ÚVOD DO NUMERIKY
ZÁKLADNÍ PRINCIPY A POJMY

Doc. RNDr. Iveta Hnětynková, PhD.
Katedra numerické matematiky

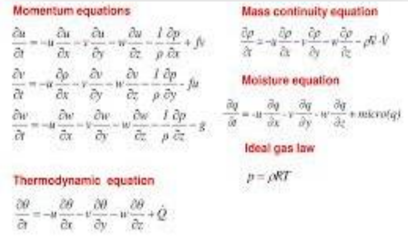
MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ FAKULTA
Univerzita Karlova

OD REÁLNÉHO PROBLÉMU K ŘEŠENÍ
ZDROJE CHYB

Reálný problém

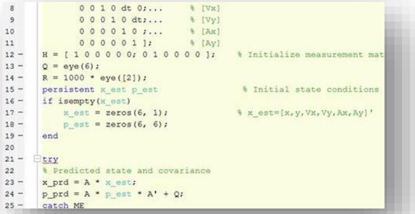
CHYBY MODELU

Matematický model



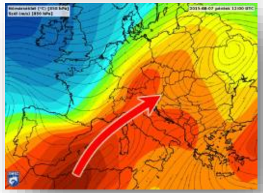
CHYBY APROXIMACE

Výpočetní metoda



FPA

Přibližné řešení



VERIFIKACE

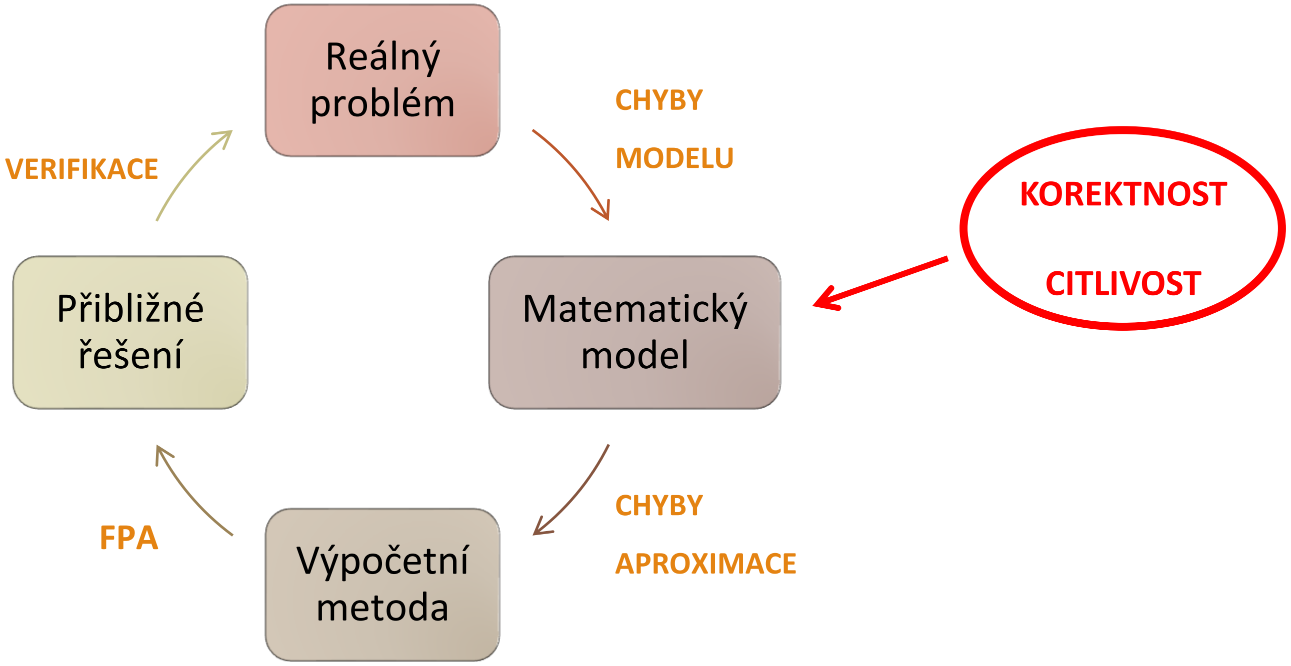
Model = zjednodušený popis problému jazykem matematiky (rovnice, tabulky, …), měřená data - často nepřesná

Výpočetní metoda = postup vedoucí k získání přibližného řešení, Proč přibližného?

Algoritmizace (program) = popis postupu řešení (sekvence instrukcí k jednoduchým operacím) – počítačová aritmetika není přesná (FPA)

Mohu zajistit, že je výsledek spolehlivý?
Analýza vlastností úloh, analýza chování metod, odhady chyb, ...

OD REÁLNÉHO PROBLÉMU K ŘEŠENÍ
NUMERICKÁ ANALÝZA



KOREKTNOST ÚLOHY
CITLIVOST NA CHYBY V DATECH

Jak se změní řešení soustavy lineárních algebraických rovnic při malé perturbaci dat?

Příklad:

$$2x + 6y = 8$$
$$2x + 6.00001y = 8.00001$$
$$\Rightarrow \quad x=1,\ y=1$$

$$2x + 6y = 8$$
$$2x + 5.99999y = 8.00002$$
$$\Rightarrow \quad x=10,\ y=-2$$

Značení: d – vstupní data (A, b)

U – úloha (A x = b)

U(d) – řešení pro daná data (přesné řešení x)

D – množina přípustných dat

KOREKTNOST ÚLOHY
CITLIVOST NA CHYBY V DATECH

Definice (Hadamard): Řekneme, že úloha U je korektní (well–posed), pokud:

1. Pro každé d z množiny D existuje řešení U(d).
2. Řešení U(d) je jednoznačné.
3. Řešení U(d) závisí spojitě na datech úlohy.

Jinak je úloha nekorektní (ill-posed).

Příklad (lineární model): A x = b, kde pravá strana a matice jsou měřená data

…. Kdy bude korektní a kdy ne? Lze ji modifikovat, aby byla vždy korektní?

PODMÍNĚNOST ÚLOHY
CITLIVOST NA CHYBY V DATECH

Značení: d – data, Δd – perturbace dat,

$U(d + \Delta d)$ – řešení pro perturbovaná data

$\Delta U := U(d + \Delta d) - U(d)$ …. Jak se změní řešení při malé perturbaci dat?

Definice (podmíněnost úlohy):

Řekneme, že korektní úloha U je dobře podmíněná, pokud malá relativní změna vstupních dat $|\Delta d|/|d|$ vyvolá malou relativní změnu $|\Delta U(d)|/|U(d)|$ řešení úlohy.

Jinak je úloha U špatně podmíněná.

CITLIVOST SOUSTAV LINEÁRNÍCH ROVNIC
PODMÍNĚNOST MATICE

Značení: $A\,x = b$ – soustava s A čtvercovou, regulární

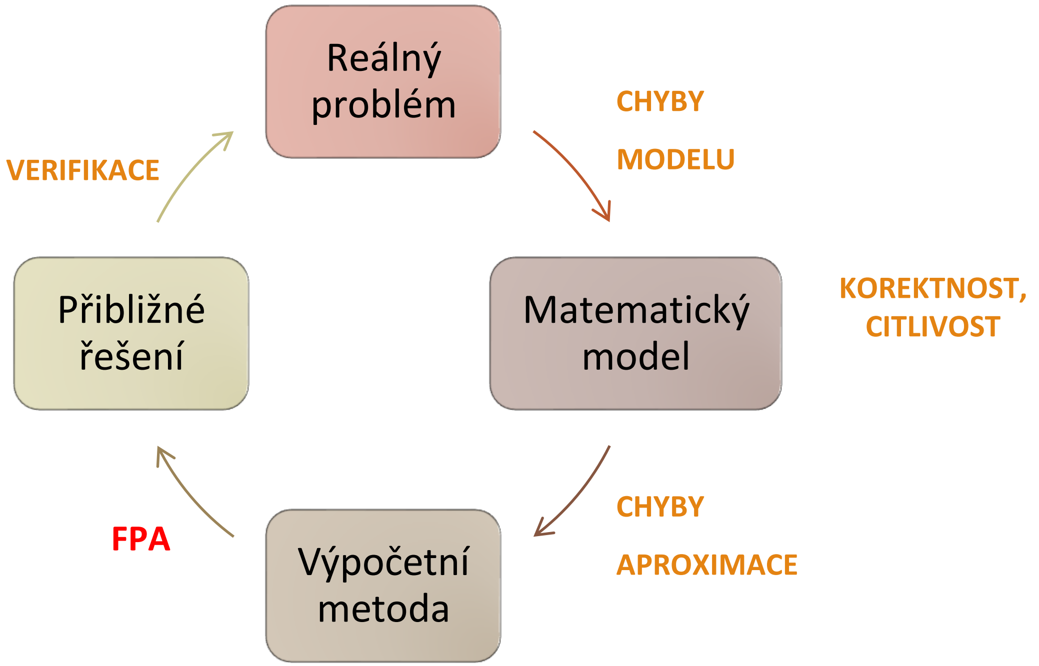
$A\,(x + \Delta x) = (b + \Delta b)$ …. Jak se změní řešení x při malé perturbaci b?

Odvození:

$$\left.\begin{aligned} \|\Delta x\| &= \|A^{-1}\Delta b\| \le \|A^{-1}\|\,\|\Delta b\| \\ \|b\| &\le \|A\|\,\|x\| \implies \|b\| / \|A\| \le \|x\| \end{aligned}\right\} \implies \underbrace{\|\Delta x\| / \|x\|}_{\text{relativní změna řešení}} \le \overbrace{\|A\|\,\|A^{-1}\|}^{\boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{A})}\,\underbrace{\|\Delta b\| / \|b\|}_{\text{relativní perturbace dat}}$$

- Podmíněnost matice A určuje míru citlivosti soustavy na perturbace v pravé straně.
- Je-li $\boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{A})$ malá, soustava je dobře podmíněná (tj. málo citlivá).
- Je-li $\boldsymbol{\kappa}(\boldsymbol{A})$ velká, nemáme nic zaručeno.

OD REÁLNÉHO PROBLÉMU K ŘEŠENÍ
NUMERICKÁ ANALÝZA



FPA: floating point arithmetic (aritmetika s plovoucí řádovou čárkou)

ARITMETIKA S PLOVOUCÍ ČÁRKOU
JAK JE VÝPOČET PŘESNÝ?

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{4} + \ldots$$

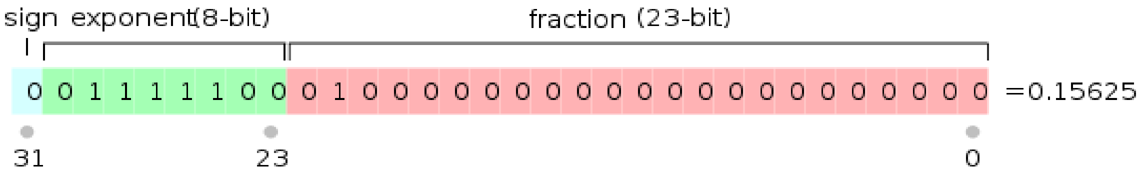
Přesně: ∞
Počítač: 22,06

$$\frac{1 - \cos(x)}{x^2} \quad \text{pro} \quad x = 1{,}2.10^{-8}$$

Přesně: 0,5
Počítač: 0,77

Reprezentace čísel: fl – floating point numbers (IEEE 754 standard)

Číslo je uloženo v normalizované binární reprezentaci v určitém počtu bajtů (single - 4, double - 8, …). Jeden bajt má 8 bitů pro uložení 0 nebo 1.



přesnost single

$$\boxed{1.01011 \ \text{x} \ 2^5}$$

mantisa
max. 23 pozic

exponent
mezi -126 a 127

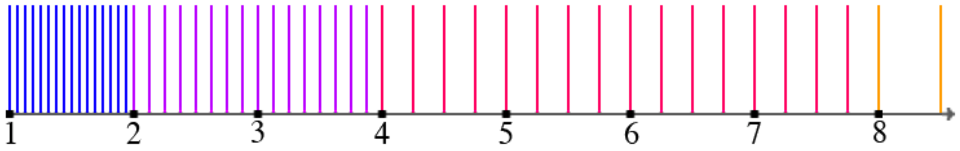
PŘESNOST ULOŽENÍ ČÍSEL
STROJOVÁ PŘESNOST

Číslo 0,1 má nekonečný binární rozvoj 1.1001100110011001 ….. × 2^{-4}. Po zaokrouhlení tedy

chyba v single

fl (0,1) ~ 0,10000000238418579101

Přesnost: Počet čísel z intervalu <2^k , 2^{k+1}>, která lze uložit přesně, je konstantní.



=> Relativní přesnost čísel se zachovává.
Větší čísla jsou uložena s menší absolutní přesností.

PŘESNOST FPA OPERACÍ
STROJOVÁ PŘESNOST

Ztráta přesnosti při operacích (sčítání, násobení, …):

$$fl\,(x * y) = (x * y)\,(1 + \delta)\,, \qquad |\delta| < C\,\varepsilon^{mach}$$

$\sim 10^{-8}$ přesnost single

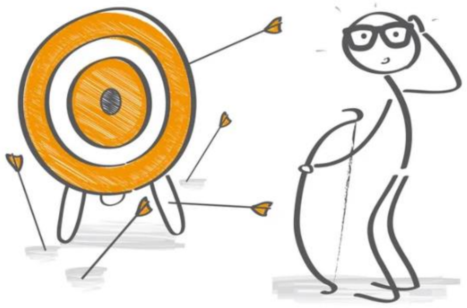
$\sim 10^{-16}$ přesnost double

ε^{mach} - strojová přesnost (machine precision)

Neplatí vlastnosti z přesné aritmetiky (komutativita, …):

fl (0,1 + 100 000 000 – 100 000 000) = 0

fl (100 000 000 – 100 000 000 + 0,1) = 0,1



PŘESNOST ČÍSEL A OPERACÍ
ZAOKROUHLOVÁNÍ A CANCELACE

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}=1+\frac{1}{2}+\frac{1}{3}+\frac{1}{4}+\ldots+\frac{1}{10^{1000000000}}+\ldots=\infty$$

Single: 15,40
Double: 22,06

$$A + B \overset{fl}{=} A$$

ztráta přesnosti zaokrouhlováním

$$\frac{1-\cos(x)}{x^2}=0{,}5$$ pro $x=1{,}2.10^{-8}$

Single: 0
Double: 0,77

Přesně: $\cos(x)=0{,}999999999999999928$

Double: $\cos(x)=0{,}999999999999999889$

$1-\cos(x)=0{,}7200000000000000.10^{-16}$

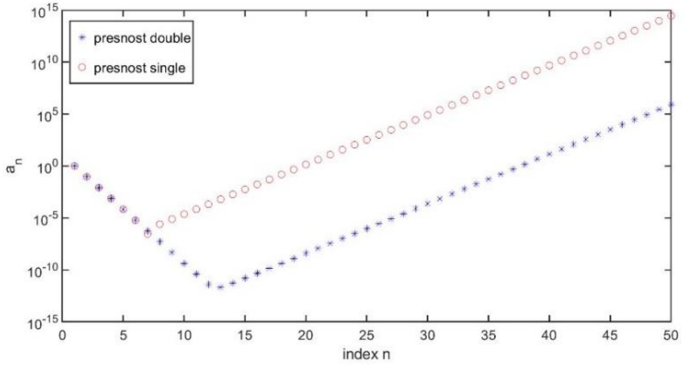
$1-\cos(x)=1{,}1102230246251565.10^{-16}$

$$A - B \overset{fl}{=} ?$$

ztráta přesnosti rušením platných cifer

ZVYŠOVÁNÍ PŘESNOSTI ARITMETIKY
NEMUSÍ ŘEŠIT PROBLÉM

$$a_0 = 1, a_1 = \frac{1}{11}, \qquad a_{n+2} = \frac{34}{11} a_{n+1} - \frac{3}{11} a_n$$ … rychle klesající posloupnost



Nevýhody zvyšování přesnosti:

- zvyšuje paměťové náklady
- zpomaluje výpočet
- nemusí řešit problém

$$u(x,y) = 333{,}75y^6 + x^2(11x^2y^2 - y^6 - 121y^4 - 2) + 5{,}5y^8 + \frac{x}{2y}$$ pro $x = 77617, y = 33096$

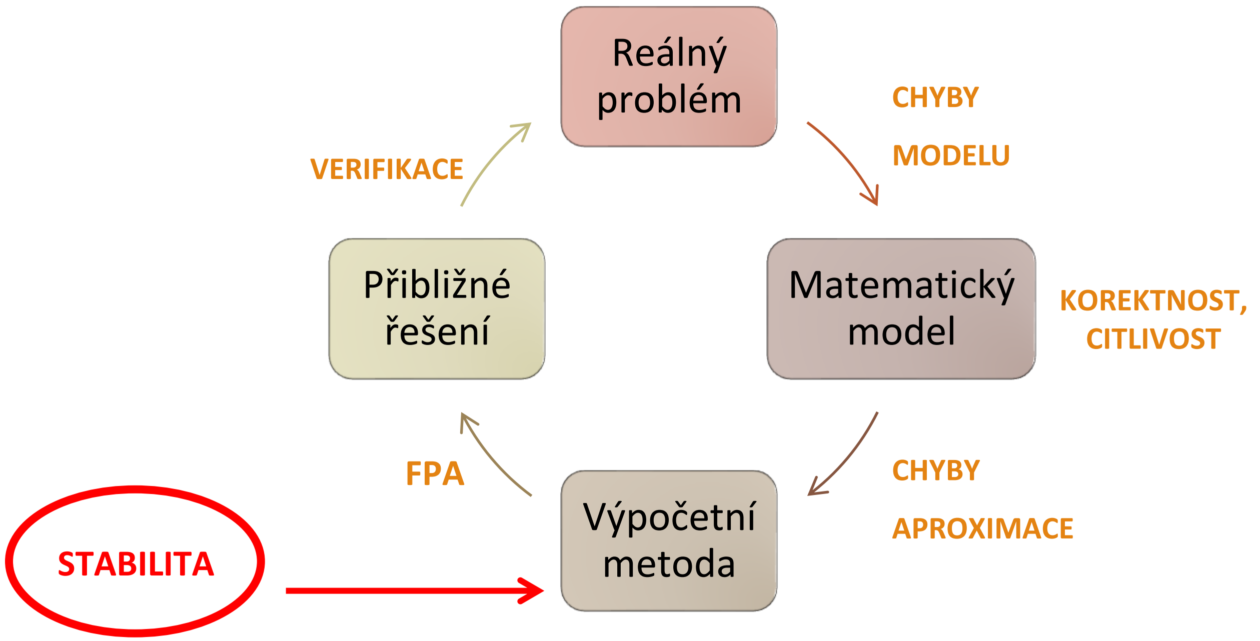
Single	1,172603
Double	1,1726039400531
Quadruple	1,172603940053178760

Přesně: - 0,827396

JAK Z TOHO VEN?
SPOLEHLIVOST VÝPOČTU

Reálné výpočty: složité modely, velká data -> miliardy operací v FPA

Chceme metodu (a její implementaci), která nebude kumulovat zaokrouhlovací chyby.



STABILITA VÝPOČTU
VHODNÁ METODA A IMPLEMENTACE

Příklad: Vyhneme se odčítání blízkých čísel a tím rušení platných cifer

$$\frac{1-\cos(x)}{x^2} = \frac{1}{2}\left(\sin\left(x/2\right)/\left(x/2\right)\right)^2 \quad \text{pro} \quad x = 1{,}2.10^{-8}$$

Single: 0,5
Double: 0,5

Příklad: $x^2 - 56x + 1 = 0$ spočteme kořeny vzorcem $r_{1,2} = (-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac})/(2a)$

Double: $r_{1,2} = 28 \pm 27{,}982$ …. chyba jen v r_2

Využijeme-li vztahy $r_1 + r_2 = -b/a,$

$r_1 r_2 = c/a,$ $\longrightarrow$ $r_2 = 1/55{,}982 = 0{,}0178629$

STABILITA VÝPOČTU
VHODNÁ METODA A IMPLEMENTACE

Matematicky ekvivalentní postupy nevedou v FPA nutně na stejnou aproximaci řešení!

Příklad: varianty Gramm-Schmidtova ortogonalizačního procesu CGS, MGS, ICGS (bude na přednášce)

When you solve a maths problem 3 times

and get different answer each time

STABILITA VÝPOČTU
VHODNÁ METODA A IMPLEMENTACE

Značení: d - vstupní data
f(d) - výsledek spočtený algoritmem v přesné aritmetice
fl (f(d)) - výsledek spočtený algoritmem v dané FPA

Definice (zpětná stabilita algoritmu):
Nechť f(d) je výsledek spočtený přesným algoritmem a fl (f(d)) výsledek spočtený v FPA.
Řekneme, že algoritmus je zpětně stabilní, pokud existují data $(d + \Delta d)$ taková, že

$$fl\,(f(d)) = f(d + \Delta d)$$

a navíc $|\Delta d| \,/\, |d|$ je malé (řádu strojové přesnosti dané FPA).

- Zpětně stabilní algoritmus dává přesné řešení pro úlohu blízkou úloze původní.
- Je málo citlivý na zaokrouhlovací chyby.

NESTABILITA VÝPOČTU
GAUSSOVA ELIMINACE

Příklad: $\begin{bmatrix} \varepsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$

$$\begin{bmatrix} \varepsilon & 1 \\ 0 & (1 - 1/\varepsilon) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ (2 - 1/\varepsilon) \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} x_2 &= 1 + \varepsilon/(\varepsilon\text{-}1) \sim 1 - \varepsilon \\ x_1 &= 1 - \varepsilon/(\varepsilon\text{-}1) \sim 1 + \varepsilon \end{aligned}$$

Pokud ε bude blízko ε^{mach}, pak v FPA dostaneme chybné: $x_2 = 1$, $x_1 = 0$ .... proč?

$$x_2 = \frac{(2-1/\varepsilon)}{(1-1/\varepsilon)} \sim 1 \quad \Rightarrow \quad x_1 = \frac{(1-x_2)}{\varepsilon} \sim 0$$

Pivotace (řádková):

- V každém eliminačním kroku začneme řádkem s největším diagonálním prvkem (v abs. hodnotě).
- Může pomoci zlepšit stabilitu. Pomůže vždy?

NESTABILITA VÝPOČTU
GAUSSOVA ELIMINACE

Zvolme hodnoty proměnných (řešení), například

$$[1, -1, 1, \ldots, -1, 1, -1]$$

a **dopočtěme** pravou stranu

$$[0, -3, 0, -3, \ldots, 0, -3, 0, -2].$$

Řešíme soustavu tvaru

$$\left[\begin{array}{cccccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -3 \\ -1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 1 & 0 & 1 & -3 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & -2 \end{array}\right],$$

ale pro 56 neznámých. Počítač spočte **nepřesné řešení**

$$[1, -1, 1, \ldots, -1, 1, -1, 1, 0, 2, -1].$$

Vysvětlení:
Při eliminaci rostou hodnoty v posledním sloupci matice a v pravé straně. Při zpětné eliminaci dojde k zaokrouhlovacím chybám.

Pivotace: Pomůže, ale ne vždy.

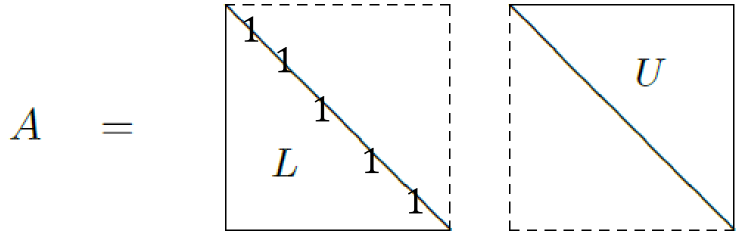
Přesto na GE stojí jedny z nejpoužívanějších algoritmů pro řešení soustav rovnic (komplikovanější, vylepšené, robustní). Viz knihovny LAPACK, …

GAUSSOVA ELIMINACE JAKO LU ROZKLAD
PROSTÁ GE

Definice: Nechť A je regulární. Rozklad tvaru A = L*U, kde L je dolní trojúhelníková a U je horní trojúhelníková, nazveme LU rozkladem matice A.

Prostá GE (bez pivotace): lze-li provést, pak dává LU rozklad A

U := matice A po elementárních úpravách
L := matice, do níž po sloupcích
ukládáme násobitele řádků



- Neuvažujeme-li pivotaci, nemusí jít GE provést.
- LU rozklad regulární A nemusí existovat.

GAUSSOVA ELIMINACE JAKO LU ROZKLAD
PROSTÁ GE

Věta (o stabilitě LU):

Nechť L, U jsou výsledkem GE pro matici A řádu n počítané v FPA se strojovou přesností ε^{mach}. Označme ‖.‖ maximovou normu matice. Potom existuje matice ΔA tak, že (A + ΔA) = LU, kde

$$\|\Delta A\| \leq 2n\, \varepsilon^{mach}\, \|L\|.\|U\| + O((\varepsilon^{mach})^2).$$

matice blízká původní?

Stabilita prosté GE: bude ‖ ΔA ‖/ ‖ A ‖ malé ?

- odhad závisí na velikosti ‖L‖.‖U‖ / ‖A‖
- ‖L‖, ‖U‖ mohou být velké

=> metoda obecně nemusí být stabilní

GAUSSOVA ELIMINACE S PIVOTACÍ
PODMÍNEČNÁ ZPĚTNÁ STABILITA

- GE s řádkovou pivotací lze provést pro každou A regulární.
- Označme P permutační matici permutující řádky A do pořadí, které odpovídá pořadí v GE s řádkovou pivotací. Pak

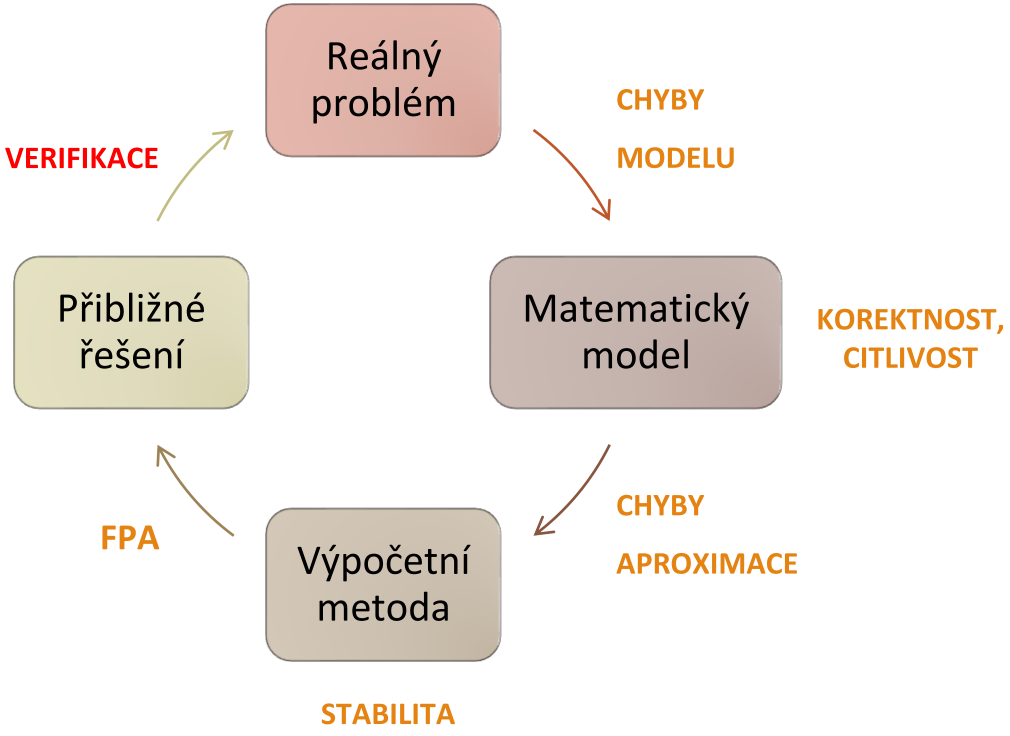
$$PA = LU.$$

Důsledek: Na GE s pivotací lze nahlížet jako na základní GE pro řádkově permutovanou matici.

Stabilita GE s řádkovou pivotací:

- Prvky v matici L (násobitele řádků) jsou menší než 1, tedy $\|L\| \leq n$.
- Výpočet bude zpětně stabilní, pokud bude malý růstový faktor $\| U \| / \| A \|$.
- Řekneme, že LU s řádkovou pivotací je podmínečně zpětně stabilní.

OD REÁLNÉHO PROBLÉMU K ŘEŠENÍ
PŘESNOST APROXIMACE



Analýza chyb:

- musí zahrnovat chyby všeho druhu – modelování, aproximační, zaokrouhlovací, …
- je komplikovaná -> v ZNM uvidíme jen základní výsledky (pro FPA bez důkazů)

ANALÝZA CHYB A JEJICH ODHADY
ZÁKLADNÍ POJMY

Značení: U – úloha, d – vstupní data

U(d) – přesné řešení

fl(U(d)) – výsledek spočtený v FPA

Chyby: |fl(U(d)) - U(d)| … přímá absolutní chyba

|fl(U(d)) - U(d)| / |U(d)|… přímá relativní chyba

| Δd | … zpětná absolutní chyba ((d + Δd) je z definice zpětné stability)

| Δd |/ | d | … zpětná relativní chyba

REÁLNÝ PROBLÉM
HLEDÁNÍ PŘIBLIŽNÉHO ŘEŠENÍ

Základní suroviny:

- Analýza korektnosti a citlivosti úlohy

- Vhodná výpočetní metoda
- Vhodná implementace na počítači
  → stabilita výpočtu

- Zpětná kontrola spolehlivosti výsledku
  → odhady chyb

JAKÉ ÚLOHY BUDEME ŘEŠIT
HRUBÝ PŘEHLED

1. část kurzu:

- Soustavy lineárních rovnic $Ax = b$
- Lineární aproximační problémy $Ax \sim b$
- Částečný problém vlastních čísel $Av = \lambda v$
- Úplný problém vlastních čísel

2. část kurzu:

- Nelineární algebraické rovnice
- Optimalizační úlohy
- Aproximace funkcí
- Aproximace integrálů
- Obyčejné diferenciální rovnice