій аналітично

мов програмування (19-20 десяткових цифр), приводить до значних відхилень та розкиду значень на переважній частині спектра зі сторони малих значень часу. Перехідна характеристика обчислена за ще меншої розрядності (32 біти) приводить до ще більших відхилень результату від точних значень, що підтверджує те, що проблеми розрахунків пов'язані саме з надто низькою розрядністю чисел. Використання чисел з розрядністю 256 біт у дослідженому часовому інтервалі не приводить до помітних похибок у обчисленні перехідної характеристики. Відхилення у діапазоні великих значень  $t \gtrsim 10^2$  с зумовлені відсутністю вкладу інтеграла за частот менших ніж  $\omega_{min}$  і не залежать від розрядності чисел.

Можливе вирішення проблеми усунення чисельної похибки за допомогою групування доданків та побудови наближених у певних діапазонах значень  $t$ – та  $\omega$ – виразів було б доволі громіздким. Це зумовлено, насамперед, потребою попереднього аналізу співвідношення між значеннями доданків для отримання інформації про те, чи кінцева сума формується відносно малими доданками, чи різницею доданків великих порядків, залежно від діапазонів значень  $t$  та  $\omega$ . Також, потрібно було б враховувати вплив характеру дисперсії діелектричної проникності на співвідношення між різними доданками. Перевагою ж підвищенням розрядності чисел є те, що кінцева програма використовує точні вирази замість наближених для обчислення інтегралів Фур'є спектрів, апроксимованих кубічними сплайнами.

## Висновки

Використання бібліотеки обчислень з числами високої розрядності дозволяє усунути чисельну похибку, яка виникає у разі розрахунку перехідних характеристик за допомогою інтегрального перетворення Фур'є діелектричних спектрів методом апроксимації кубічними сплайнами. Показано, що причиною значних відхилень результатів від точних значень є велика різниця порядків величин різних доданків, яка при значних відмінностях порядків часів та частот від одиниці може перевищувати значення розрядів чисел максимальної точності для поширених мов програмування. Збільшення розрядності чисел дає змогу уникнути громіздкої процедури аналізу порядків величин різних доданків, робить раніше запропонований метод надійнішим та розширює часові та частотні інтервали використання методу обчислення перехідних характеристик.

## Список використаної літератури

1. A. K. Jonscher, J. Phys. D: Appl. Phys. **32**, №14, R57 (1999).
2. A. K. Jonscher *Universal Relaxation law* (London: Chelsea Press, 1996).
3. О. Флюнт, Вісник Львів. ун-ту. Сер. фіз. **44**, 226 (2009).
4. О. Флюнт, Теор. електротехніка **61**, 69 (2010).
5. *IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic. IEEE Std 754-2008* (New York: Inc. 3 Park Avenue, 2008).
6. Torbjörn Granlund and the GMP development team *The GNU Multiple Precision Arithmetic Library*, <http://gmplib.org/gmp-man-5.1.2.pdf>, (2013).
7. The MPFR team *The Multiple Precision Floating-Point Reliable Library*, <http://www.mpfr.org/mpfr-current/mpfr.pdf> (2013).

Стаття надійшла до редакції 9.9.2013  
прийнята до друку 14.10.2013

**EFFECT OF DIGIT BIT NUMBERS ON CORRECTNESS AND  
ACCURACY OF NUMERICAL CALCULATION OF  
DIELECTRIC TRANSITION CHARACTERISTICS**

**O. Fl'unt**

*Ivan Franko National University of Lviv  
Dragomanov St., 50, 79005 Lviv, Ukraine  
e-mail: flunt@electronics.lnu.edu.ua*

In the article it has been shown, that digit numbers of maximum precision variables (19-20 significant digits) often is not enough for correct numerical calculation of transition characteristics from dielectric spectra using integral Fourier transformation by the method of approximation spectra by cubic splines. Significant deviations may appear in the intervals, where values of time or frequency differ from one on many orders. Deviations origin has been explained by presence of the terms, values of which are close by module, but opposite on sign. Increasing of digit numbers of variables using the multiple precision arbitrary arithmetic libraries (GNU MP and MPFR) allows to obtain the correct results in wide temporal and frequency ranges, that extends the range of applicability and improves reliability of the calculation method of transition characteristics.

**Key words:** transition characteristic, dielectric spectra, integral Fourier transformations, multiprecision numerical calculations



## ВЛИЯНИЕ РАЗРЯДНОСТИ ЧИСЕЛ НА КОРРЕКТНОСТЬ И ТОЧНОСТЬ ЧИСЛОВОГО РАСЧЕТА ПЕРЕХОДНЫХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК

О. Флюнт

*Львовский национальный университет имени Ивана Франко  
ул. Драгоманова 50, 79005 Львов, Украина  
e-mail: flunt@electronics.lnu.edu.ua*

В работе показано, что максимальной разрядности чисел (19-20 значащих цифр) наиболее распространенных языков программирования часто недостаточно для численного расчета переходных характеристик с диэлектрических спектров с помощью интегрального преобразования Фурье методом аппроксимации спектров кубическими сплайнами. Значительные отклонения могут возникать в тех диапазонах, где значения времен или частот отличаются от единицы на много порядков. Возникновение ошибок объяснено образованием математических слагаемых, значения которых близки по модулю, но противоположны по знакам. Увеличение разрядности чисел при помощи библиотек высокоточных расчетов с произвольной заданной разрядностью (GNU MP и MPFR) дает возможность получать корректные результаты в широких частотных и временных интервалах, что расширяет диапазон использования и повышает надежность метода вычисления переходных характеристик.

**Ключевые слова:** переходная характеристика, диэлектрический спектр, интегральные преобразования Фурье, высокоточные численные расчеты