Numerička matematika

1. predavanje

Saša Singer i Nela Bosner

PMF - Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

Uvod u kolegij

Čime se Numerička matematika bavi

Većina ostalih kolegija na studiju (do sada) bavi se

- tzv. “egzaktnom” ili “pravom” matematikom,

koja izgleda, otprilike, ovako:

- definicija, teorem, dokaz,

uz tek pokoji primjer.

Numerička matematika se ponešto razlikuje od toga:

- orijentirana je prema rješavanju konkretnih praktičnih problema,
- bazirana je na pojmu greške, odnosno, aproksimacije, tj. nije baš “egzaktna”.

Čime se Numerička matematika bavi (nastavak)

Zato kolegij ima nekoliko dosta različitih osnovnih ciljeva:

- spoznavanje neminovnosti pojave grešaka u praktičnom svijetu (izvori i vrste grešaka, važnost ocjene pogreške),
- pregled osnovnih numeričkih metoda za rješavanje nekih "standardnih" problema,
- samostalna primjena tih metoda,
- razvijanje kritičnosti u interpretaciji dobivenih rezultata

Ovo zadnje je najvažnije — "da ne bi bilo . . . " (primjeri tipa "dogodilo se . . . " slijede).

Izvedba: više primjera, a manje dokaza!

Pregled sadržaja kolegija

Cijeli kolegij ima 8 “većih” cjelina (poglavlja):

- Uvod u kolegij — greške, uvjetovanost problema, stabilnost algoritama.
- Rješavanje linearnih sustava — tzv. direktne metode (Gaussove eliminacije, LR faktorizacija, faktorizacija Choleskog).
- Aproksimacija i interpolacija — općenito o problemu aproksimacije funkcija, interpolacija polinomom i splineom (splajnom).
- Metoda najmanjih kvadrata — opći diskretni problem, linearizacija, matrična formulacija, QR faktorizacija, dekompozicija singularnih vrijednosti. Neprekidni problem i ortogonalni polinomi.

Pregled sadržaja kolegija (nastavak)

- Ortogonalni polinomi i generalizirana Hornerova shema.
- Numeričko integriranje — Newton–Cotesove i Gaussove formule.
- Rješavanje nelinearnih jednadžbi — bisekcija, Newton, sekanta, jednostavna iteracija, konstrukcija metoda višeg reda konvergencije.
- Optimizacija — metoda zlatnog reza, gradijentna metoda, Newtonova metoda.

Problemi numeričke matematike

U matematici postoji niz problema koje

- ne znamo ili ne možemo egzaktno riješiti,

tj. prisiljeni smo tražiti približno rješenje.

Neki klasični "zadaci" u numeričkom računanju su:

- rješavanje sustava linearnih i nelinearnih jednadžbi,
- računanje integrala,
- računanje aproksimacije neke zadane funkcije (zamjena podataka nekom funkcijom),
- minimizacija (maksimizacija) zadane funkcije, uz eventualna ograničenja (obično, u domeni),
- rješavanje diferencijalnih i integralnih jednadžbi . . .

Problemi numeričke matematike (nastavak)

Neke probleme čak znamo egzaktno riješiti (bar u principu),

- poput sustava linearnih jednadžbi (ponoviti LA1),

no to predugo traje, pa koristimo računala.

Međutim, tada imamo dodatni problem, jer

- računala ne računaju egzaktno, već približno!

Oprez, tada ni osnovne aritmetičke operacije nisu egzaktne.

Dakle, ključni pojam u numerici je

- približna vrijednost, odnosno, greška.

Ciljevi numeričke matematike

U skladu s tim, osnovni zadatak numeričke matematike je naći (dati) odgovore na sljedeća pitanja:

- kako riješiti neki problem — metoda,
- koliko je "dobro" izračunato rješenje — točnost, ocjena greške.

Malo preciznije, za svaku od navedenih klasa problema, treba proučiti sljedeće "teme" — potprobleme:

1. Uvjetovanost problema — osjetljivost problema na greške, prvenstveno u početnim podacima (tzv. teorija pertubacije ili smetnje — vezana uz sam problem).
2. Konstrukcija standardnih numeričkih metoda za rješavanje danog problema.

Ciljevi numeričke matematike (nastavak)

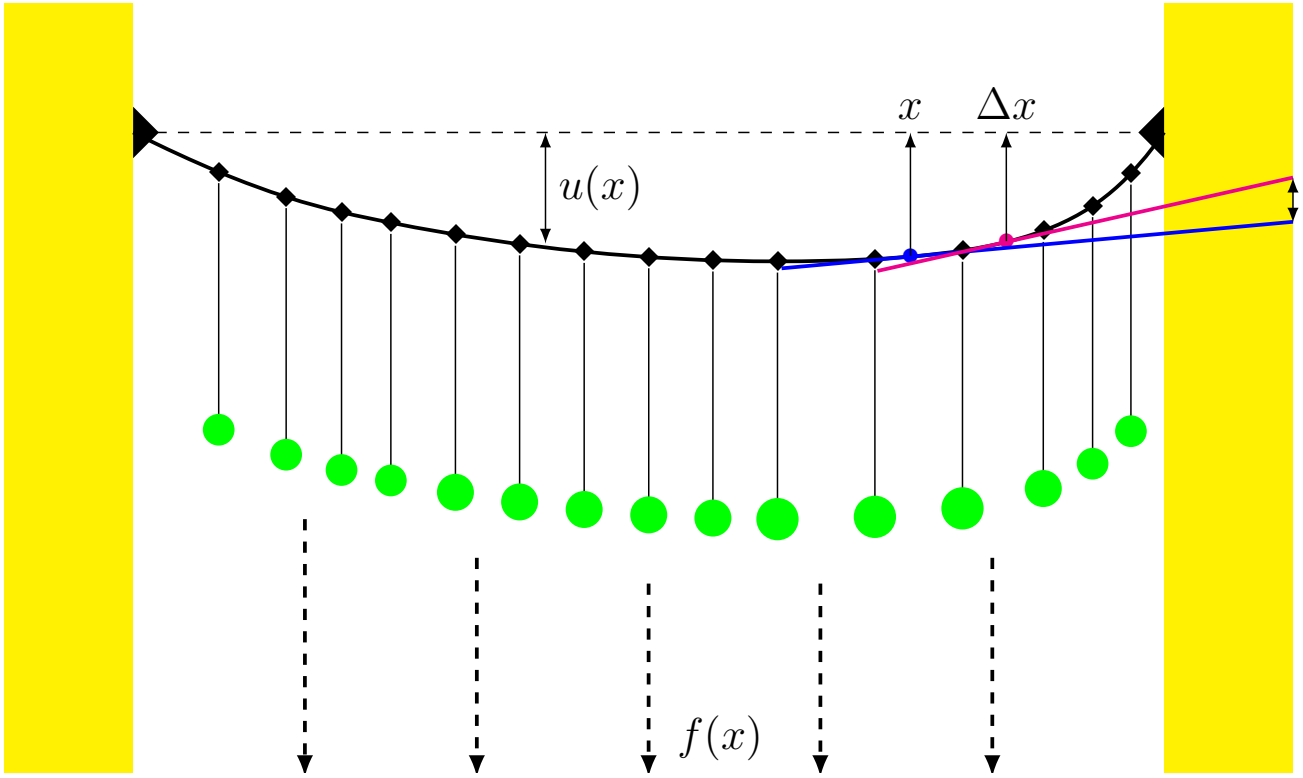
Kad jednom "stignemo" do numeričkih metoda, treba još proučiti sljedeće "teme" — potprobleme:

3. Stabilnost numeričkih metoda — njihova osjetljivost na "smetnje" problema.
4. Efikasnost pojedine numeričke metode — orijentirano prema implementaciji na računalu:
   - broj računskih operacija i potreban memorijski prostor za rješavanje problema (= Složenost).
   - vrijeme izvršavanja vezano uz optimalno korištenje memorijske hijerarhije
5. Točnost numeričkih metoda, u smislu neke "garancije" točnosti izračunatog rješenja.

Ilustracija ovih "potproblema" na primjerima — malo kasnije.

Uvodni primjer konkretnog problema

Problem je opisati progib vodoravno položenog elastičnog užeta koje je obješeno za svoje krajeve (uže za sušenje veša).



Uvodni primjer konkretnog problema (nastavak)

Pretpostavke matematičkog modela:

- jedinice su odabrane tako da se uže nalazi unutar segmenta $[0, 1]$ u x-koordinati,
- $u(x)$ označava okomiti progib užeta na poziciji x,
- pod opterećenjem intenziteta $f(x)$,
- progib na krajevima je nula, tj. $u(0) = u(1) = 0$,
- a zbog jednostavnosti pretpostavljamo još da
  - napetost užeta a je konstantna,
  - $u(x)$ i $u'(x)$ su mali (što je za očekivati ako predmeti koje vješamo na uže nisu preteški).

Uvjet ravnoteže na segmentu $[x, x + \Delta x]$ može se aproksimirati jednadžbom

$$a(-u'(x + \Delta x) + u'(x)) \approx f(x)\Delta x,$$

a konačnu jednadžbu dobijemo kad $\Delta x \to 0$.

Uvodni primjer konkretnog problema (nastavak)

To je diferencijalna jednadžba za rubni problem (koja se još zove i stacionarna jednadžba topline)

$$\begin{cases} -au''(x) = f(x) & \text{na } \langle 0, 1 \rangle, \\ u(0) = u(1) = 0. \end{cases}$$

Ako pretpostavimo da je

- $f(x)$ neprekidna na $[0, 1]$,
- $a > 0$,
- $u(x) \in C^2(\langle 0, 1 \rangle)$,

tada možemo naći rješenje našeg rubnog problema.

- Problem je što bi za egzaktno rješenje trebali dva puta integrirati,
- a to nekad ili ne znamo ili je teško za izračunati.

Uvodni primjer konkretnog problema (nastavak)

Problem zato rješavamo približno i to

- metodom konačnih elemenata,
- pomoću koje tražimo po dijelovima linearnu aproksimaciju.

Metoda konačnih elemenata se temelji na sljedećem principu:

- Diferencijalnu jednadžbu $-au''(x) = f(x)$ pomnožimo sa testnom funkcijom $v(x)$ koja zadovoljava $v(0) = v(1) = 0$,
- integriramo koristeći parcijalnu integraciju,
- i tako dobivamo varijacijski oblik jednadžbe

$$\int_0^1 f(x)v(x)dx = -\int_0^1 au''(x)v(x)dx = \int_0^1 au'(x)v'(x)dx.$$

Uvodni primjer konkretnog problema (nastavak)

Cilj je odabrati pogodan funkcijski prostor V, i onda

- naći $u \in V$ tako da zadovoljava varijacijski oblik jednadžbe

$$\int_0^1 au'(x)v'(x)dx = \int_0^1 f(x)v(x)dx$$

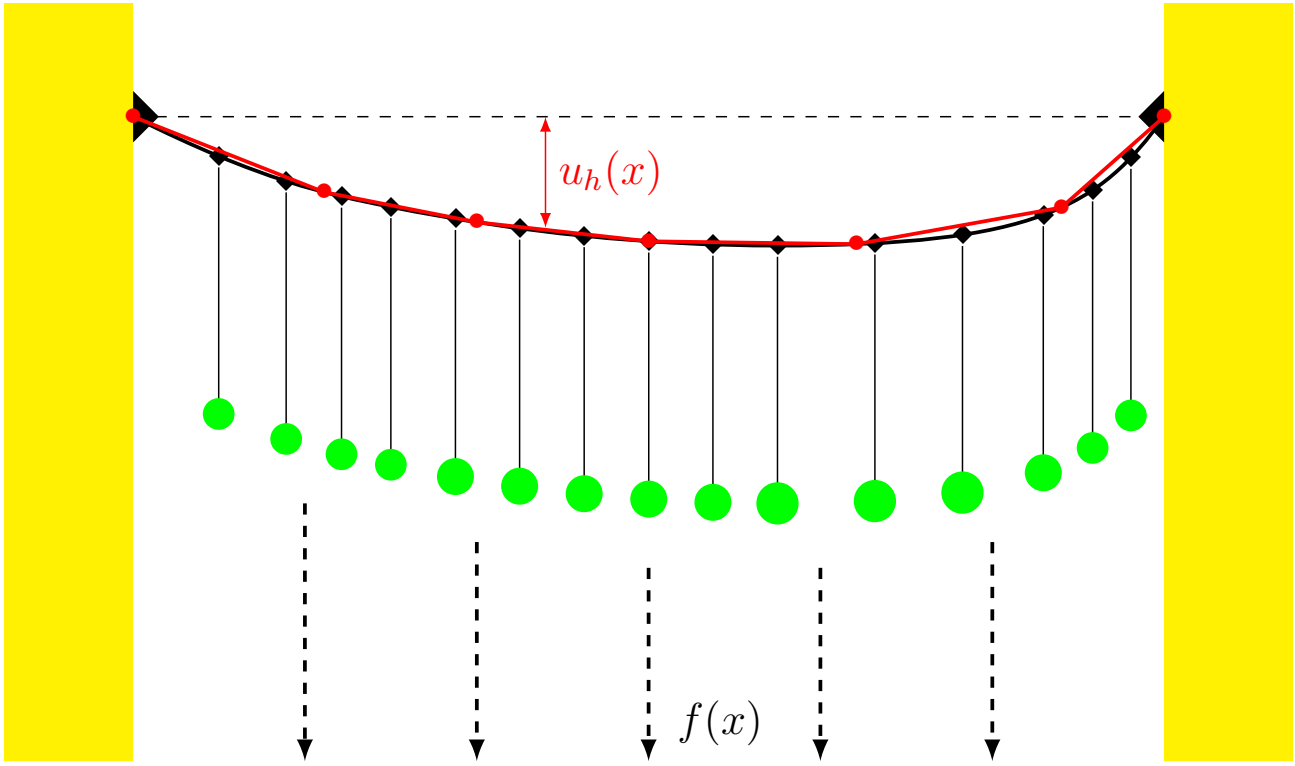
- za sve $v \in V$.

Može se pokazati da su pod određenim uvjetima rješenja diferencijalne jednadžbe i varijacijskog oblika ekvivalentna.

Mi biramo sljedeći skup V:

- neka je $\mathcal{T}_h : 0 = x_0 < x_1 < \cdots < x_{m+1} = 1$ particija segmenta $I = [0, 1]$ na podsegmente $I_j = [x_{j-j}, x_j]$ dužine $h_j = x_j - x_{j-1}$,
- definiramo V_h kao skup neprekidnih, po dijelovima linearnih funkcija v_h na $\mathcal{T}_h$ (tj. na svakom I_j v_h je polinom 1. stupnja), sa svojstvom $v_h(0) = v_h(1) = 0$.

Uvodni primjer konkretnog problema (nastavak)

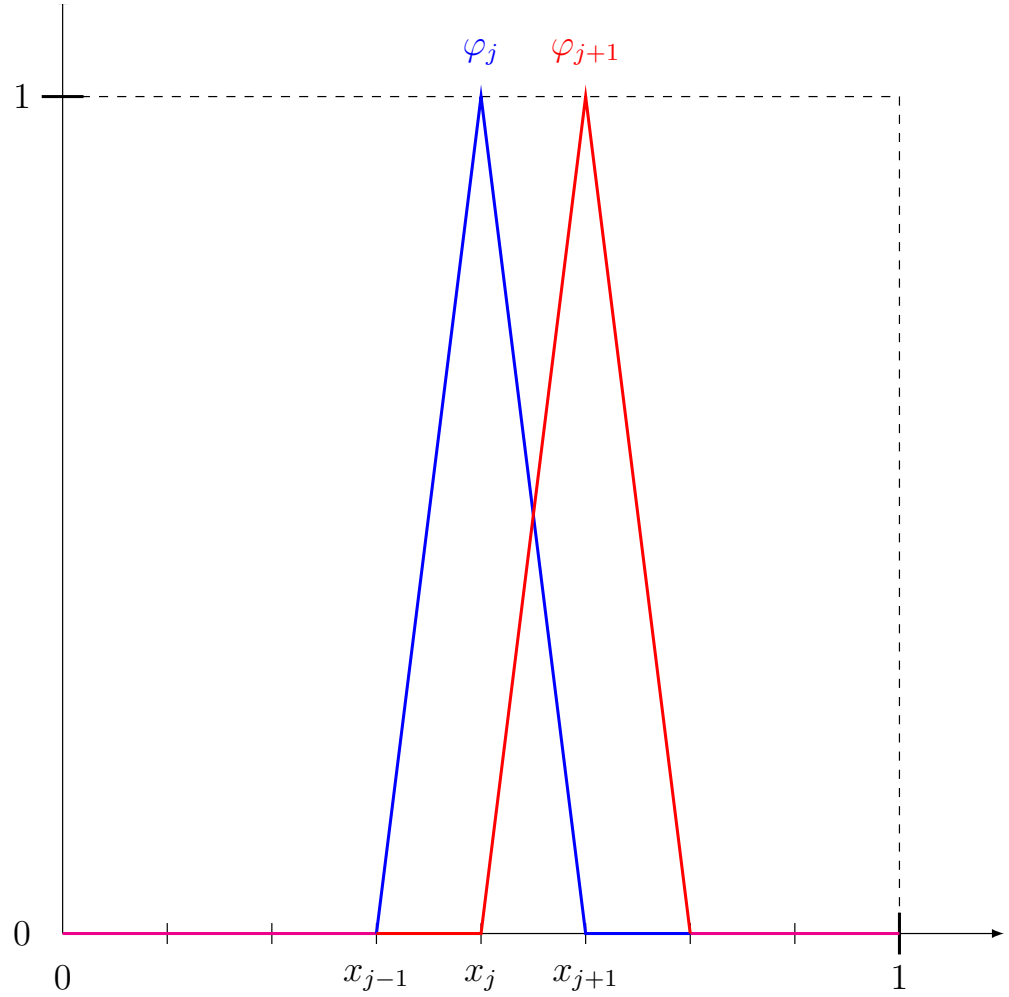


Još moramo definirati bazu $\{\varphi_j\}_{j=1}^m$ na prostoru V_h, tako da aproksimaciju u_h tražimo u obliku

$$u_h(x) = \sum_{j=1}^{m} \xi_j \varphi_j(x).$$

Uvodni primjer konkretnog problema (nastavak)

Bazu prostora čine tzv. “krovići”.



Uvodni primjer konkretnog problema (nastavak)

Varijacijski oblik jednadžbe tada glasi

$$\sum_{j=1}^{m} \xi_j a \int_0^1 \phi_j'(x) v_h'(x) dx = \int_0^1 f(x) v_h(x) dx, \quad \forall v_h \in V_h.$$

Za v_h je dovoljno uzeti sve bazne funkcije $\{\varphi_j\}_{j=1}^m$, čime dobivamo $m \times m$ linearni sustav jednadžbi:

$$\sum_{j=1}^{m} \xi_j a \int_0^1 \phi_j'(x) \phi_i'(x) dx = \int_0^1 f(x) \phi_i(x) dx, \quad i = 1, \ldots, m$$

sa nepoznanicama $\{\xi_j\}_{j=1}^m$. Na kraju definiramo matricu $A = [a_{ij}]$, i vektore $b = [b_i]$ i $x = [\xi_j]$ sa elementima

$$a_{ij} = a \int_0^1 \phi_j'(x) \phi_i'(x) dx, \quad b_i = \int_0^1 f(x) \phi_i(x) dx.$$

Uvodni primjer konkretnog problema (nastavak)

Računanje aproksimacije rješenja diferencijalne jednadžbe sveli smo na rješavanje linearnog sustava

$$Ax = b,$$

za kojeg u našem primjeru elemente matrice A i vektora b računamo na sljedeći način:

- elementi a_{ij} se egzaktno izračunaju računanjem određenih integrala

$$a_{ii} = \frac{a}{h_i} + \frac{a}{h_{i+1}}, \quad a_{i+1,i} = a_{i,i+1} = -\frac{a}{h_{i+1}}, \quad a_{ji} = a_{ij} = 0 \text{ za } j > i+1,$$

- matrica A je simetrična, tridijagonalna, i pozitivno definitna
- elementi b_i su određeni integrali koje možemo izračunati numeričkom integracijom.

Uvodni primjer konkretnog problema (nastavak)

Dakle, za rješavanje problema u ovom primjeru trebaju nam nekoliko područja koje pokriva numerička matematika

- rješavanje linearnih sustava,
- aproksimacija funkcije po dijelovima polinomom,
- numeričko integriranje.

Uvodna priča o greškama

- Primjeri “grešaka” iz prakse i njihove posljedice
- Greške: vrste i izvori
- Prikaz brojeva u računalu i greške zaokruživanja
- Realna aritmetika računala (IEEE standard)
- Širenje grešaka u egzaktnoj aritmetici
- Primjer “katastrofalnog” kraćenja
- Širenje grešaka u aritmetici računala i perturbacija podataka

Uvodna priča o greškama

- Primjeri “grešaka” iz prakse i njihove posljedice
- Greške: vrste i izvori
- Prikaz brojeva u računalu i greške zaokruživanja
- Realna aritmetika računala (IEEE standard)
- Širenje grešaka u egzaktnoj aritmetici
- Primjer “katastrofalnog” kraćenja
- Širenje grešaka u aritmetici računala i perturbacija podataka

Promašaj raketa Patriot

U prvom Zaljevskom ratu, 25. veljače 1991. godine, američke rakete Patriot nisu uspjele oboriti iračku Scud raketu iznad Dhahrana u Saudijskoj Arabiji.

- Scud raketa je pukim slučajem pala na američku vojnu bazu — usmrtivši 28 i ranivši stotinjak ljudi.

Promašaj raketa Patriot (nastavak)

Istraga otkriva sljedeće:

- Računalo koje je upravljalo Patriot raketama, vrijeme je brojilo u desetinkama sekunde proteklim od trenutka paljenja (uključivanja) sustava.
- Desetinka sekunde binarno

$$0.1_{10} = (0.0\dot{0}01\dot{1})_2.$$

- To računalo prikazivalo je realne brojeve korištenjem nenormalizirane mantise duljine 23 bita.
- Spremanjem broja 0.1 u registar takvog računala radi se (apsolutna) greška $\approx 9.5 \cdot 10^{-8}$ (sekundi).

Ne izgleda puno . . . , a kamo li opasno.

Promašaj raketa Patriot (nastavak)

Detalji:

- Računalo je bilo u pogonu 100 sati, pa je ukupna greška zaokruživanja bila (stalno se zbraja, svakih 0.1 sekundi)

$$100 \cdot 60 \cdot 60 \cdot 10 \cdot 9.5 \cdot 10^{-8} = 0.34\,\mathrm{s}.$$

- Scud raketa putuje brzinom $\approx 1.6\,\mathrm{km/s}$, pa je "tražena" više od pola kilometra daleko od stvarnog položaja.
- Greška je uočena dva tjedna ranije, nakon 8 sati rada jednog drugog sustava. Modifikacija programa stigla je dan nakon nesreće.
- Posade sustava mogle su i dva tjedna ranije dobiti uputu "isključi/uključi računalo" svakih nekoliko sati — ali je nisu dobile.

Samouništenje Ariane 5

Raketa Ariane 5 lansirana 4. lipnja 1995. godine iz Kouroua (Francuska Gvajana).

- Nosila je u putanju oko Zemlje komunikacijske satelite vrijedne 500 milijuna USD.
- 37 sekundi nakon lansiranja izvršila je samouništenje.

Samouništenje Ariane 5 (nastavak)

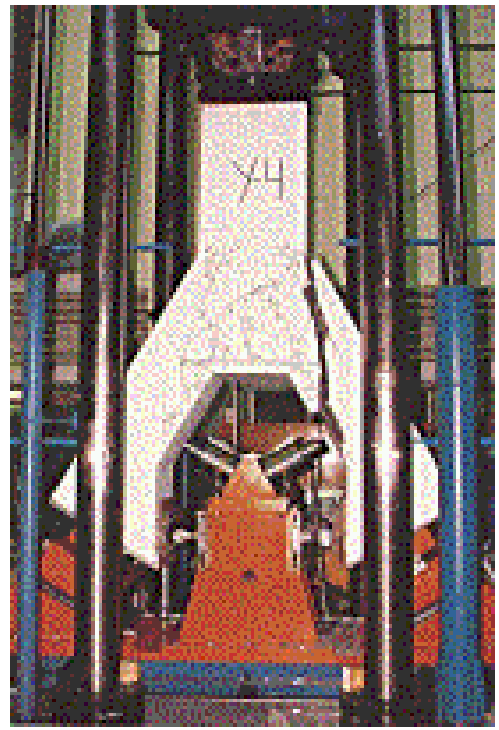
Objašnjenje:

- U programu za vođenje rakete postojala je varijabla koja je registrirala (pamtila) horizontalnu brzinu rakete (stvarno, nije koristila ničemu).
- Greška je nastupila kad je program pokušao pretvoriti
  - preveliki 64-bitni realni broj
  - u 16-bitni cijeli broj.
- Računalo je javilo grešku, što je izazvalo samouništenje.
- Isti program bio je korišten u prijašnjoj sporijoj verziji Ariane 4, pa do katastrofe nije došlo.

Potonuće naftne platforme

Naftna platforma Sleipner A potonula je prilikom prvog sidrenja, 23. kolovoza 1991. godine u blizini Stavangera.

- Baza platforme su 24 betonske ćelije, od kojih su 4 produljene u šuplje stupove na kojima leži paluba.



Potonuće naftne platforme (nastavak)

Razlozi nesreće:

- Prilikom uronjavanja baze došlo je do pucanja veza među ćelijama (v. desnu sliku).
- Rušenje na dno mora je izazvalo potres jačine 3.0 stupnja po Richterovoj ljestvici i štetu od 700 milijuna USD.
- Greška je nastala u projektiranju, primjenom standardnog paketa programa, kad je upotrijebljena metoda konačnih elemenata s nedovoljnom točnošću.
- Proračun je dao naprezanja 47% manja od stvarnih.
- Točnijim proračunom utvrđeno je da su ćelije morale popustiti na dubini od 62 metra, a popustile su na 65 metara!

Uvodna priča o greškama

- Primjeri “grešaka” iz prakse i njihove posljedice
- Greške: vrste i izvori
- Prikaz brojeva u računalu i greške zaokruživanja
- Realna aritmetika računala (IEEE standard)
- Širenje grešaka u egzaktnoj aritmetici
- Primjer “katastrofalnog” kraćenja
- Širenje grešaka u aritmetici računala i perturbacija podataka

Greške

Pri numeričkom rješavanju nekog problema javljaju se različiti tipovi grešaka:

- greške modela — svođenje realnog problema na neki "matematički" problem,
- greške u ulaznim podacima (mjerenja i sl.),
- greške numeričkih metoda za rješavanje "matematičkog" problema,
- greške "približnog" računanja — obično su to
  - greške zaokruživanja u aritmetici računala.

Greške modela su "izvan" dosega numeričke matematike.

- Spadaju u fiziku, kemiju, biologiju, tehniku, ekonomiju, ...

Mjere za grešku

Oznake:

- prava vrijednost — x,
- izračunata ili približna vrijednost — $\hat{x}$.

Standardni naziv: $\hat{x}$ je aproksimacija za x.

Trenutno, nije bitno odakle (iz kojeg skupa) su x i $\hat{x}$.

- Zamislite da su to "obični" realni brojevi — $x, \hat{x} \in \mathbb{R}$.

Mjere za grešku (nastavak)

Apsolutna greška:

- mjeri udaljenost izračunate vrijednosti $\hat{x}$ obzirom na pravu vrijednost x.

Ako imamo vektorski prostor i normu, onda je

- udaljenost = norma razlike.

Dakle, apsolutna greška je definirana ovako:

$$E_{\text{abs}}(x, \hat{x}) := |\hat{x} - x|.$$

Često se koristi i oznaka $\Delta x = \hat{x} - x$ (na pr. u analizi), pa je $E_{\text{abs}}(x, \hat{x}) = |\Delta x|$.

Katkad se $\Delta x = \hat{x} - x$ zove "prava" greška (predznak bitan).

Mjere za grešku (nastavak)

Primjer. Dojam o "veličini" greške:

- ako smo umjesto 1 izračunali 2, to nam se čini lošije nego
- ako smo umjesto 100 izračunali 101.

Relativna greška:

- mjeri relativnu točnost aproksimacije $\hat{x}$ obzirom na veličinu broja x,
- na pr. koliko se vodećih znamenki brojeva x i $\hat{x}$ podudara.

Relativna greška definirana je za $x \neq 0$,

$$E_{\text{rel}}(x, \hat{x}) := \frac{|\hat{x} - x|}{|x|}.$$

Često se koristi i oznaka δ_x. Katkad se u nazivniku javlja $|\hat{x}|$.

Mjere za grešku (nastavak)

Ideja relativne greške: ako $\hat{x}$ napišemo kao $\hat{x} = x(1+\rho)$, onda je njegova relativna greška

$$E_{\text{rel}}(x, \hat{x}) := |\rho|.$$

Dakle, relativna greška mjeri

- koliko se faktor $(1+\rho)$ apsolutno razlikuje od 1.

Sad možemo detaljnije opisati one četiri vrste grešaka:

- greške modela,
- greške u ulaznim podacima (mjerenjima),
- greške metoda za rješavanje modela,
- greške aritmetike računala.

Greške modela

Greške modela mogu nastati:

- zbog zanemarivanja utjecaja nekih sila,
  - na primjer, zanemarivanje utjecaja otpora zraka ili trenja (v. primjer),
- zbog zamjene kompliciranog modela jednostavnijim,
  - na primjer, sustavi nelinearnih običnih ili parcijalnih diferencijalnih jednadžbi se linearizirаju, da bi se dobilo barem približno rješenje,
- zbog upotrebe modela u graničnim slučajevima,
  - na primjer, kod matematičkog njihala se $\sin x$ aproksimira s x, što vrijedi samo za male kutove.

Modelni primjer — Problem gađanja

Primjer. Imamo top (ili haubicu) u nekoj točki — recimo, ishodištu.

- Treba pogoditi cilj koji se nalazi u nekoj drugoj točki.

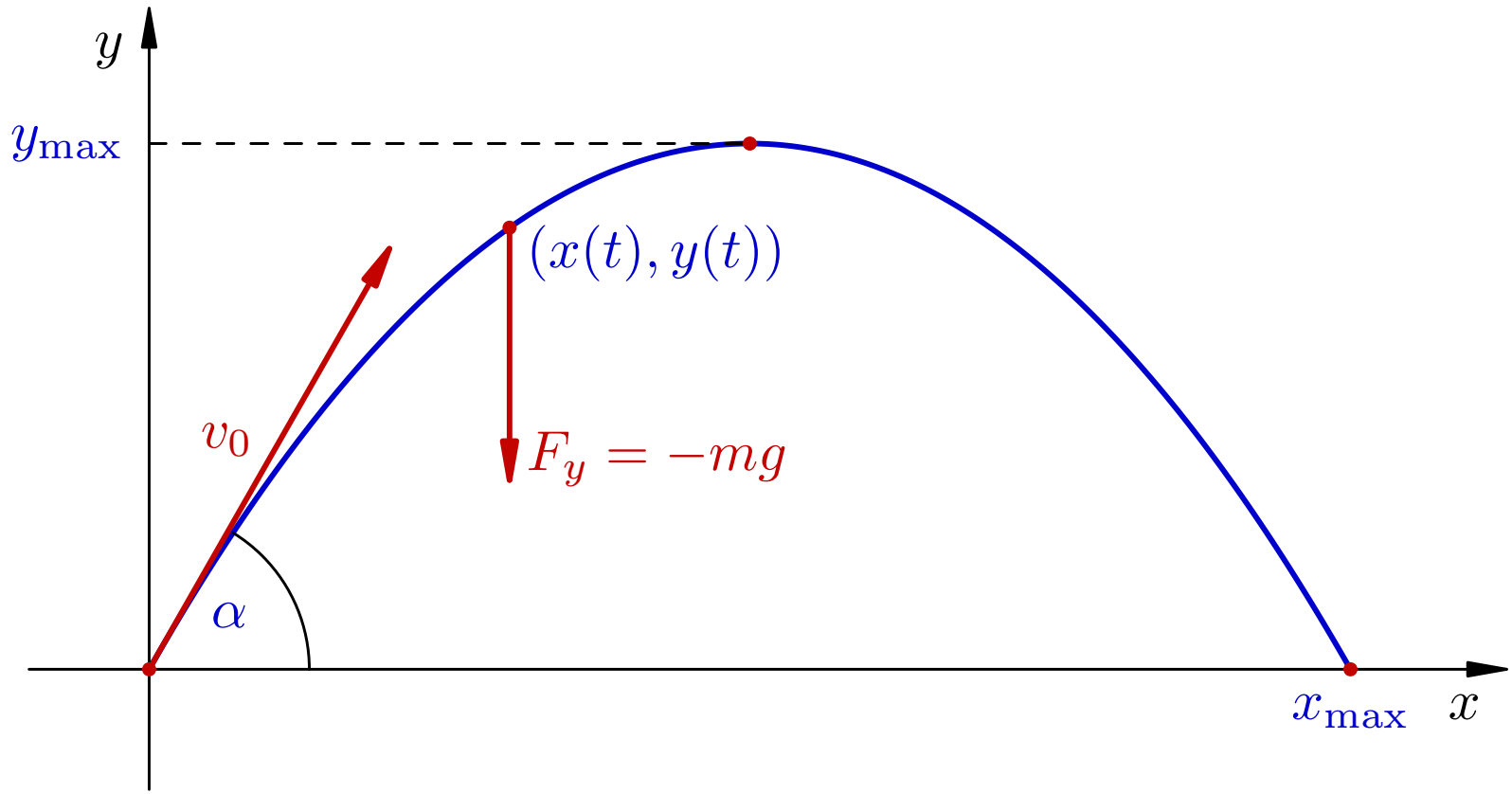
Najjednostavniji model za ovaj problem je poznati kosi hitac. Projektil ispaljujemo prema cilju,

- nekom početnom brzinom v_0 (vektor),
- pod nekim kutem α, obzirom na horizontalnu ravninu.

Slikica (v. sljedeću stranicu)!

Cijela stvar se odvija pod utjecajem gravitacije (prema dolje). Ako zanemarimo otpor zraka, dobijemo "obični" kosi hitac.

Modelni primjer — Slika za kosi hitac



Uzmimo da se cilj nalazi na “istoj visini” — u točki $(x_{\max}, 0)$.

- Udaljenost $x_{\max}$ znamo, a traži se početni kut α.

Modelni primjer — Jednadžba

Osnovna jednadžba je

$$F = ma,$$

gdje je m masa projektila (neće nam trebati na početku), a

- a je akceleracija — vektor u okomitoj (x, y)-ravnini,
- F je sila gravitacije, prema dolje, tj. $F_x = 0$ i $F_y = -mg$.

Gornja jednadžba je diferencijalna jednadžba drugog reda u vremenu. Ako je $(x(t), y(t))$ položaj projektila u danom trenutku, jednadžba ima oblik po komponentama:

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = F_x, \quad m\frac{d^2y}{dt^2} = F_y.$$

Akceleracija je druga derivacija položaja.

Modelni primjer — Rješenje jednadžbe

Neka je projektil ispaljen u trenutku $t_0 = 0$.

Nakon integracije, za brzinu v = prva derivacija položaja, imamo jednadžbu

$$mv = F \cdot t + mv_0,$$

ili, po komponentama (masa se skrati)

$$v_x = \frac{dx}{dt} = v_0 \cos\alpha, \quad v_y = \frac{dy}{dt} = v_0 \sin\alpha - gt.$$

Još jednom integriramo (početni položaj je $x_0 = 0$, $y_0 = 0$). Za položaj projektila u trenutku t dobivamo:

$$x(t) = v_0 t \cos\alpha, \quad y(t) = v_0 t \sin\alpha - \frac{1}{2} g t^2.$$

Reklo bi se — znamo sve!

Modelni primjer — Još neke relacije

Jednadžba "putanje" projektila u (x, y)-ravnini je

$$y = x\mathrm{tg}\alpha - \frac{g}{2v_0^2 \cos^2 \alpha} x^2.$$

To je parabola, s otvorom nadolje, koja prolazi kroz ishodište.

Najveća visina projektila je

$$y_{\max} = \frac{(v_0 \sin \alpha)^2}{2g},$$

a maksimalni domet na horizontalnoj x-osi je

$$x_{\max} = \frac{v_0^2 \sin 2\alpha}{g}.$$

Modelni primjer — Stvarnost

Nažalost, s ovim modelom nećemo ništa pogoditi.

- Fali otpor zraka, tlak pada s visinom, vjetrovi i sl.

Praksa:

- Koeficijent otpora ovisi o obliku projektila — mjeri se.
- Izračunate tablice se eksperimentalno "upucavaju" i korigiraju (statistika).
- Primjena u praksi ide obratno — znam daljinu, tražim kut.

Na primjer, za obični kosi hitac, traženi kut je

$$\alpha = \frac{1}{2} \arcsin \frac{x_{\max}\, g}{v_0^2}.$$

Modelni primjer — Stvarni podaci

Primjer. Za ilustraciju, uzmimo podatke za pravu haubicu kalibra $155\,\mathrm{mm}$, model H155 M65, uz najjače 7. punjenje (maksimalna količina baruta u čahuri).

Početna brzina ispaljene granate je $v_0 = 564\,\mathrm{m/s}$.

Bez otpora zraka, maksimalni domet se postiže za kut $\alpha = 45^\circ = \pi/4$ i iznosi

$$d_{\max} = \frac{564^2 \sin(\pi/2)}{9.81} \approx 32\,425.69\,\mathrm{m}.$$

Stvarni maksimalni domet postiže se za kut $\alpha = 45^\circ 10'$ i iznosi "samo"

$$d_{\max} = 14\,854\,\mathrm{m}.$$

Greške modela (nastavak)

Primjer. Među prvim primjenama jednog od prvih brzih paralelnih računala na svijetu (ASCI Blue Pacific) bilo je

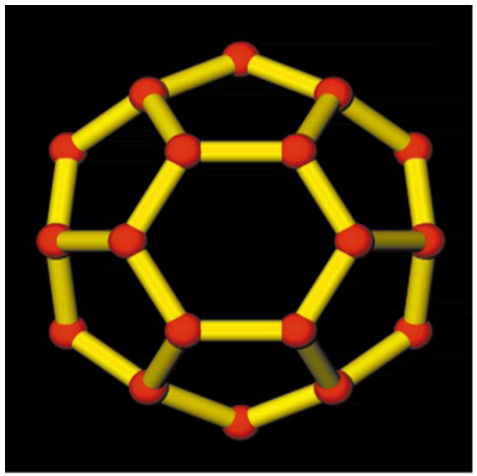
- određivanje trodimenzionalne strukture i elektronskog stanja ugljik-36 fulerena.

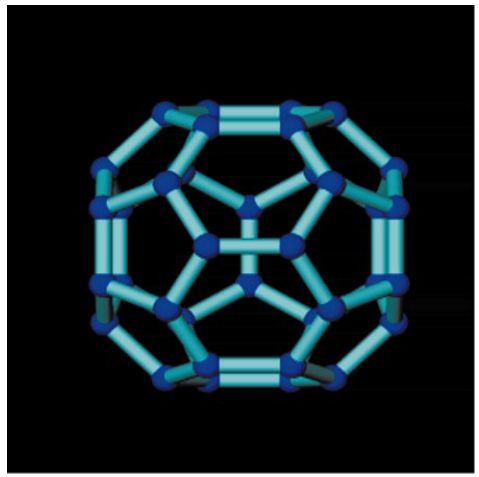
Primjena spoja je višestruka:

- supravodljivost na visokim temperaturama,
- precizno doziranje lijekova u stanice raka.

Greške modela (nastavak)

Prijašnja istraživanja kvantnih kemičara dala su dvije moguće strukture tog spoja, (a) i (b):





Te dvije strukture imaju različita kemijska svojstva.
Polazno stanje stvari:

- eksperimentalna mjerenja pokazivala su da je struktura (a) stabilnija,
- teoretičari su tvrdili da je stabilnija struktura (b).

Greške modela (nastavak)

Prijašnja računanja,

- zbog pojednostavljivanja i interpolacije,

kao odgovor, davala su prednost "teoretskoj" strukturi (b).

Definitivan odgovor,

- proveden računanjem bez pojednostavljivanja,

pokazao je da je struktura (a) stabilnija.

Poanta: pretjerano pojednostavljenje bilo čega (modela, metode ili algoritma) može dovesti

- do pogrešnih rezultata!

Dobivene rezultate je zdravo provjeriti — eksperimentom ili točnijim računom!

Greške u ulaznim podacima

Greške u ulaznim podacima javljaju se zbog

- nemogućnosti ili besmislenosti točnog mjerenja (Heisenbergove relacije neodređenosti).
- Na primjer, tjelesna temperatura se obično mjeri na desetinku stupnja Celziusa točno. Pacijent je podjednako loše ako ima temperaturu $39.5°\mathrm{C}$ ili $39.513462°\mathrm{C}$.

Bitno praktično pitanje:

- Mogu li male greške u ulaznim podacima bitno povećati grešku rezultata?

Nažalost MOGU!

- Takvi problemi zovu se loše uvjetovani problemi.

Greške u ulaznim podacima (nastavak)

Primjer. Zadana su dva sustava linearnih jednadžbi — recimo, umjesto ispravnih (prvih) koeficijanata, izmjerili smo druge:

$$\begin{aligned} 2x &+ 6y &&= 8 \\ 2x &+ 6.0001y &&= 8.0001, \end{aligned}$$

i

$$\begin{aligned} 2x &+ 6y &&= 8 \\ 2x &+ 5.99999y &&= 8.00002. \end{aligned}$$

Samo druga jednadžba se “malo” promijenila.

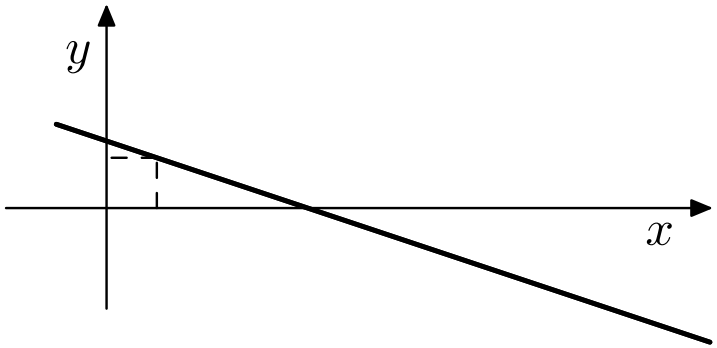
Perturbacije koeficijenata su reda veličine 10^{-4}.

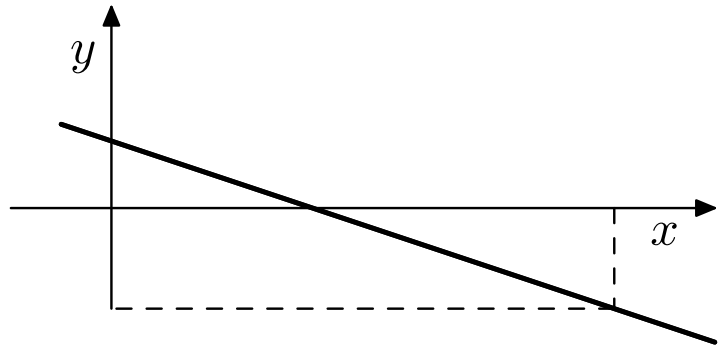
Je li se rezultat, također, promijenio za red veličine 10^{-4}?

Greške u ulaznim podacima (nastavak)

- Rješenje prvog problema: $x = 1$, $y = 1$.
- Rješenje drugog problema: $x = 10$, $y = -2$.

Grafovi presjecišta dva pravca za prvi i drugi sustav:





Koja dva pravca???

- U oba sustava, pravci su “skoro” paralelni, pa se njihovi grafovi ne razlikuju na slikama — i baš tu je problem!

Greške metoda za rješavanje problema

Najčešće nastaju kad se nešto beskonačno zamjenjuje nečim konačnim. Razlikujemo dvije kategorije:

- greške diskretizacije, koje nastaju
  - zamjenom kontinuuma (neprebrojiv skup) konačnim diskretnim skupom točaka,
  - ili "beskonačno" malu veličinu h ili $\varepsilon \to 0$ zamijenjujemo nekim "konačno" malim brojem;
- greške odbacivanja, koje nastaju
  - "rezanjem" beskonačnog niza ili reda na konačni niz ili sumu, tj. odbacujemo ostatak niza ili reda.

  Ovo je zamjena beskonačnog diskretnog skupa (prebrojiv skup, poput $\mathbb{N}$) konačnim skupom.

Greške metoda za rješavanje problema (nast.)

Tipični primjeri greške diskretizacije:

- aproksimacija funkcije f na $[a, b]$, vrijednostima te funkcije na konačnom skupu točaka (tzv. mreži) $\{x_1, \ldots, x_n\} \subset [a, b]$,
- aproksimacija derivacije funkcije f u nekoj točki x. Po definiciji je

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h},$$

a za približnu vrijednost uzmemo dovoljno mali $h \neq 0$ i

$$f'(x) \approx \frac{\Delta f}{\Delta x} = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$

Greške metoda za rješavanje problema (nast.)

Tipični primjeri greške odbacivanja:

- zaustavljanje iterativnih procesa nakon dovoljno velikog broja n iteracija (recimo, kod računanja nultočaka funkcije);
- zamjena beskonačne sume konačnom — kad greška postane dovoljno mala (recimo, kod sumiranja Taylorovih redova — v. sljedeći primjer).

Taylorov red, Taylorov polinom, ...

Za dovoljno glatku funkciju f, Taylorov red oko točke x_0

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x - x_0)^k$$

možemo aproksimirati Taylorovim polinomom p

$$f(x) = p(x) + R_{n+1}(x), \qquad p(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x - x_0)^k,$$

pri čemu je

$$R_{n+1}(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1}.$$

greška odbacivanja, a ξ neki broj između x_0 i x. Grešku $R_{n+1}(x)$ obično ocjenjujemo po apsolutnoj vrijednosti.

Taylorov red, Taylorov polinom, ... (nastavak)

Primjer.

- Funkcije e^x i $\sin x$ imaju Taylorove redove oko točke $x_0 = 0$, koji konvergiraju za proizvoljan $x \in \mathbb{R}$.
- Zbrajanjem dovoljno mnogo članova tih redova, možemo, barem u principu, po volji dobro aproksimirati vrijednosti funkcija e^x i $\sin x$.
- Traženi Taylorovi polinomi s istim brojem članova (ali ne istog stupnja) su

$$e^x \approx \sum_{k=0}^{n} \frac{x^k}{k!}, \qquad \sin x \approx \sum_{k=0}^{n} \frac{(-1)^k x^{2k+1}}{(2k+1)!}.$$

Taylorov red, Taylorov polinom, ... (nastavak)

Za grešku odbacivanja trebaju nam derivacije:

$$(e^x)^{(n)} = e^x, \qquad (\sin x)^{(n)} = \sin\left(x + \frac{n\pi}{2}\right),$$

pa su pripadne greške odbacivanja

$$R_{n+1}(x) = \frac{e^\xi x^{n+1}}{(n+1)!}, \qquad R_{2n+3}(x) = \frac{\sin\left(\xi + \frac{2n+3}{2}\pi\right) x^{2n+3}}{(2n+3)!},$$

Pretpostavimo sada da je $x > 0$. Iz $\xi \leq x$ slijedi $e^\xi \leq e^x$, pa dobivamo

$$|R_{n+1}(x)| \leq \frac{e^x x^{n+1}}{(n+1)!}, \qquad |R_{2n+3}(x)| \leq \frac{x^{2n+3}}{(2n+3)!}.$$

Taylorov red, Taylorov polinom, . . . (nastavak)

Zbrojimo li članove reda sve dok apsolutna vrijednost prvog odbačenog člana ne padne ispod zadane točnosti $\varepsilon > 0$, napravili smo grešku odbacivanja manju ili jednaku

$$\begin{cases} e^x \varepsilon, & \text{za } e^x, \\ \varepsilon, & \text{za } \sin x. \end{cases}$$

U prvom slučaju očekujemo

- malu relativnu grešku,

a u drugom slučaju očekujemo

- malu apsolutnu grešku.

Provjerimo to eksperimentalno — u aritmetici računala!

Cijelo računanje provedeno je u standardnom tipu `double`.

Kako se računaju članovi reda?

Članove reda računamo rekurzivno — novi iz prethodnog.

Za exp:

$$\text{član}_0 = \frac{x^0}{0!} = 1,$$
$$\text{član}_k = \frac{x^k}{k!} = \frac{x \cdot x^{k-1}}{k \cdot (k-1)!} = \frac{x}{k} \cdot \text{član}_{k-1}, \quad k \geq 1.$$

Za sin:

$$\text{član}_0 = \frac{(-1)^0 x^1}{1!} = x,$$
$$\text{član}_k = \frac{(-1)^k x^{2k+1}}{(2k+1)!} = \frac{-x^2 \cdot (-1)^{k-1} x^{2k-1}}{(2k+1) \cdot 2k \cdot (2k-1)!}$$
$$= \frac{-x^2}{2k(2k+1)} \cdot \text{član}_{k-1}, \quad k \geq 1.$$

Red za eksponencijalnu funkciju, $x = 12\pi$

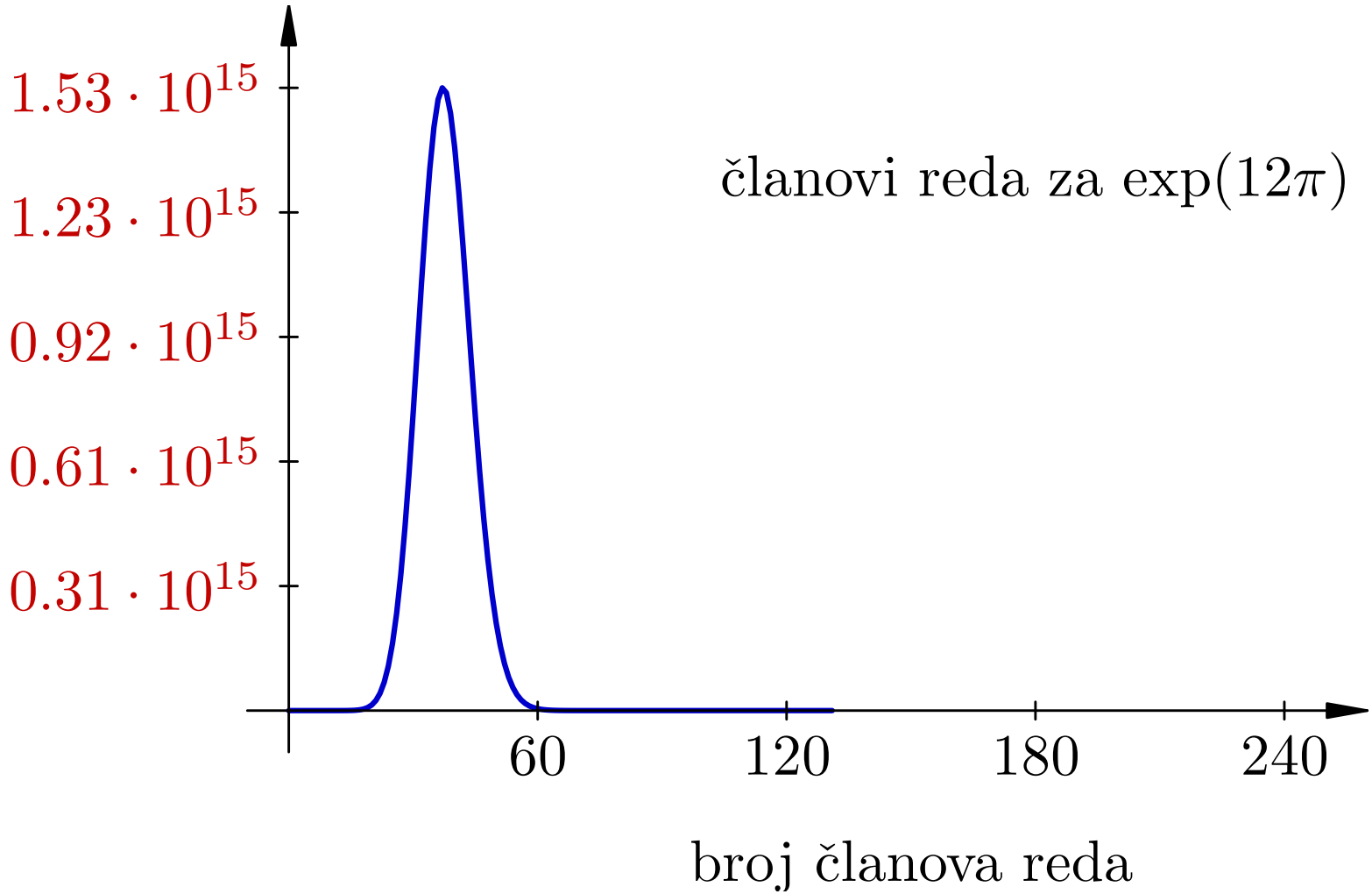
Za $x = 12\pi$ i $\varepsilon = 5 \cdot 10^{-16}$ trebamo 132 člana reda ($n = 131$)

$$|\text{greška odbacivanja}| \leq 2.5101 \cdot 10^{0}$$
$$|\text{maksimalni član}| = 1.5329 \cdot 10^{15} \quad (n = 37).$$

Dobivamo:

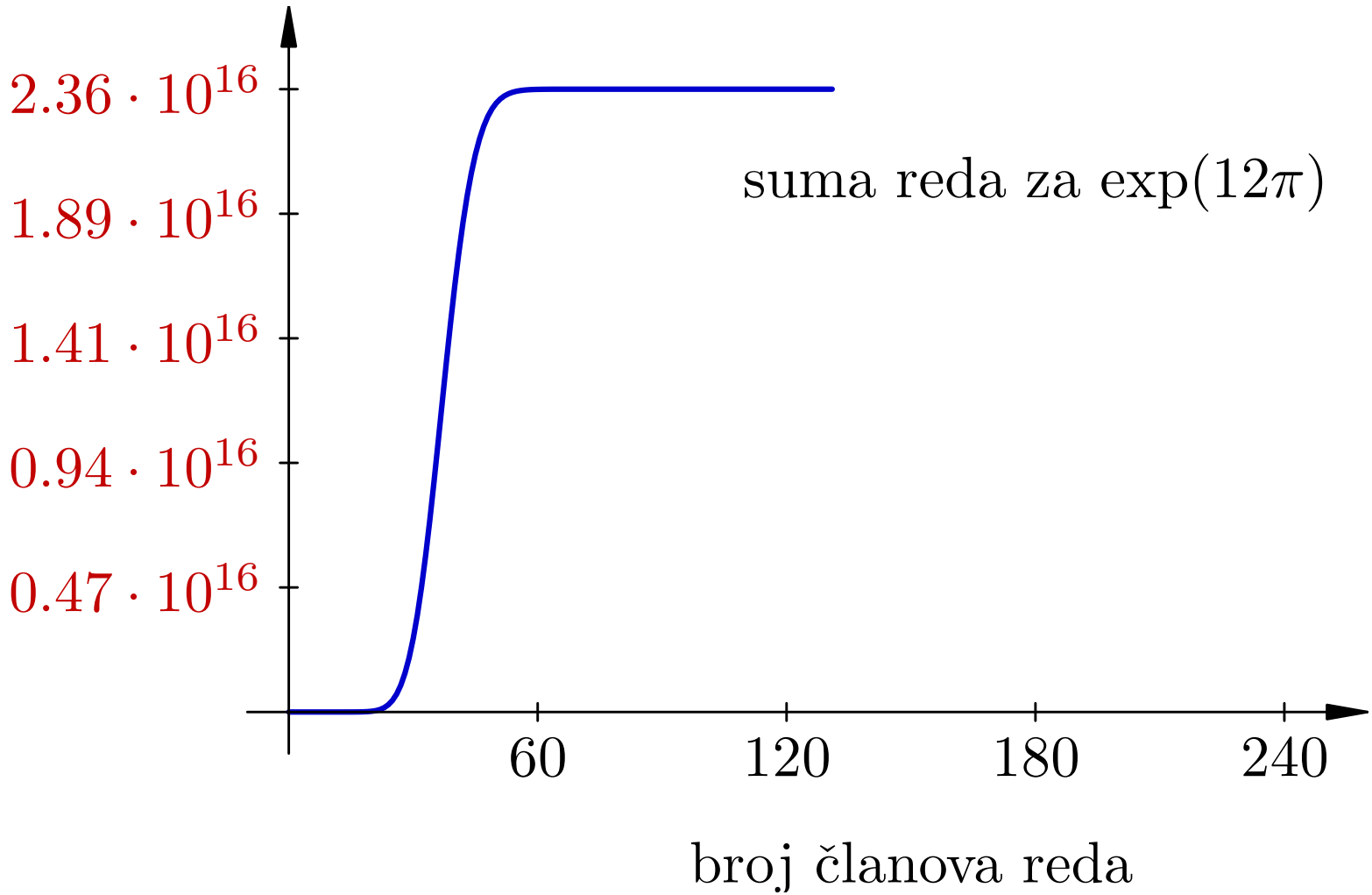
$$\begin{aligned}
\exp(12\pi)_{\text{funkcija}} &= \quad 2.3578503968558192 \cdot 10^{16} \\
\exp(12\pi)_{\text{Taylor}} &= \quad 2.3578503968558196 \cdot 10^{16} \\
\text{prava greška} &= -4.0000000000000000 \cdot 10^{0} \\
\text{relativna greška} &= \quad 1.6964604732064335 \cdot 10^{-16}.
\end{aligned}$$

Članovi reda za $\exp(12\pi)$



Svi članovi imaju isti predznak.

Suma reda za $\exp(12\pi)$



Suma stalno raste, dok se ne stabilizira.

Red za eksponencijalnu funkciju, $x = 24\pi$

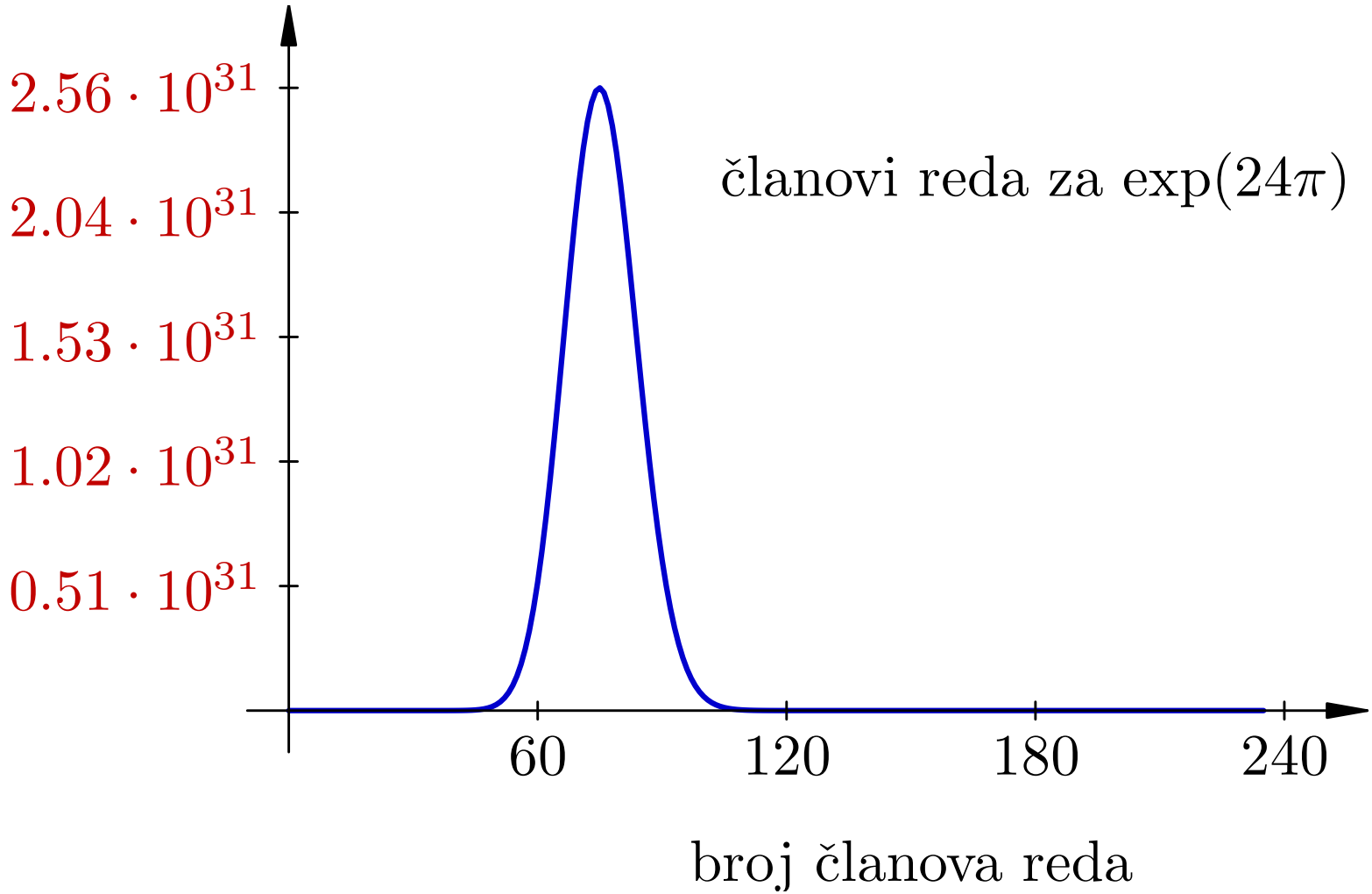
Za $x = 24\pi$ i $\varepsilon = 5 \cdot 10^{-16}$ trebamo 236 članova reda ($n = 235$)

$$|\text{greška odbacivanja}| \leq 5.0445 \cdot 10^{16}$$
$$|\text{maksimalni član}| = 2.5555 \cdot 10^{31} \quad (n = 75).$$

Dobivamo:

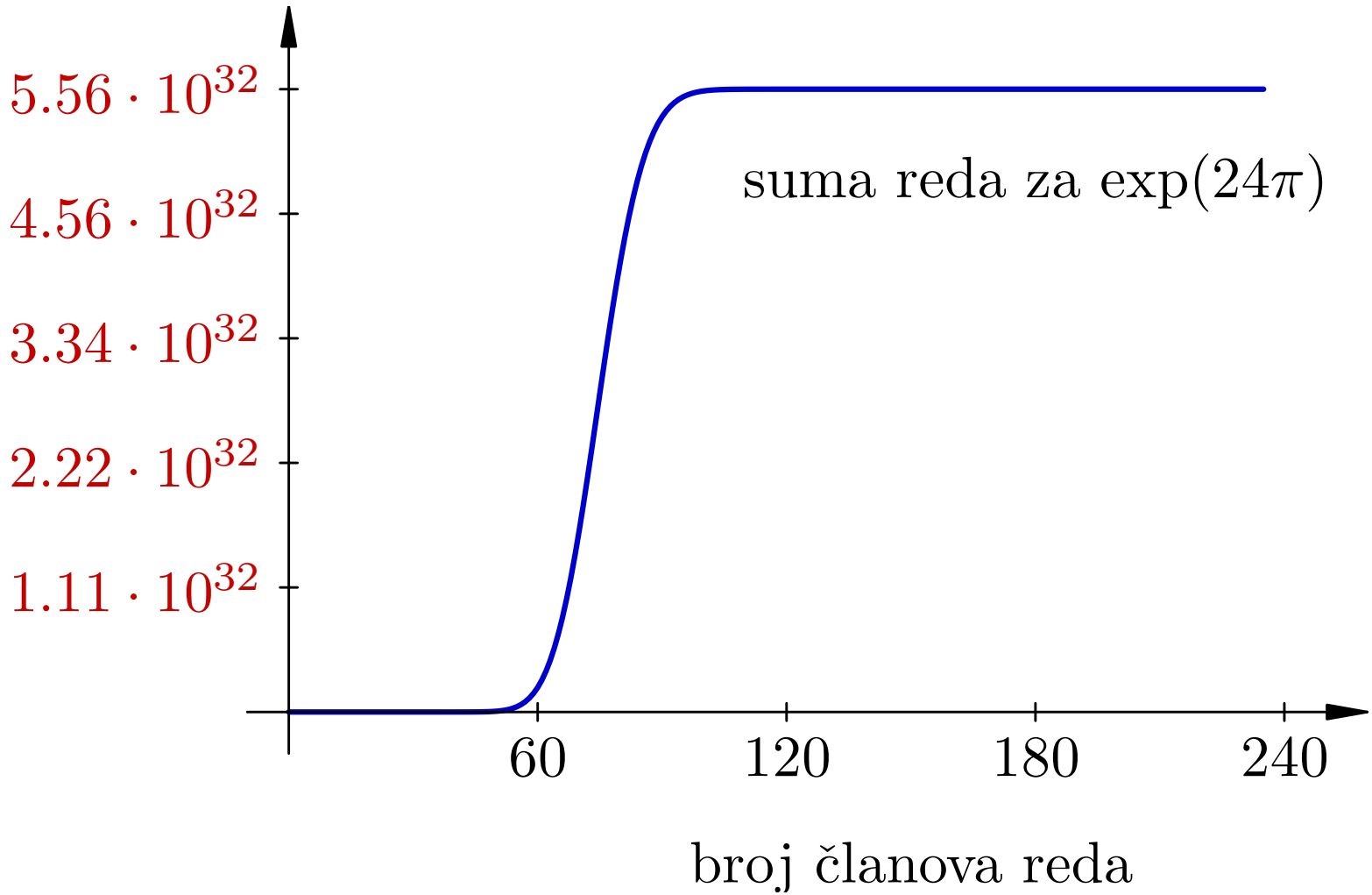
$$\begin{aligned}
\exp(24\pi)_{\text{funkcija}} &= 5.5594584939531437 \cdot 10^{32} \\
\exp(24\pi)_{\text{Taylor}} &= 5.5594584939531445 \cdot 10^{32} \\
\text{prava greška} &= -7.2057594037927936 \cdot 10^{16} \\
\text{relativna greška} &= 1.2961261266057264 \cdot 10^{-16}.
\end{aligned}$$

Članovi reda za $\exp(24\pi)$



Svi članovi imaju isti predznak.

Suma reda za $\exp(24\pi)$



Suma stalno raste, dok se ne stabilizira.

Red za funkciju sinus, $x = 12\pi$

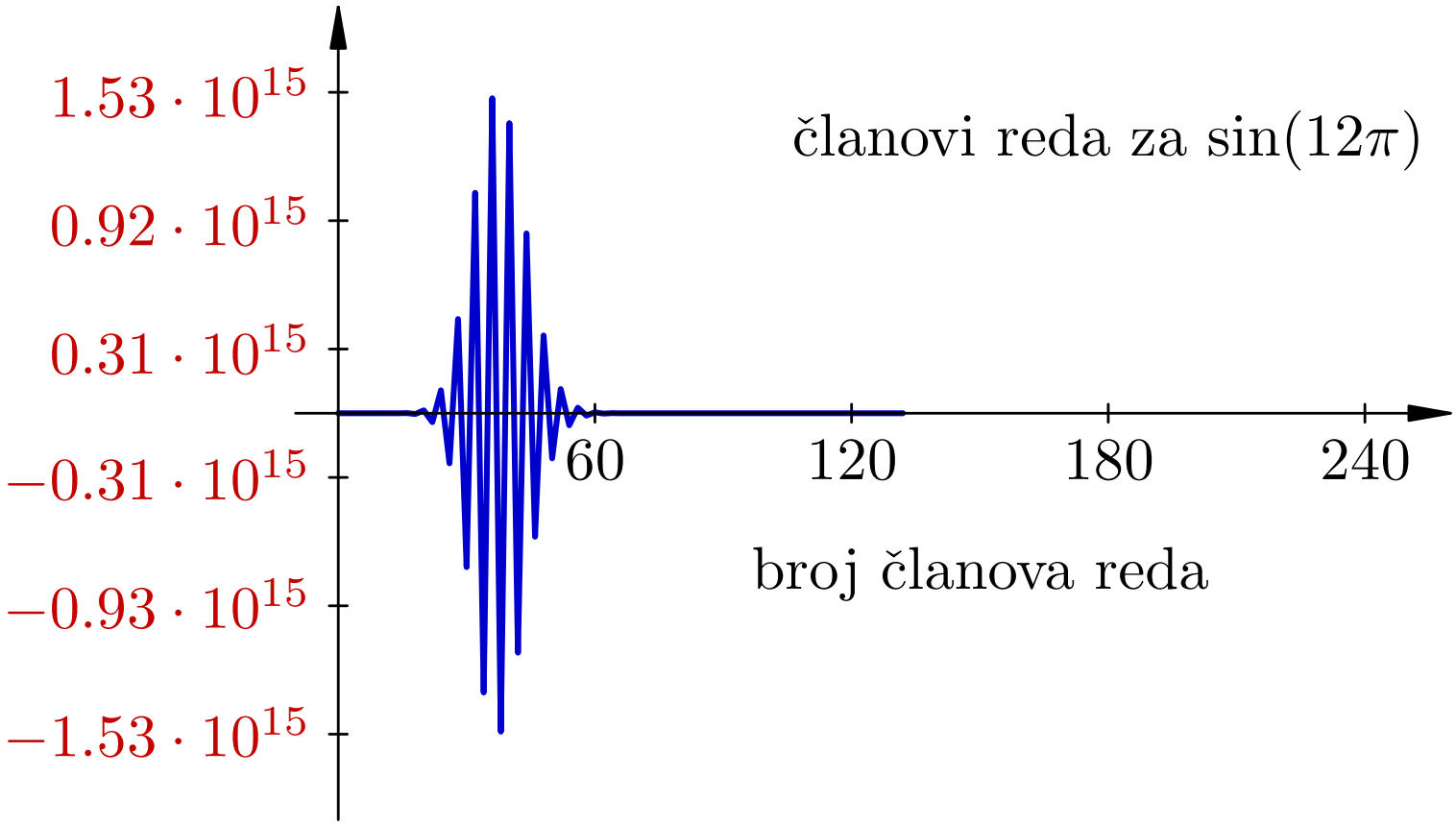
Za $x = 12\pi$ i $\varepsilon = 5 \cdot 10^{-16}$ trebamo 66 članova reda ($n = 131$)

$$|\text{greška odbacivanja}| \leq 3.0175 \cdot 10^{-17}$$
$$|\text{maksimalni član}| = 1.5329 \cdot 10^{15} \quad (n = 37).$$

Dobivamo:

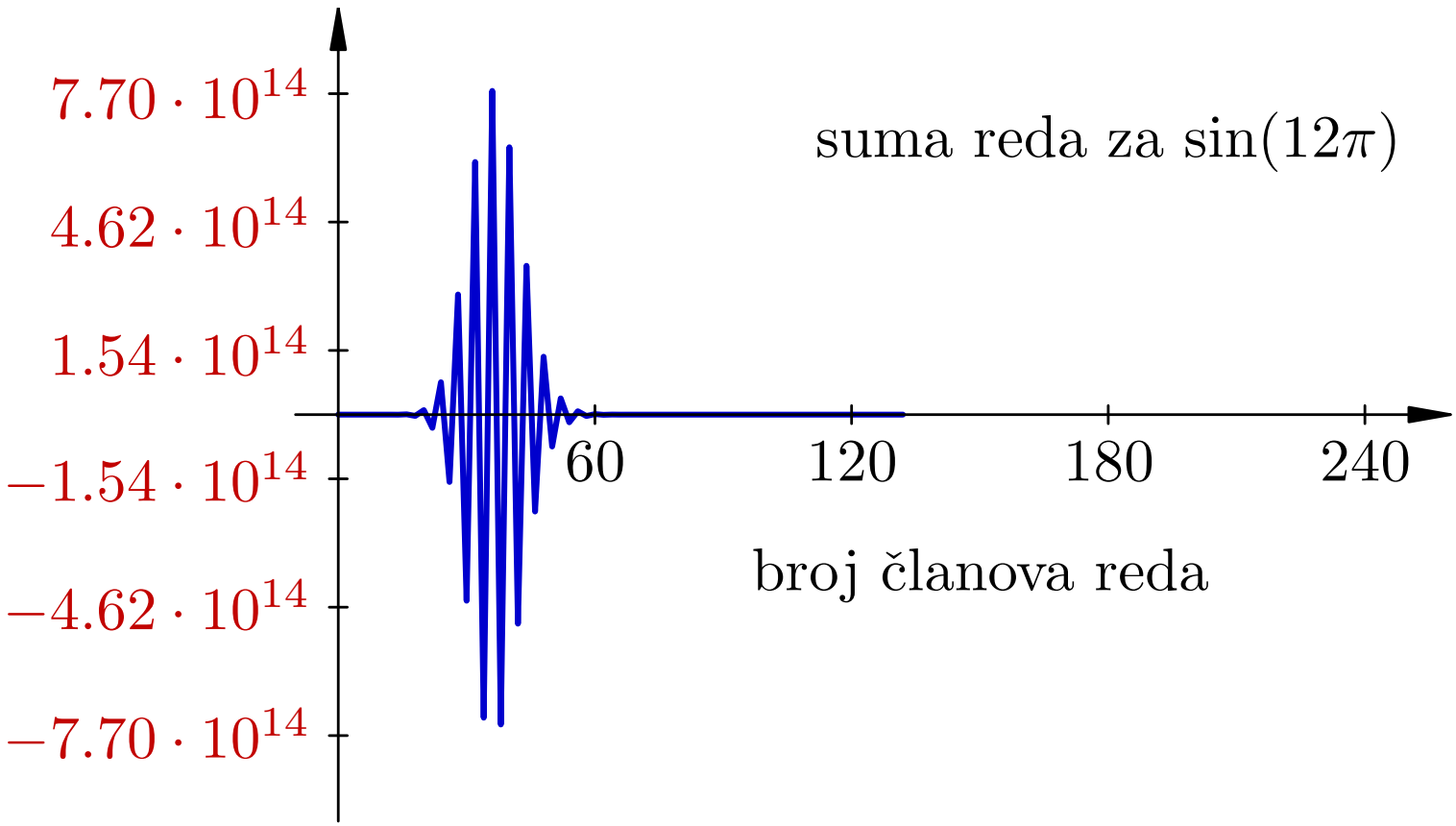
$$\begin{aligned}
\sin(12\pi)_{\text{funkcija}} &= -1.4695276245868527 \cdot 10^{-15} \\
\sin(12\pi)_{\text{Taylor}} &= -4.1381632107344454 \cdot 10^{-2} \\
\text{prava greška} &= 4.1381632107342983 \cdot 10^{-2} \\
\text{relativna greška} &= 2.8159819124854586 \cdot 10^{13}.
\end{aligned}$$

Članovi reda za $\sin(12\pi)$



Članovi alterniraju po predznaku.

Suma reda za $\sin(12\pi)$



Suma naglo naraste, a zatim se skrati, dok se ne stabilizira.

Posljedica: gubitak točnosti — relativno obzirom na najveći međurezultat.

Red za funkciju sinus, $x = 24\pi$

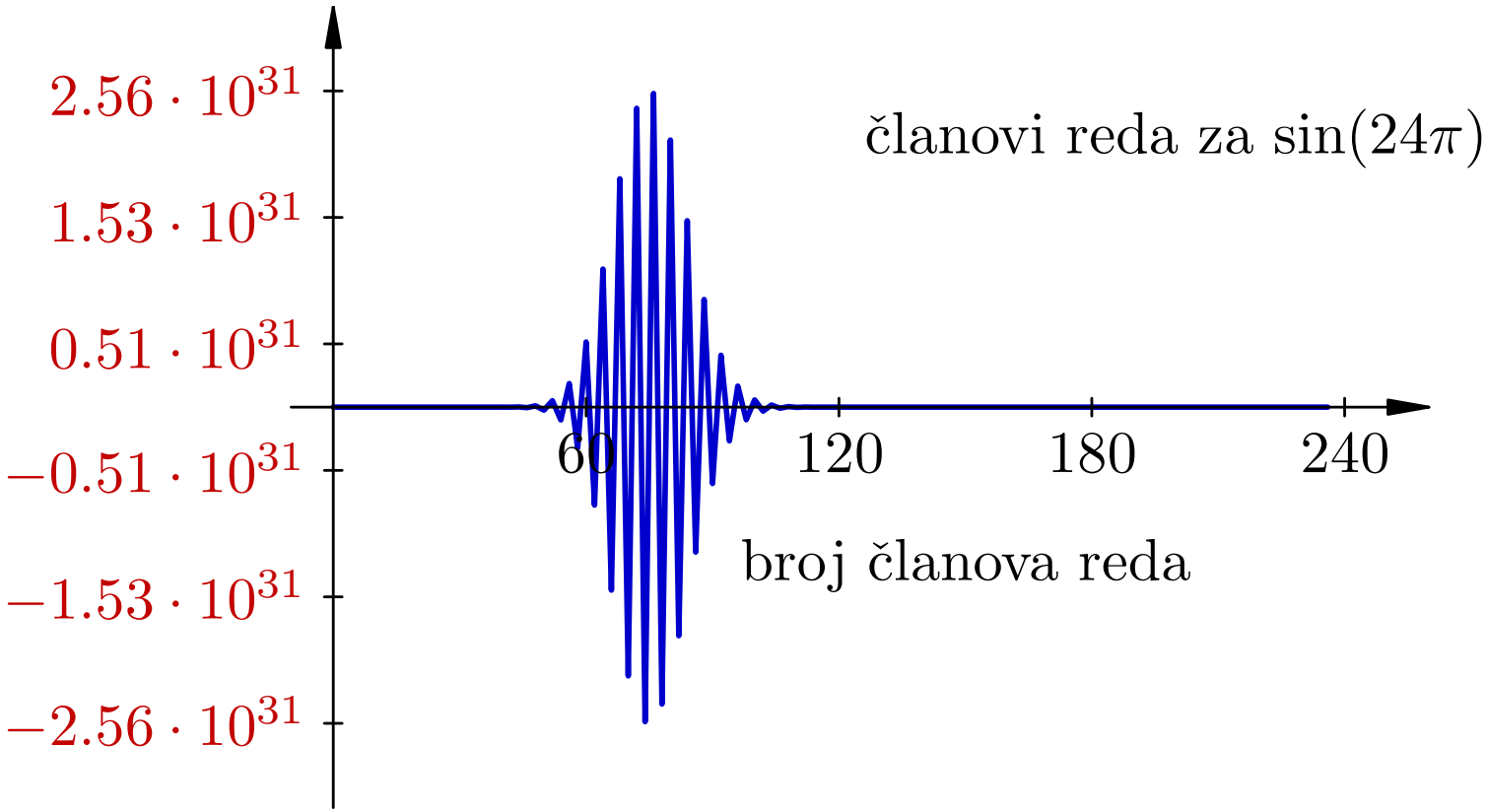
Za $x = 24\pi$ i $\varepsilon = 5 \cdot 10^{-16}$ trebamo 118 članova reda ($n = 235$)

$$|\text{greška odbacivanja}| \leq 2.8867 \cdot 10^{-17}$$
$$|\text{maksimalni član}| = 2.5555 \cdot 10^{31} \quad (n = 75).$$

Dobivamo:

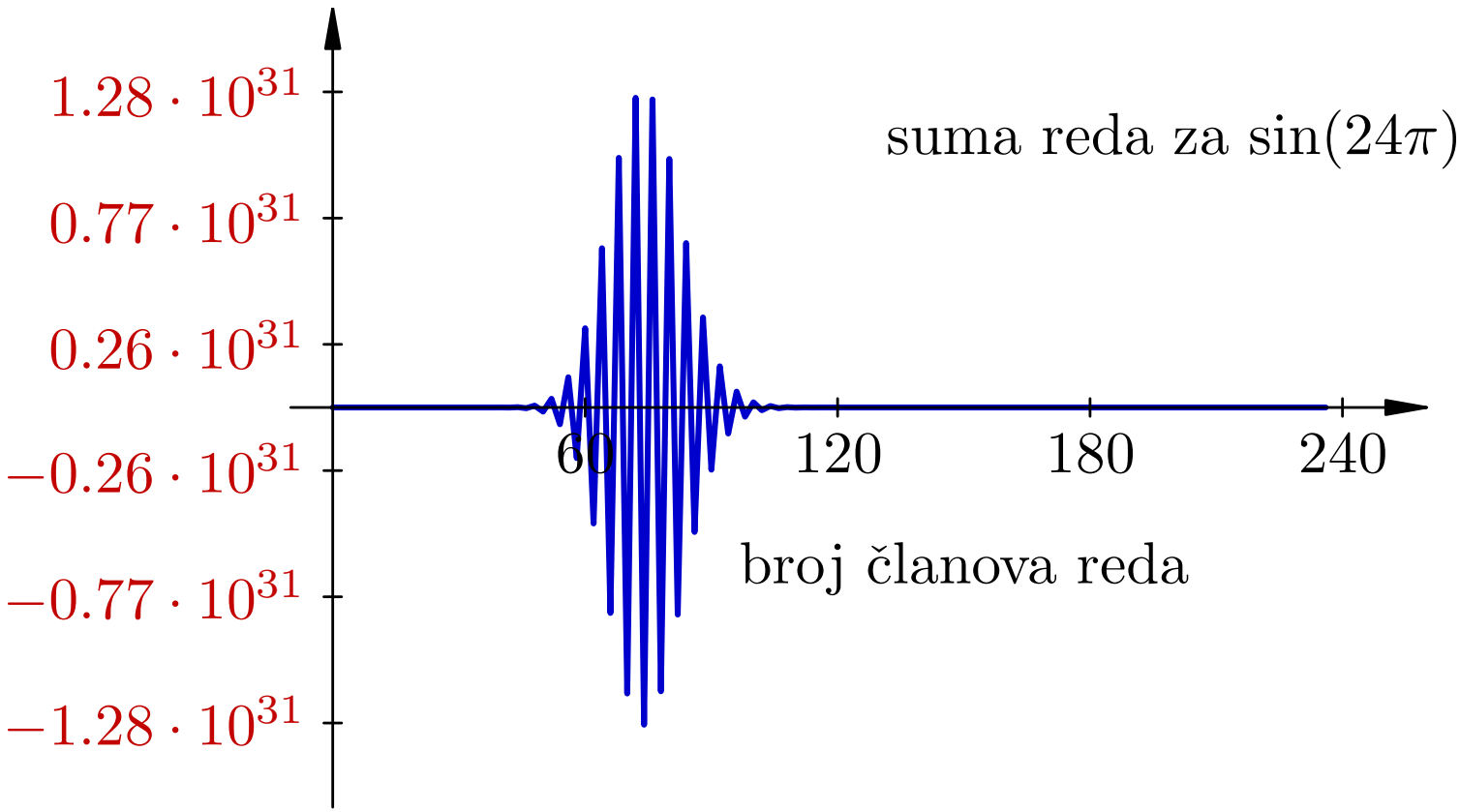
$$\sin(24\pi)_{\text{funkcija}} = -2.9390552491737054 \cdot 10^{-15}$$
$$\sin(24\pi)_{\text{Taylor}} = 3.6199983145905898 \cdot 10^{13}$$
$$\text{prava greška} = -3.6199983145905898 \cdot 10^{13}$$
$$\text{relativna greška} = 1.2316877389794990 \cdot 10^{28}.$$

Članovi reda za $\sin(24\pi)$



Članovi alterniraju po predznaku.

Suma reda za $\sin(24\pi)$



Suma naglo naraste, a zatim se skrati, dok se ne stabilizira.

Posljedica: gubitak točnosti — relativno obzirom na najveći međurezultat.

Tipovi brojeva u računalu

U računalu postoje dva bitno različita tipa brojeva:

- cijeli brojevi
- realni brojevi.

Oba skupa su konačni podskupovi odgovarajućih skupova $\mathbb{Z}$ i $\mathbb{R}$ u matematici.

Kao baza za prikaz oba tipa koristi se baza 2.

Podtipovi — ovisno o broju bitova n predviđenih za prikaz odgovarajuće vrste brojeva.

Cijeli brojevi — sažetak

Cijeli brojevi bez predznaka:

$$\mathbb{Z}_{2^n} = \{\, 0,\ 1,\ 2,\ \ldots\ ,\ 2^n - 2,\ 2^n - 1 \,\}.$$

Cijeli brojevi s predznakom:

$$\mathbb{Z}^{-}_{2^n} = \Big\{ -2^{n-1},\ -2^{n-1} + 1,\ \ldots\ ,\ -2,\ -1,$$
$$0,\ 1,\ \ldots\ ,\ 2^{n-1} - 2,\ 2^{n-1} - 1 \Big\}.$$

Aritmetika cijelih brojeva je modularna aritmetika modulo 2^n:

- operacije $+$, $-$ i $\cdot$ daju cjelobrojni rezultat modulo 2^n,
- operacije cjelobrojnog dijeljenja s ostatkom daju zaokruženi racionalni kvocijent (prema nuli) i pripadni ostatak (s predznakom prvog argumenta).

Oprez: $n!$ u cjelobrojnoj aritmetici — $50! = 0$ (modulo 2^{32}).

Realni brojevi — prikaz

Skup svih realnih brojeva prikazivih u računalu je konačan, a parametriziramo ga duljinom mantise (t) i eksponenta (w) i označavamo s $\mathbb{R}(t, w)$.

mantisa (signifikand)

$1.$	b_{-1}	b_{-2}	$\cdots$	b_{-t}

eksponent (karakteristika)

e_{w-1}	e_{w-2}	$\cdots$	e_1	e_0

Oznaka: preciznost $p := t + 1$ — to je ukupni broj vodećih značajnih bitova cijele mantise (zajedno s vodećim 1).

Ne može se svaki realni broj egzaktno spremiti u računalo.

Neka je broj $x \in \mathbb{R}$ unutar prikazivog raspona i

$$x = \pm\left(1 + \sum_{i=1}^{\infty} b_{-i} \cdot 2^{-i}\right) \cdot 2^{e}.$$

Realni brojevi — zaokruživanje

Ako razlomljeni dio mantise ima više od t znamenki, bit će spremljena aproksimacija tog broja $fl(x) \in \mathbb{R}(t, w)$, koja se može prikazati kao

$$fl(x) = \pm\left(1 + \sum_{i=1}^{t} b^*_{-i} \cdot 2^{-i}\right) \cdot 2^{e^*}.$$

Slično kao kod decimalne aritmetike,

- ako je prva odbačena znamenka 1, broj zaokružujemo nagore,
- a ako je 0, nadolje.

Time smo napravili apsolutnu grešku manju ili jednaku od "pola zadnjeg prikazivog bita", tj. $2^{-t-1+e} = 2^{-p+e}$.

Relativna greška zaokruživanja

Gledajući relativno, greška je manja ili jednaka

$$\left|\frac{x - f\ell(x)}{x}\right| \leq \frac{2^{-t-1+e}}{2^0 \cdot 2^e} = 2^{-t-1} = 2^{-p},$$

tj. imamo vrlo malu relativnu grešku.

Veličinu $2^{-t-1} = 2^{-p}$ zovemo jedinična greška zaokruživanja (engl. unit roundoff) i uobičajeno označavamo s u.

Za $x \in \mathbb{R}$ unutar prikazivog raspona, umjesto x sprema se zaokruženi broj $f\ell(x) \in \mathbb{R}(t, w)$ i vrijedi

$$f\ell(x) = (1 + \varepsilon)x, \quad |\varepsilon| \leq u,$$

gdje je ε relativna greška napravljena tim zaokruživanjem.

Standardni tipovi realnih brojeva — IEEE 754

Novi standard IEEE 754-2008 standard ima sljedeće tipove za prikaz realnih brojeva:

ime tipa	`binary32`	`binary64`	`binary128`
duljina u bitovima	32	64	128
$t =$	23	52	112
$w =$	8	11	15
$u = 2^{-p}$	2^{-24}	2^{-53}	2^{-113}
$u \approx$	$5.96 \cdot 10^{-8}$	$1.11 \cdot 10^{-16}$	$9.63 \cdot 10^{-35}$
raspon brojeva $\approx$	$10^{\pm 38}$	$10^{\pm 308}$	$10^{\pm 4932}$

Najveći tip `binary128` još uvijek ne postoji u većini procesora.

Standardni tipovi realnih brojeva — extended

Većina PC procesora još uvijek ima posebni dio — tzv. FPU (engl. Floating–Point Unit). On stvarno koristi

- tip `extended` iz starog standarda, koji odgovara tipu `extended binary64` u novom IEEE 754-2008 standardu.

Dio primjera koje ćete vidjeti napravljen je baš u tom tipu!

ime tipa	extended
duljina u bitovima	80
$t+1=$	$63+1$
$w=$	15
$u=2^{-p}$	2^{-64}
$u\approx$	$5.42\cdot 10^{-20}$
raspon brojeva $\approx$	$10^{\pm 4932}$

Realna aritmetika računala — standard

Realna aritmetika računala nije egzaktna!

Razlog:

- Rezultat svake operacije mora biti prikaziv,
- pa dolazi do zaokruživanja.

Standard IEEE 754-2008 za realnu artimetiku računala propisuje da za sve četiri osnovne aritmetičke operacije vrijedi

- ista ocjena greške zaokruživanja kao i za prikaz brojeva,
- tj. da izračunati rezultat ima malu relativnu grešku.

Isto vrijedi i za neke matematičke funkcije, poput $\sqrt{\ }$, ali ne mora vrijediti za sve funkcije (na pr. za sin oko 0, ili ln oko 1).

Standard iz 2008. g. to preporučuje, ali (zasad) ne zahtijeva.

Realna aritmetika računala — zaokruživanje

Neka je $\circ$ bilo koja od aritmetičkih operacija $+$, $-$, $*$, $/$, i neka su x i y prikazivi operandi (drugih, ionako, nema u računalu).

- Ako su x i y u dozvoljenom, tj. normaliziranom rasponu,
- i ako se egzaktni rezultat $x \circ y$, također, nalazi u normaliziranom rasponu (ne mora biti prikaziv),

za računalom izračunati (prikazivi) rezultat $fl(x \circ y)$ onda vrijedi

$$fl(x \circ y) = (1 + \varepsilon)(x \circ y), \quad |\varepsilon| \leq u,$$

gdje je u jedinična greška zaokruživanja za dani tip brojeva. Ova ocjena odgovara zaokruživanju egzaktnog rezultata!

Prava relativna greška ε ovisi o: x, y, operaciji $\circ$, i stvarnoj realizaciji aritmetike računala.

Posljedice zaokruživanja u realnoj aritmetici

Napomena. Bez pretpostavki o normaliziranom rasponu, prethodni rezultat ne vrijedi — greška može biti puno veća!

Zbog zaokruživanja, u realnoj aritmetici računala, nažalost,

- ne vrijede uobičajeni zakoni za aritmetičke operacije na skupu $\mathbb{R}$.

Na primjer, za aritmetičke operacije u računalu

- nema asocijativnosti zbrajanja i množenja,
- nema distributivnosti množenja prema zbrajanju.

Dakle, poredak izvršavanja operacija je bitan!

Zapravo, jedino standardno pravilo koje vrijedi je

- komutativnost za zbrajanje i za množenje.

Širenje grešaka zaokruživanja

Vidimo da gotovo svaki izračunati rezultat ima neku grešku. Osim toga,

- zaokruživanje se vrši nakon svake pojedine operacije.

Najlakše je stvar zamišljati kao da zaokruživanje ide “na kraju” operacije, iako je ono “dio operacije”.

Kad imamo puno aritmetičkih operacija (inače nam računalo ne treba), dolazi do tzv.

- akumulacije ili širenja grešaka zaokruživanja.

Malo pogrešni rezultati (možda već od čitanja), ulaze u operacije, koje opet malo griješe, i tako redom . . .

- greške se “šire” kroz sve što računamo!

Opasne i bezopasne operacije — sažetak

Jedina opasna operacija — kad rezultat može imati veliku relativnu grešku, je

- oduzimanje bliskih brojeva,
- i to samo kad polazni operandi već imaju neku grešku (samo oduzimanje je tada, najčešće, egzaktno).

Ovaj fenomen zove se opasno ili katastrofalno kraćenje.

Sve ostale operacije su bezopasne — relativna greška rezultata ne raste pretjerano. Posebno,

- dijeljenje malim brojem nije opasno,
- osim kad je mali broj nastao (ranijim) kraćenjem.

Nažalost, u nekim knjigama piše suprotno — i pogrešno.

Širenje grešaka u aritmetici

Za analizu širenja grešaka u aritmetici, treba pogledati

- što se događa s greškama u rezultatu,
- kad imamo greške u operandima.

Prvo u egzaktnoj aritmetici, a onda i u aritmetici računala.

Pretpostavimo onda da su polazni podaci (ili operandi) x i y malo perturbirani, s pripadnim relativnim greškama ε_x i ε_y.

Koje su operacije $\circ$ opasne (ako takvih ima), ako nam je aritmetika egzaktna, a operandi su $x(1+\varepsilon_x)$ i $y(1+\varepsilon_y)$?

Treba ocijeniti relativnu grešku $\varepsilon_\circ$ rezultata operacije $\circ$

$$(x \circ y)(1+\varepsilon_\circ) := [\,x(1+\varepsilon_x)\,] \circ [\,y(1+\varepsilon_y)\,].$$

Širenje grešaka u aritmetici (nastavak)

Naravno, za početak, moramo nešto pretpostaviti o ε_x i ε_y.

Što smatramo malom relativnom perturbacijom?

- Svakako mora biti $|\varepsilon_x|, |\varepsilon_y| < 1$, inače perturbacijom gubimo predznak operanda.

Međutim, to nije dovoljno za neki razuman rezultat.

- Stvarno očekujemo $|\varepsilon_x|, |\varepsilon_y| \leq c \ll 1$, tako da imamo barem nekoliko točnih znamenki u perturbiranim operandima. Na pr., $c = 10^{-1}$ (jedna točna znamenka).
- Idealno, u računalu je $|\varepsilon_x|, |\varepsilon_y| \leq u$, tj. kao da smo oba operanda samo spremili u memoriju računala (jedna greška zaokruživanja).

Širenje grešaka kod množenja

Množenje je bezopasno (benigno), jer vrijedi

$$\begin{aligned}(x * y)(1+\varepsilon_*) &:= [\,x(1+\varepsilon_x)\,] * [\,y(1+\varepsilon_y)\,] \\ &= xy(1+\varepsilon_x+\varepsilon_y+\varepsilon_x\varepsilon_y),\end{aligned}$$

kad stvar napišemo bez nepotrebnih zagrada i $*$. Onda je

$$\varepsilon_* = \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_x\varepsilon_y \approx \varepsilon_x + \varepsilon_y,$$

ako su $|\varepsilon_x|$ i $|\varepsilon_y|$ dovoljno mali da $\varepsilon_x\varepsilon_y$ možemo zanemariti.

Dakle, relativna greška se samo zbraja.

U idealnom slučaju $|\varepsilon_x|, |\varepsilon_y| \leq u$, dobivamo približnu ocjenu relativne greške $|\varepsilon_*| \leq 2u$ (do na u^2), ili, na pr., $|\varepsilon_*| \leq 2.01u$.

Širenje grešaka kod dijeljenja

Dijeljenje je, također, bezopasno (benigno), samo je zaključak malo dulji. Na početku je

$$(x / y)(1 + \varepsilon_/) := [x(1 + \varepsilon_x)] / [y(1 + \varepsilon_y)] = \frac{x(1 + \varepsilon_x)}{y(1 + \varepsilon_y)}.$$

Ako su $|\varepsilon_x|$ i $|\varepsilon_y|$ dovoljno mali da sve možemo linearizirati (tj. zanemariti "kvadratne" i više potencije epsilona), onda je

$$\frac{1}{1 + \varepsilon_y} = 1 - \varepsilon_y + \sum_{n=2}^{\infty} (-1)^n \varepsilon_y^n \approx 1 - \varepsilon_y$$

i

$$(1 + \varepsilon_x)(1 - \varepsilon_y) = 1 + \varepsilon_x - \varepsilon_y - \varepsilon_x \varepsilon_y \approx 1 + \varepsilon_x - \varepsilon_y.$$

Širenje grešaka kod dijeljenja (nastavak)

Kad to uvrstimo u prvi izraz, dobivamo

$$(x \,/\, y)\,(1+\varepsilon_{/}) \approx \frac{x}{y}\,(1+\varepsilon_x)\,(1-\varepsilon_y) \approx \frac{x}{y}\,(1+\varepsilon_x-\varepsilon_y).$$

Za relativnu grešku (približno) vrijedi

$$\varepsilon_{/} \approx \varepsilon_x - \varepsilon_y, \qquad |\varepsilon_{/}| \approx |\varepsilon_x| + |\varepsilon_y|.$$

Dakle, relativne greške se oduzimaju, a ocjene zbrajaju.

U idealnom slučaju $|\varepsilon_x|, |\varepsilon_y| \leq u$, opet dobivamo približnu ocjenu relativne greške $|\varepsilon_{/}| \leq 2u$.

Vidimo da su i množenje i dijeljenje bezopasne operacije za širenje grešaka zaokruživanja.

Širenje grešaka kod zbrajanja i oduzimanja

Zbrajanje i oduzimanje. Ovdje rezultat ključno ovisi o predznacima od x i y.

Sasvim općenito, neka su x i y proizvoljnih predznaka. Za zbrajanje i oduzimanje (oznaka $\pm$) vrijedi

$$(x \pm y)(1 + \varepsilon_{\pm}) := [x(1 + \varepsilon_x)] \pm [y(1 + \varepsilon_y)].$$

Pogledajmo prvo trivijalne slučajeve. Ako je egzaktni rezultat $x \pm y = 0$, onda imamo dvije mogućnosti.

- Ako je i $x(1 + \varepsilon_x) \pm y(1 + \varepsilon_y) = 0$, relativna greška $\varepsilon_{\pm}$ može biti biti koji broj (nije određena), a prirodno je uzeti $\varepsilon_{\pm} = 0$.
- U protivnom, za $x(1 + \varepsilon_x) \pm y(1 + \varepsilon_y) \neq 0$, gornja jednakost je nemoguća, pa stavljamo $\varepsilon_{\pm} = \pm\infty$.

Širenje grešaka kod zbrajanja i oduzimanja

Pretpostavimo nadalje da je $x \pm y \neq 0$. Onda je

$$\begin{aligned}(x \pm y)(1 + \varepsilon_{\pm}) &= x(1 + \varepsilon_x) \pm y(1 + \varepsilon_y) \\ &= (x \pm y) + (x\,\varepsilon_x \pm y\,\varepsilon_y) \\ &= (x \pm y)\left(1 + \frac{x\,\varepsilon_x \pm y\,\varepsilon_y}{x \pm y}\right).\end{aligned}$$

Relativnu grešku $\varepsilon_{\pm}$ možemo napisati u obliku linearne kombinacije polaznih grešaka ε_x i ε_y

$$\varepsilon_{\pm} = \frac{x\,\varepsilon_x \pm y\,\varepsilon_y}{x \pm y} = \frac{x}{x \pm y}\,\varepsilon_x \pm \frac{y}{x \pm y}\,\varepsilon_y.$$

Širenje grešaka kod zbrajanja i oduzimanja

Naravno, za nastavak rasprave ključno je pitanje

- koliko su veliki faktori uz polazne greške,

tj. da li "prigušuju" ili "napuhavaju" greške.

Da ne bismo stalno pisali hrpu oznaka $\pm$ (nepregledno), pogledajmo što se zbiva kad

- x i y imaju isti predznak, a
- posebno gledamo operacije $+$ i $-$.

Ako su x i y različitih predznaka, zamijenimo operaciju u suprotnu ($+ \mapsto -$, $- \mapsto +$), pa će vrijediti isti zaključci.

Nadalje, zbrajamo i oduzimamo brojeve istih predznaka.

Širenje grešaka kod zbrajanja

Zbrajanje brojeva istog predznaka je bezopasno (benigno). To izlazi ovako.

Zbog istih predznaka od x i y, vrijedi $|x|, |y| \leq |x + y|$, pa je

$$\left|\frac{x}{x+y}\right|, \left|\frac{y}{x+y}\right| \leq 1.$$

To vrijedi i kad je $x = 0$ ili $y = 0$. Odavde odmah slijedi

$$|\varepsilon_+| \leq |\varepsilon_x| + |\varepsilon_y|.$$

Dakle, relativna greška se, u najgorem slučaju, zbraja.

U idealnom slučaju $|\varepsilon_x|, |\varepsilon_y| \leq u$, opet dobivamo ocjenu relativne greške $|\varepsilon_+| \leq 2u$.

Širenje grešaka kod zbrajanja (nastavak)

Uz malo truda, dobivamo i bolju ocjenu. Prvo uočimo da za faktore vrijedi

$$\left|\frac{x}{x+y}\right| + \left|\frac{y}{x+y}\right| = 1,$$

i još iskoristimo $|\varepsilon_x|, |\varepsilon_y| \leq \max\{\, |\varepsilon_x|, |\varepsilon_y| \,\}$. Onda je

$$\begin{aligned} |\varepsilon_+| &\leq \left|\frac{x}{x+y}\right| |\varepsilon_x| + \left|\frac{y}{x+y}\right| |\varepsilon_y| \\ &\leq \left(\left|\frac{x}{x+y}\right| + \left|\frac{y}{x+y}\right|\right) \max\{\, |\varepsilon_x|, |\varepsilon_y| \,\} \\ &= \max\{\, |\varepsilon_x|, |\varepsilon_y| \,\}. \end{aligned}$$

Širenje grešaka kod zbrajanja (nastavak)

Dakle, relativna greška zbrajanja je, u najgorem slučaju,

- maksimum polaznih grešaka (ne treba ih zbrajati).

U idealnom slučaju $|\varepsilon_x|, |\varepsilon_y| \leq u$, sada dobivamo ocjenu relativne greške $|\varepsilon_+| \leq u$. Bolje ne može!

Naravno, isto vrijedi i za oduzimanje brojeva različitih predznaka. I to je bezopasno.

Širenje grešaka kod oduzimanja

Oduzimanje brojeva istog predznaka može biti opasno, čak katastrofalno loše.

- Točnije, ne mora uvijek biti opasno, ali može!

Zašto i kada je opasno?

Zbog različitih predznaka od x i y, uz $x \neq 0$ i $y \neq 0$, sigurno vrijedi

$$|x - y| < \max\{\, |x|, |y| \,\},$$

pa je barem jedan od faktora veći od 1, tj.

$$\max\left\{ \left|\frac{x}{x-y}\right|, \left|\frac{y}{x-y}\right| \right\} > 1.$$

Širenje grešaka kod oduzimanja (nastavak)

Odavde odmah slijedi da u ocjeni relativne greške

$$|\varepsilon_-| \leq \left|\frac{x}{x-y}\right| |\varepsilon_x| + \left|\frac{y}{x-y}\right| |\varepsilon_y|$$

na barem jednom mjestu imamo rast greške, a to se može dogoditi i na oba mjesta.

Kad je to zaista opasno? Ako je $|x-y| \ll |x|, |y|$, ovi faktori

$$\left|\frac{x}{x-y}\right|, \quad \left|\frac{y}{x-y}\right|,$$

mogu biti proizvoljno veliki, pa i relativna greška $|\varepsilon_-|$ rezultata može biti proizvoljno velika!

Opasno oduzimanje ili kraćenje

Opasna situacija $|x - y| \ll |x|, |y|$ znači da je

- rezultat oduzimanja brojeva istog predznaka $=$
- broj koji je po apsolutnoj vrijednosti mnogo manji od polaznih podataka (oba operanda),

a to znači da operandi x i y moraju biti bliski, tako da dolazi do kraćenja. Zato se ovaj fenomen obično zove

Opasno ili katastrofalno kraćenje.

Dosad smo govorili da relativna greška u tom slučaju može biti velika, ali da li se to zaista događa?

- Naime, ovdje je ipak riječ o ocjeni greške, pa se možda događa da je ocjena vrlo loša, a prava greška ipak mala!

Nažalost, nije tako! To se itekako događa u praksi!

Primjer katastrofalnog kraćenja

Zakruživanjem ulaznih podataka dolazi do male relativne greške. Kako ona može utjecati na konačni rezultat?

Primjer. Uzmimo realnu aritmetiku "računala" u bazi 10. Za mantisu (značajni dio broja) imamo $p = 4$ dekadske znamenke, a za eksponent imamo 2 znamenke (što nije bitno). Neka je

$$x = 8.8866 = 8.8866 \times 10^0,$$

$$y = 8.8844 = 8.8844 \times 10^0.$$

Umjesto brojeva x i y, koji nisu prikazivi, u "memoriju" spremamo brojeve $fl(x)$ i $fl(y)$, pravilno zaokružene na $p = 4$ znamenke

$$fl(x) = 8.887 \times 10^0,$$

$$fl(y) = 8.884 \times 10^0.$$

Primjer katastrofalnog kraćenja (nastavak)

Ovim zaokruživanjima napravili smo malu relativnu grešku u x i y (ovdje je $u = \frac{1}{2}\, b^{-p} = 5 \times 10^{-5}$).

Razliku $fl(x) - fl(y)$ računamo tako da izjednačimo eksponente (što već jesu), oduzmemo značajne dijelove (mantise), pa normaliziramo

$$\begin{aligned} fl(x) - fl(y) &= 8.887 \times 10^0 - 8.884 \times 10^0 \\ &= 0.003 \times 10^0 = 3.??? \times 10^{-3}. \end{aligned}$$

Kod normalizacije, zbog pomaka "ulijevo", pojavljuju se

- $?$ = znamenke koje više ne možemo restaurirati (ta informacija se izgubila — zaokruživanjem x i y).

Što sad?

Primjer katastrofalnog kraćenja (nastavak)

Računalo radi isto što bismo i mi napravili:

- na ta mjesta ? upisuje 0.

Razlog: da rezultat bude točan, ako su polazni operandi točni. Dakle, ovo oduzimanje je egzaktno i u aritmetici računala.

Konačni izračunati rezultat je $fl(x) - fl(y) = 3.000 \times 10^{-3}$.

Pravi rezultat je

$$\begin{aligned} x - y &= 8.8866 \times 10^0 - 8.8844 \times 10^0 \\ &= 0.0022 \times 10^0 = 2.2 \times 10^{-3}. \end{aligned}$$

Već prva značajna znamenka u $fl(x) - fl(y)$ je pogrešna, a relativna greška je ogromna! Uočite da je ta znamenka (3), ujedno, i jedina koja nam je ostala — sve ostalo se skratilo!

Primjer katastrofalnog kraćenja (nastavak)

Prava katastrofa se događa ako $3.??? \times 10^{-3}$ uđe u naredna zbrajanja (oduzimanja), a onda se skrati i ta trojka!

Uočite da je oduzimanje $fl(x) - fl(y)$ bilo egzaktno i u aritmetici našeg "računala", ali rezultat je, svejedno, pogrešan.

Krivac, očito, nije oduzimanje (kad je egzaktno).

- Uzrok su polazne greške u operandima $fl(x)$, $fl(y)$.

Ako njih nema, tj. ako su polazni operandi egzaktni,

- i dalje, naravno, dolazi do kraćenja,
- ali je rezultat (uglavnom, a po IEEE standardu sigurno) egzaktan,

pa se ovo kraćenje onda zove benigno kraćenje.

Interpretacija grešaka zaokruživanja

Kod približnog računanja — na pr. u aritmetici računala, imamo greške zaokruživanja. One nastaju

- spremanjem ulaznih podataka u algoritam,
- kao rezultat svake pojedine aritmetičke operacije.

Ključna stvar za analizu tih grešaka je

- svođenje na teoriju perturbacija, u smislu
- egzaktnog računanja s perturbiranim polaznim podacima!

Kako to ide? Ilustracija na IEEE standardu.

Greške prikaza i aritmetike

Ako je ulazni podatak $x \in \mathbb{R}$

- unutar raspona brojeva prikazivih u računalu,

onda se, umjesto x, sprema zaokruženi prikazivi broj $f\ell(x)$, tako da vrijedi

$$f\ell(x) = (1 + \varepsilon)x, \quad |\varepsilon| \leq u,$$

gdje je

- ε relativna greška napravljena tim zaokruživanjem,
- a u je jedinična greška zaokruživanja.

Imamo malu relativnu grešku, a računalo dalje računa

- s perturbiranim polaznim podatkom $f\ell(x)$.

Slična stvar vrijedi i za aritmetičke operacije.

Zaokruživanje u aritmetici

Ponovimo što već znamo o aritmetici na računalu.

Osnovna pretpostavka za realnu aritmetiku u računalu:

- za sve četiri osnovne aritmetičke operacije vrijedi ista ocjena greške zaokruživanja kao i za prikaz brojeva.

Isto vrijedi i za neke matematičke funkcije, poput $\sqrt{\ }$, ali ne mora vrijediti za sve funkcije (na pr. za sin oko 0, ili ln oko 1).

Preciznije: Neka $\circ$ označava bilo koju operaciju $+$, $-$, $*$, $/$. Za prikazive brojeve u dozvoljenom rasponu $x, y \in \mathcal{F}$, takve da je i egzaktni rezultat $x \circ y$ u dozvoljenom rasponu (tj. u $\mathcal{F}$), vrijedi ocjena relativne greške

$$fl(x \circ y) = (1 + \varepsilon)(x \circ y), \quad |\varepsilon| \leq u.$$

Broj ε ovisi o x, y, operaciji $\circ$ i aritmetici računala.

Širenje grešaka zaokruživanja

Kad imamo puno operacija — nastaje problem:

- greške se šire i
- treba procijeniti grešku u rezultatu.

Kako to napraviti?

Ponovimo, za aritmetiku računala ne vrijedi:

- asocijativnost zbrajanja i množenja,
- distributivnost množenja prema zbrajanju.

Posljedica: poredak izvršavanja operacija je bitan!

Jedino što vrijedi je:

- komutativnost za zbrajanje i množenje.

Širenje grešaka zaokruživanja (nastavak)

Za analizu grešaka zaokruživanja ne možemo koristiti nikakva "normalna" pravila za aritmetičke operacije u računalu, jer ti zakoni naprosto ne vrijede.

Stvarna algebarska struktura je izrazito kompliciranа i postoje debele knjige na tu temu.

- Vrijede neka "zamjenska" pravila,

ali su neupotrebljiva za analizu iole većih proračuna.

Međutim, analiza pojedinih operacija postaje bitno lakša, ako uočimo da:

- greške zaokruživanja u aritmetici računala možemo interpretirati i kao egzaktne operacije, ali na "malo" pogrešnim podacima!

Širenje grešaka zaokruživanja (nastavak)

Kako? Dovoljno je faktor $(1+\varepsilon)$ u ocjeni greške

$$fl(x \circ y) = (1+\varepsilon)\,(x \circ y), \quad |\varepsilon| \leq u,$$

"zalijepiti" na x i/ili y. To je isto kao da operand(i) ima(ju) neku relativnu grešku na ulazu u operaciju, a operacija $\circ$ je egzaktna. Dakle,

- izračunati (ili "zaokruženi") rezultat jednak je egzaktnom rezultatu, ali za malo promijenjene (tj. perturbirane) podatke (u relativnom smislu).

Što dobivamo ovom interpretacijom?

- Onda možemo koristiti "normalna" pravila egzaktne aritmetike za analizu grešaka.

Širenje grešaka zaokruživanja (nastavak)

Ne zaboravimo još da ε ovdje ovisi o x, y, i operaciji $\circ$. Kad takvih operacija ima više, pripadne greške obično označavamo nekim indeksom u ε.

Na primjer, ako je $\circ$ zbrajanje ($+$), onda je

$$\begin{aligned} fl(x+y) &= (1+\varepsilon_{x+y})(x+y) \\ &= [(1+\varepsilon_{x+y})x] + [(1+\varepsilon_{x+y})y], \end{aligned}$$

uz $|\varepsilon_{x+y}| \leq u$, ako su x, y i $x+y$ u prikazivom rasponu.

Potpuno ista stvar vrijedi i za oduzimanje.

Kod množenja i dijeljenja možemo birati kojem ulaznom podatku ćemo "zalijepiti" faktor $(1+\varepsilon)$.

Širenje grešaka zaokruživanja (nastavak)

Za množenje možemo pisati

$$\begin{aligned} f\ell(x * y) &= (1 + \varepsilon_{x*y})\,(x * y) \\ &= [\,(1 + \varepsilon_{x*y})\,x\,] * y = x * [\,(1 + \varepsilon_{x*y})\,y\,], \end{aligned}$$

a za dijeljenje

$$\begin{aligned} f\ell(x \,/\, y) &= (1 + \varepsilon_{x/y})\,(x \,/\, y) \\ &= [\,(1 + \varepsilon_{x/y})\,x\,] \,/\, y = x \,/\, [\,y/(1 + \varepsilon_{x/y})\,]. \end{aligned}$$

Postoje i druge varijante. Na primjer, da svakom operandu "zalijepimo" $\sqrt{1+\varepsilon}$ (odnosno $1/\sqrt{1+\varepsilon}$), ali to nije naročito važno. Bitno je samo da je izračunati rezultat egzaktan za malo perturbirane podatke.

Širenje grešaka (bilo kojih)

Zasad nije vidljivo koja je točno korist od ove interpretacije.
Stvar se bolje vidi tek kad imamo više operacija zaredom.

Međutim, ova ideja s “malo pogrešnim podacima” je

- baš ono što nam treba za analizu širenja grešaka,

i to bez obzira na uzrok grešaka, čim se sjetimo da

- rezultati ranijih operacija
- s nekom greškom ulaze u nove operacije.

Širenje grešaka u aritmetici računala

Dosad smo gledali širenje grešaka u egzaktnoj aritmetici.

U aritmetici računala postupamo na potpuno isti način. Samo treba zgodno iskoristiti onu raniju interpretaciju da je

- izračunati (ili "zaokruženi") rezultat jednak egzaktnom, ali za malo perturbirane podatke (u relativnom smislu).

A širenje grešaka u egzaktnoj aritmetici znamo.

Ukratko, bez dokaza:

Svaka pojedina aritmetička operacija u računalu samo

- povećava perturbaciju svojih ulaznih podataka za jedan faktor oblika $(1 + \varepsilon)$, uz ocjenu $|\varepsilon| \leq u$,

ovisno o tome kojim operandima "zalijepimo" taj faktor.

Natuknice o analizi grešaka

Bilo koji algoritam gledamo kao preslikavanje:

$$\text{ulaz (domena)} \ \rightarrow \ \text{izlaz (kodomena)}.$$

Naravno, zanima nas

- greška u izračunatom rezultatu — u kodomeni,
- uz približno računanje aritmetikom računala.

Ova greška zove se greška unaprijed (engl. forward error).

Nažalost, postupak "direktne" analize grešaka unaprijed je težak,

- relativno rijetko "ide" i često daje loše ocjene greške.

Primjer. Obična norma vektora u $\mathbb{R}^2$ (i još dodaj "scaling").
(v. Z. Drmač, članak u MFL-u).

Natuknice o analizi grešaka (nastavak)

U praksi se puno češće koristi tzv. “obratna” analiza grešaka. Osnovna ideja je ista kao i za pojedine operacije:

- izračunati rezultati algoritma mogu se dobiti egzaktnim računanjem,
- ali na perturbiranim ulaznim podacima — u domeni.

Ova greška u domeni zove se greška unatrag ili obratna greška (engl. backward error).

Prednost: ocjena tih perturbacija u domeni je bitno lakša,

- jer se akumulacija onih faktora oblika $(1 + \varepsilon)$ prirodno radi unatrag — od rezultata prema polaznim podacima.

Natuknice o analizi grešaka (nastavak)

Postupak “unatrag” za nalaženje grešaka u izračunatim rezultatima ide u dva koraka.

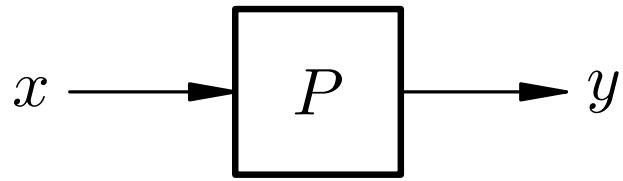
- Prvo se obratnom analizom naprave ocjene perturbacija polaznih podataka u domeni,
- a zatim se koristi matematička teorija perturbacije, koja daje ocjene grešaka rezultata u kodomeni. Ovaj izvod ide za egzaktni račun, pa vrijede sva normalna pravila.

Tako stižemo do pojmova:

- stabilno i nestabilno računanje ili algoritam $=$ “prigušivač” ili “pojačalo” grešaka.
- primjeri nestabilnosti — uklonjivi i NEuklonjivi, slijede u idućem predavanju.

Greška unaprijed i obratna greška

Uzmimo da algoritam "rješava" problem P.



Ako problem P intepretiramo kao računanje funkcije f, onda grešku unaprijed i obratnu grešku možemo prikazati ovako: