



Akademia Górniczo-Hutnicza
im. Stanisława Staszica w Krakowie

AGH University of Science
and Technology

Metody numeryczne

Janusz Miller

Katedra Informatyki Stosowanej
AGH University of Science and Technology

5.10.2021

- ① Kincaid D., Cheney W.: Analiza numeryczna, WNT 2006
- ② Dudek-Dyduch E., Wąs j., Dutkiewicz L., Grobler-Dębska K. Gudowski B.: Metody numeryczne - Wybrane zagadnienia, Wydawnictwa AGH Kraków 2011
- ③ Wybrane zagadnienia numeryczne - analiza i dobór algorytmów, pod red. J.Wąsa Wydawnictwa AGH Kraków - w druku.
- ④ Strang G.: Differential Equations and Linear Algebra, Wellesley - Cambridge Press 2009
- ⑤ Nocedal J., Wright S.J.: Numerical Optimization, Springer 1999 (lub późniejsze, np. 2006)
- ⑥ Burden R., Faires J., Numrical Analysis, Prindle, Weber & Schmidt - Kent, Boston 1985

Część I

Analiza błędów

Plan



- 1 Zadania i algorytmy numeryczne
- 2 Problem źle uwarunkowany
- 3 Źródła błędów
- 4 Błędy operacji arytmetycznych – arytmetyka komputerowa
- 5 Arytmetyka przedziałowa

Zadanie numeryczne



Zadanie numeryczne (problem numeryczny) – niedwuznaczny opis powiązania funkcjonalnego między **danymi wejściowymi** czyli „zmiennymi niezależnymi” zadania i **danymi wyjściowymi**, tj. szukanymi wynikami.

Dane wejściowe i wyjściowe można przedstawić za pomocą wektorów skończenie wymiarowych.

Algorytm numeryczny



AGH

www.agh.edu.pl

Algorytm dla danego zadania numerycznego – pełny opis poprawnie określonych operacji przekształcających wektor dopuszczalnych danych wejściowych na wektor danych wyjściowych.

Dokładniej:

An algorithm is a procedure that describes, in an unambiguous manner, a finite sequence of steps to be performed in a specified order¹.

¹R.L.Burden, J.D.Faires: Numerical analysis. PWS-Kent, 1985

Problem źle uwarunkowany

Przykład



Przykład problemu źle uwarunkowanego:

- 1 Dany jest układ równań liniowych

$$\begin{cases} 2x + 0,6667y = 2 \\ x + 0,3333y = 1 \end{cases}$$

który ma dokładne rozwiązanie $x = 1, y = 0$.

- 2 Szukamy dokładnego rozwiązania „podobnego” układu równań

$$\begin{cases} 2,0003x + 0,6667y = 2 \\ x + 0,3333y = 1 \end{cases}$$

Dokładne rozwiązanie $x = 10000, y = -30000$.

Algorytm jest bezbłędny, obliczenia przeprowadzone bez żadnych przybliżeń.

Czy jest tu coś „zaskakującego”?

Problem źle uwarunkowany

Określenie²



Pojęcie **uwarunkowania** wiąże się z wrażliwością rozwiązania zadania na małe zmiany (zaburzenie) danych początkowych.

Zadanie jest **źle uwarunkowane**, jeżeli małe zmiany danych wejściowych powodują duże zmiany wyników.

Dlaczego numeryczne rozwiązywanie problemów źle uwarunkowanych należy do zadań trudnych?

Bo występujące w algorytmie dane prawie zawsze są zaburzone. Jaki więc będzie tego skutek?

²D.Kincaid, W.Cheney: Analiza numeryczna, PWN Warszawa, 2002.

Błąd bezwzględny i względny



Przyjmijmy oznaczenia:

- x_0 – wartość dokładna,
- x – wartość przybliżona (obarczona błędem).

Błąd bezwzględny:

$$\Delta = |x_0 - x|.$$

Błąd względny:

$$\delta = \frac{|x_0 - x|}{|x_0|}, \quad \text{gdy } x_0 \neq 0.$$

Uwagi:

- 1 Który błąd jest lepszą miarą dokładności np. pomiaru?
- 2 Definicja błędu względnego wyklucza przypadek, gdy $x_0 = 0$. W praktyce nie wyznacza się błędu względnego, gdy $x_0 \approx 0$. Np. w MATLABie jako "uniwersalną" miarę dopuszczalnego błędu stosowane jest wyrażenie

$$\max(\text{RelTol} \cdot |x|, \text{AbsTol}) \cdot \epsilon$$

Źródła błędów



Główne źródła błędu to:

- błędy danych wejściowych,
- błędy przetwarzania danych,
- błędy wyprowadzania danych wyjściowych.

Błędy danych wejściowych



Niedokładności wprowadzanych danych wejściowych:

- W przypadku wielkości fizycznych lub statystycznych – ograniczona dokładność pomiaru.
- Liczby niewymierne (np. π) i prawie wszystkie wymierne są reprezentowane w komputerze ze skończoną dokładnością i w skończonym zakresie.

Błąd wyprowadzania danych



Powodowany ograniczeniem dokładności wyprowadzanych danych wyjściowych – np. konwersja do systemu dziesiętnego z zadaną ograniczoną dokładnością.

Błędy przetwarzania danych



Ważne rozróżnienie:

- 1 Błędy generowane przez algorytm – powstają także wtedy, gdy dane i operacje arytmetyczne są bezbłędne.
- 2 Błędy zaokrągleń – błędy reprezentacji liczb w komputerze i błędy operacji arytmetycznych.

Ad 1. Błędy algorytmu



Rozważając zagadnienie uwarunkowania zadania przyjmujemy, że algorytm jest dokładny.

Algorytm taki daje wynik dokładny tylko wtedy, gdy dane wejściowe i obliczenia są pozbawione błędów.

Metody numeryczne wykorzystują także algorytmy niedokładne, tj. takie, które prowadzą tylko do przybliżonej wartości dokładnego wyniku – np. wynik dokładny wymagałby nieskończonej dokładności i nieskończonej liczby operacji (co jest sprzeczne z definicją algorytmu).

Ad 1. Błędy algorytmu

Błąd obcięcia



Błąd obcięcia (*truncation*) - powstaje gdy przybliżamy sumę nieskończoną sumą skończoną,
albo szerzej: gdy przerywamy obliczenia przed otrzymaniem końcowego wyniku (przed ich końcem),

Ad 1. Błędy algorytmu

Przykłady błędów spowodowanych niedokładnością algorytmu



AGH

- Błąd wynikający z przyjęcia uproszczonej relacji między danymi wyjściowymi a wejściowymi, np. każdy model matematyczny zjawiska fizycznego (także biologicznego, społecznego itp.) jest uproszczeniem rzeczywistości.
- Błąd pochodzący od zastąpienia ciągu (szeregu) nieskończonego ciągiem (szeregiem) skończonym.
- Błędy algorytmów obliczających pewne wartości metodami przybliżonymi, np. iteracyjne metody rozwiązywania równań algebraicznych i różniczkowych, obliczania całek oznaczonych, optymalizacji, zastąpienie pochodnej skończonym ilorzem różnicowym itp.
- Błąd dowolnego algorytmu rozwiązującego zadanie, którego wynikiem dokładnym jest liczba niewymierna.

Ad 2. Błędy zaokrąglenia i reprezentacji



Zaokrąglenia (*round-off*) - różnica między przyjętym przybliżeniem, a wartością dokładną np. π

Reprezentacji (*representation*) - jedna z form błędu zaokrąglenia - gdy znamy dalsze cyfry, ale nie mieszczą się w przyjętym formacie zapisu danych.

Zmiennoprzecinkowa reprezentacja liczb



- Zapis liczb całkowitych i ułamków w systemie dwójkowym.
- Zapis liczb rzeczywistych w formacie zmiennoprzecinkowym (zmiennopozycyjnym):

$$x = (-1)^s \cdot m \cdot 2^c,$$

$$m \in [1, 2), \quad c \in \mathbb{Z}.$$

- Standard IEEE 754³

³https://en.wikipedia.org/wiki/IEEE_754

Zmiennoprzecinkowa reprezentacja liczb c.d.

Standard IEEE 754



- double: 64 bity:
 s - 1 bit,
 c - 11 bitów,
 m - 52 bity.
- Zapis liczby przeciwnej - zmiana bitu s TYLKO
- Kod c z zakresu 001 - 7fe
 realmin: 001 000000... (2.2251e-308)
 1: 3ff 00000000...
 2: 400 00000000...
 realmax: 7fe 111111... (1.7977e+308)
 kod liczb > realmax Inf : 7ff 0000000000...

Zmiennoprzecinkowa reprezentacja liczb c.d.

Standard IEEE 754



AGH

www.agh.edu.pl

- Mantysa nieznormalizowana - liczby $< \text{realmin}$, kod c: 000 w polu mantysy mantysa < 1 .
Te liczby są reprezentowane z dokładnością gorszą niż maszynowa.
- Kod liczb $[0, \text{realmin}/2^{52})$: 000 0000..00 (same zera).
- Dokładność maszynowa ε : Odległość od 1.0 do następnej liczby typu double.
- Zaokrąglanie liczb: Jeżeli wynik operacji arytmetycznej ma mantysę dłuższą niż 52 bity, to następuje zaokrąglenie do 52 bitów. Reguły zaokrąglania precyzuje standard IEEE 754 Rounding rules.
- Jaki jest maksymalny błąd zaokrąglenia?

Przykład różniczkowej analizy błędu operacji arytmetycznych



- Oznaczenia:

Przykład różniczkowej analizy błędu operacji arytmetycznych



- Oznaczenia:
 - x_0 - dana wejściowa (wartość dokładna),

Przykład różniczkowej analizy błędu operacji arytmetycznych



AGH

www.agh.edu.pl

- Oznaczenia:
 - x_0 - dana wejściowa (wartość dokładna),
 - x - przybliżona (zakłócona) wartość danej wejściowej,

Przykład różniczkowej analizy błędu operacji arytmetycznych



AGH

www.agh.edu.pl

- Oznaczenia:
 - x_0 - dana wejściowa (wartość dokładna),
 - x - przybliżona (zakłócona) wartość danej wejściowej,
 - f - algorytm,

Przykład różniczkowej analizy błędu operacji arytmetycznych



AGH

www.agh.edu.pl

- Oznaczenia:

- x_0 - dana wejściowa (wartość dokładna),
- x - przybliżona (zakłócona) wartość danej wejściowej,
- f - algorytm,
- y - dana wyjściowa, $y = f(x)$, $y_0 = f(x_0)$.

Przykład różniczkowej analizy błędu operacji arytmetycznych



AGH

- Oznaczenia:
 - x_0 - dana wejściowa (wartość dokładna),
 - x - przybliżona (zakłócona) wartość danej wejściowej,
 - f - algorytm,
 - y - dana wyjściowa, $y = f(x)$, $y_0 = f(x_0)$.
- Jak błąd danych wejściowych „przenosi się” na błąd wyniku.

Przykład różniczkowej analizy błędu operacji arytmetycznych



AGH

www.agh.edu.pl

- Oznaczenia:
 - x_0 - dana wejściowa (wartość dokładna),
 - x - przybliżona (zakłócona) wartość danej wejściowej,
 - f - algorytm,
 - y - dana wyjściowa, $y = f(x)$, $y_0 = f(x_0)$.
- Jak błąd danych wejściowych „przenosi się” na błąd wyniku.
- Dla małych zaburzeń $\Delta x = x - x_0$ można przyjąć, że

$$\Delta y \approx \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x_0} \Delta x$$

(porównać z rozwinięciem w szereg Taylora)

Przykład różniczkowej analizy błędu operacji arytmetycznych



- Oznaczenia:
 - x_0 - dana wejściowa (wartość dokładna),
 - x - przybliżona (zakłócona) wartość danej wejściowej,
 - f - algorytm,
 - y - dana wyjściowa, $y = f(x)$, $y_0 = f(x_0)$.
- Jak błąd danych wejściowych „przenosi się” na błąd wyniku.
- Dla małych zaburzeń $\Delta x = x - x_0$ można przyjąć, że

$$\Delta y \approx \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x_0} \Delta x$$

(porównać z rozwinięciem w szereg Taylora)

- Który błąd (bezwzględny czy względny) jest lepszą miarą dokładności?

Przykład różniczkowej analizy błędu operacji arytmetycznych, c.d.



- Analiza błędu mnożenia

$$y = a \cdot x$$

$$\Delta y \approx \frac{dy}{dx} \Delta x = a \Delta x$$

$$\frac{\Delta y}{y} \approx \frac{a \Delta x}{ax} = \frac{\Delta x}{x}$$

Przykład różniczkowej analizy błędu operacji arytmetycznych, c.d.



- Analiza błędu mnożenia

$$y = a \cdot x$$

$$\Delta y \approx \frac{dy}{dx} \Delta x = a \Delta x$$

$$\frac{\Delta y}{y} \approx \frac{a \Delta x}{ax} = \frac{\Delta x}{x}$$

- Analiza błędu odejmowania

$$y = x - a$$

$$\Delta y \approx \frac{dy}{dx} \Delta x = \Delta x$$

$$\frac{\Delta y}{y} \approx \frac{\Delta x}{x - a}$$

Kiedy operacje arytmetyczne mogą być „niebezpieczne”?



Utrata cyfr najbardziej znaczących *loss of significance*

- niepożądany efekt obliczeń z użyciem arytmetyki o skończonej precyzji,
- występuje, gdy operacja na dwóch liczbach wzmacnia błąd względny znacznie bardziej niż błąd bezwzględny,
- np. przy odejmowaniu dwóch liczb o podobnych (bliskich sobie) wartościach, tzw. *catastrophic cancellation*.

Arytmetyka przedziałowa



Arytmetyka przedziałowa - operacje na liczbach rzeczywistych x zastępujemy operacjami na przedziałach $[a, b] = \{x \in \mathbb{R} : a \leq x \leq b\}$ (dopuszczalne: $a = -\infty$, $b = \infty$).

- dodawanie

$$[a, b] + [c, d] = [a + c, b + d]$$

- mnożenie

$$[a, b] \cdot [c, d] = [\min(ac, ad, bc, bd), \max(ac, ad, bc, bd)]$$

- dzielenie (gdy $c \cdot d > 0$)

$$\frac{[a, b]}{[c, d]} = [a, b] \cdot \frac{1}{[c, d]},$$

$$\frac{1}{[c, d]} = [1/d, 1/c]$$

Arytmetyka przedziałowa

Niektóre problemy:



- Podział przedziałów (np. przy dzieleniu przez przedział z 0) - wzrost liczby operacji.
- Funkcje niemonotoniczne.
- *Dependency problem*: Powstaje, gdy zmienna w wyrażeniu pojawia się więcej niż raz. Jeżeli nie „zsynchronizujemy” jej zmienności (w przedziale) we wszystkich wystąpieniach, to powstaje niebezpieczeństwo przeszacowania wielkości przedziału.

Arytmetyka przedziałowa

Przykład problemu „zależności”⁴



Należy obliczyć wartość funkcji $f(x) = x^2 + x$

dla $x = [-1, 1]$.

Obliczenia „naturalne”:

$$[-1, 1]^2 + [-1, 1] = [0, 1] + [-1, 1] = [-1, 2].$$

Po przekształceniu algorytmu:

$$f(x) = (x + 1/2)^2 - 1/4$$

otrzymujemy w wyniku przedział bardziej zawężony:

$$([-1, 1] + 1/2)^2 - 1/4 = [-1/2, 3/2]^2 - 1/4 \quad (2)$$

$$= [0, 9/4] - 1/4 \quad (3)$$

$$= [-1/4, 2]. \quad (4)$$

⁴https://en.wikipedia.org/wiki/Interval_arithmetic

Arytmetyka przedziałowa

Przykład problemu „zależności” – zapis w MATLABie



Arytmetyka przedziałowa

Trudności c.d.



Dalsze problemy:

- Dokładne szacowanie błędu obcięcia szeregu Taylora - obliczanie pochodnej wysokiego rzędu - zastosowanie automatycznego różniczkowania.
- Problem przeszacowania błędu. Czy szacowanie błędu poszczególnych operacji prowadzi do takiego samego szacowania wartości funkcji?

Arytmetyka przedziałowa

Implementacja



- Przeciążenie operatorów.
- Dostosowanie kompilatora - przykład: przybornik muPAD w środowisku MATLAB.