Jemný úvod do numerických metod.

Matematické algoritmy (11MA)

Jan Přikryl

7. přednáška 11MA
čtvrtek 11. listopadu 2010

verze: 2010-11-08 17:00

1 Úvod do numerické matematiky

1.1 Matematické modelování

Pro detailnější obeznámení s pojmy, uváděnými níže, doporučuji konzultovat monografii Michaela T. Heathe [3], případně nějaká z mnoha skript o numerické matematice, která v posledních letech vyšla – například [2], části toho skripta jsou dostupné i on-line.

Systém – část prostředí, kterou lze vnímat odděleně od jejího okolí. Systém od okolí odděluje nějaká hranice, ať už fyzická, či myšlenková.

Abychom mohli zkoumat chování nějakého systému, můžeme

- provádět **experimenty** anebo
- popsat systém matematicky – sestavit jeho matematický **model**.

V rámci předmětu *Modelování systémů a procesů* jsme si ukazovali různé modely, popisující chování systémů ve spojitém či diskrétním čase a popis systémů těmito modely dělili na *vnější* a *vnitřní* (stavový) popis.

Závaží na pružině

Kmity závaží na pružině popisuje diferenciální rovnice harmonických kmitů

$$\frac{\mathrm{d}^2 y(t)}{\mathrm{d}t^2} + \omega^2 y(t) = 0$$

Model vývoje dluhu

Finanční model vývoje zadlužení může mít tvar diferenční rovnice

$$y(n+1) = [1 + \alpha(n)] \cdot y(n) - x(n)$$

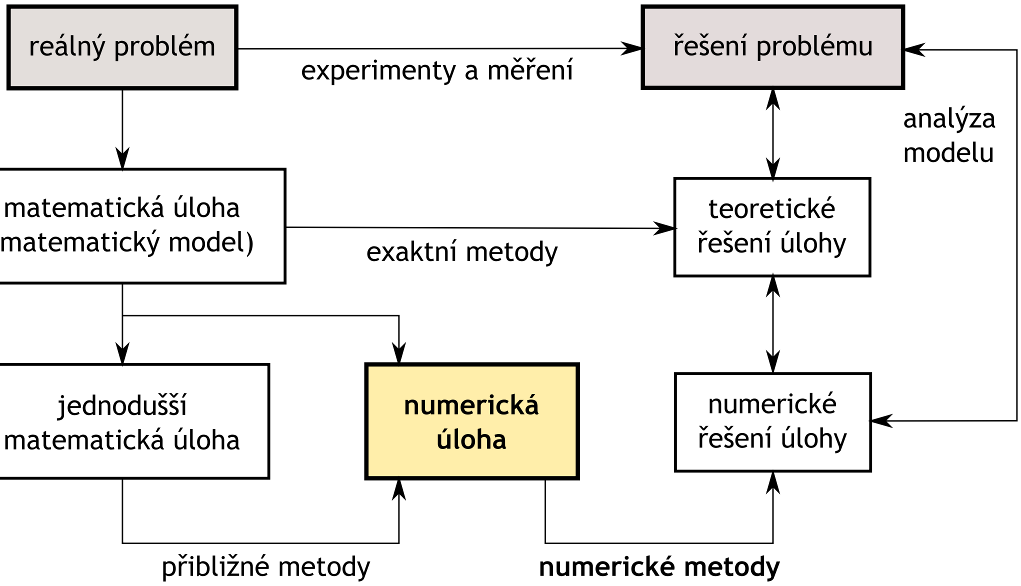
kde $y(n)$ je výška dluhu (hodnota $y(0)$ bude odpovídat výšce původní půjčky), α je v čase proměnná úroková míra a $x(n)$ jsou splátky dluhu.

K zkoumání matematických modelů systémů jsme používali Matlab a Simulink.

V příštích přednáškách si stručně povíme

- co vlastně počítač musí umět, aby dokázal s dostatečnou přesností počítat s matematickými modely reálného světa,
- jaké matematické algoritmy se ve vybraných případech používají, a
- proč není dobré počítači vždycky slepě věřit.

1.2 Pozice numerické matematiky



Numerická úloha – jasný a jednoznačný popis funkčního vztahu mezi *konečným* počtem vstupních a výstupních dat.

Data – vyjádřitelná konečným počtem čísel.

⇒ Je to matematický model reálného problému, jenž může být v konečném čase realizován na počítači.

Numerický algoritmus – zajímá nás realizace aritmetických operací s čísly, nikoliv logické operace.

Konstrukce a analýza metod a algoritmů pro realizaci numerických úloh na počítačích: **numerická matematika**.

Vstupní a výstupní data jsou vlastně danými a hledanými objekty numerické úlohy [2].

1.3 Numerická úloha

Toto je numerická úloha

Řešení rovnice $x^4 + a_1x^2 + a_2x + a_3 = 0$ je možno počítat numericky pro konkrétní vstupní vektor $\mathbf{a} = [a_1, a_2, a_3] \in \mathbb{R}^3$.

Výstupem numerické metody řešení bude vektor $\mathbf{x} = [x_1, x_2, x_3, x_4] \in \mathbb{C}^4$

Toto není numerická úloha

Řešení rovnice $y''(x) - y(x)^2 = 0$ za daných počátečních podmínek nelze hledat numericky.

Numerický přístup pouze pro vyšetření hodnot ve vybraných bodech $x \in \{x_i\}_1^n$

Ta množina $x \in \{x_i\}_1^n$ bude typicky $x_i = x_0 + i \cdot \Delta$, spojitý interval aproximujeme diskrétním.

2 Zobrazení čísel v počítači

Celá čísla, pevná a plovoucí řádová čárka

Počítač $\Rightarrow$ binární logika, binární reprezentace čísel.

Celá čísla – ekvivalenty ve dvojkové soustavě, jeden (nejvyšší) bit na znaménko

Příklad 1. $66_{10} = 01000010_2$, $-126_{10} = 11111110_2$

Pevná řádová čárka – pevný počet bitů pro celou a desetinnou část čísla

Příklad 2. $5{,}3100_{10} \approx 10101010_2 (= 101{,}01010_2)$, $7{,}5625_{10} = 11110010_2$

Plovoucí řádová čárka – převod na tvar $m \cdot 10^n$

Celá čísla reprezentují i čísla přirozená ve dvojnásobném rozsahu (nepotřebujeme záporná čísla). Například na osmi bitech můžeme reprezentovat rozsah 256 hodnot buď jako přirozená čísla na intervalu $\langle 0, 255\rangle$ nebo jako celá čísla typicky v rozsahu $\langle -128, 127\rangle$ (tzv. *doplňkový kód*, existují i jiné varianty s rozsahy $\langle -127, 127\rangle$, ty ale mají problém s dvěma reprezentacemi čísla 0).

Q notace označuje počet bitů před a za desetinnou čárkou [1]: Q3.5 je osmibitové číslo, jež může nabývat hodnot 000,00000 až 111,11111, tedy $0{,}00000, 0{,}03125, \ldots 7{,}93750, 7{,}96875$.

Zobrazení čísel v počítači

Definice 3. Číslo x lze reprezentovat v **semilogaritmickém tvaru s normalizovanou mantisou** jako

$$x = \operatorname{sgn} x \left(\frac{a_1}{q} + \frac{a_2}{q^2} + \cdots + \frac{a_l}{q^l} \right) q^b$$

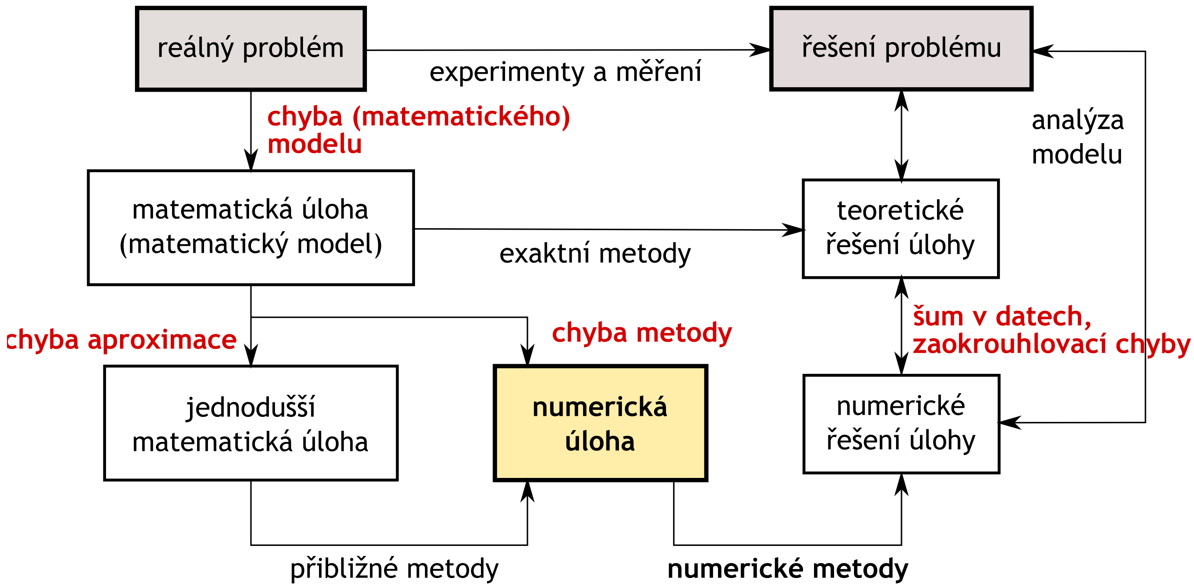
kde $q > 1$ je *základ*, $a_i \in \{0, 1, \ldots, q-1\}$ jsou *číslice mantisy* a $b \in \{m_1, \ldots, m_2\}$ je *exponent.*

Reprezentace x pokrývá pouze podmnožinu $\mathbb{R}$ – má pouze $2(q-1)q^{l-1}(m_2 - m_1 + 1) + 1$ prvků

$\Rightarrow$ některá reálná čísla nelze přesně reprezentovat.

Předpokládá se, že b je v intervalu $\langle m_1, m_2\rangle$ reprezentováno rovnoměrně.

3 Typy chyb



Při tvorbě matematického modelu úlohy z reálného světa jsme vždy nuceni provést určitá přiblížení a některé skutečnosti si idealizovat. Rozdíl řešení idealizovaného problému a řešení reálného problému nazýváme *chybou matematického modelu* nebo také jenom *chybou modelu*. Z velikosti této chyby posuzujeme zpětně vhodnost či nevhodnost zvoleného aproximace reality.

Jestliže k řešení matematické úlohy použijeme metodu, která nám neposkytne přesné (teoretické) řešení dané úlohy, pak chybu, které se dopustíme, nazýváme *chybou metody*. Typickým příkladem je chyba, které se dopustíme, když za limitu nekonečné posloupnosti vezmeme některý její člen s dostatečně velkým indexem. Často řešíme matematickou úlohu tím, že pomocí jistých metod ji nahradí- me (aproximujeme) úlohou jednodušší – obvykle již úlohou numerickou – a rozdíl řešení těchto dvou úloh nazýváme *chybou aproximace*. Tato chyba se často bere jakou součást chyby metody.

K posouzení přesnosti výsledku musíme ještě vzít v úvahu *chyby (šum) ve vstupních datech* dané jednak chybami měření, jednak způsobené zobrazením vstupních dat do nesouvislé množiny reprezentující data v počítači. Poslední skupinou chyb jsou *chyby zaokrouhlovací*. Do této skupiny zahrnujeme všechny nepřesnosti způsobené realizací algoritmu v počítači včetně nepřesného provádění aritmetických operací.

3.1 Chyby výpočtu

Relativní a absolutní chyba

Číslo x v numerickém algoritmu reprezentováno přiblížením $\tilde{x}$

Definice 4. **Absolutní chybou** $\mathcal{A}(x)$ aproximace čísla x číslem $\tilde{x}$ označujeme rozdíl

$$\mathcal{A}(x) = |x - \tilde{x}|$$

Relativní chybou $\mathcal{R}(x)$ aproximace čísla x číslem $\tilde{x}$ označujeme podíl

$$\mathcal{R}(x) = \frac{\mathcal{A}(x)}{|x|} = \left|\frac{x - \tilde{x}}{x}\right|, x \neq 0$$

Vlastnosti $\mathcal{A}(x)$ a $\mathcal{R}(x)$

Aritmetické operace mohou mít na nepřesné reprezentace čísel devastující vliv (například podíl velkého a malého čísla).

Relativní chyba se vždy výrazně zvětší při odčítání dvou blízkých čísel:

$$\mathcal{R}(x \pm y) = \frac{\mathcal{A}(x \pm y)}{|x \pm y|}$$

Násobení ani dělení nemají na $\mathcal{A}(x)$ a $\mathcal{R}(x)$ výraznější vliv.

Příklady chyb výpočtu

Mějme čísla $x_1 = 758320$, $x_2 = 757940$, reprezentována jako $\tilde{x}_1 = 758330$ a $\tilde{x}_2 = 757930$. Platí $\mathcal{A}(x_1) = 10$, $\mathcal{A}(x_2) = 10$,

$$\mathcal{R}(x_1) = \frac{10}{758320} \leq 1{,}32 \cdot 10^{-5}, \mathcal{R}(x_2) = \frac{10}{757940} \leq 1{,}32 \cdot 10^{-5}.$$

Odčítání

Máme-li $v = x_1 - x_2 = 380$, bude $\tilde{v} = \tilde{x}_1 - \tilde{x}_2 = 400$. Proto $\mathcal{A}(v) = |v - \tilde{v}| = 20$ a

$$\mathcal{R}(v) = \frac{\mathcal{A}(v)}{|v|} = \frac{20}{380} \leq 0{,}053.$$

Relativní chyba rozdílu $v = x_1 - x_2$ je o tři řády vyšší.

4 Typy numerických úloh

Matematická úloha A její formalizace

Mějme dány dva vektorové prostory $\mathscr{B}_x$ (vstupní data) a $\mathscr{B}_y$ (výstupní data).

Definice 5. **Úlohou** rozumíme relaci

$$y = U(x), \ x \in \mathscr{B}_x, y \in \mathscr{B}_y$$

⇒ transformuje posloupnost vstupních dat na posloupnost výsledků.

4.1 Korektnost úloh

Korektní úloha Definice

Definice 6. Řekneme, že úloha je **korektní**, pokud

1. ke každému $x \in \mathscr{B}_x$ existuje jediné $y \in \mathscr{B}_y$,
2. řešení spojitě závisí na datech, tedy pokud $x_n \to x$ a $U(x_n) = y_n$, pak také $y_n \to y = U(x)$.

Nekorektní úlohy – nejednoznačně řešitelné problémy, intervalové odhady, nevhodná formulace zadání
Příklad 7. Určete matici $\mathbf{A}$ splňující rovnici $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ máte-li dány hodnoty $\mathbf{x}$ a $\mathbf{b}$. Určete $\sqrt{4}$.

4.2 Podmíněnost úloh

Dobře podmíněné úlohy Definice

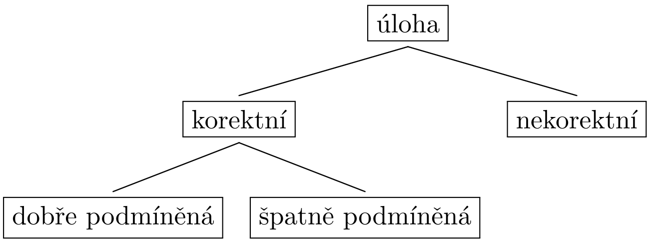
Podíl

$$C_{\mathsf{p}} = \frac{\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|}}{\frac{\|\Delta y\|}{\|y\|}}$$

se nazývá číslo podmíněnosti úlohy.

Definice 8. Budeme říkat, že korektní úloha je **dobře podmíněná**, jestliže malá změna ve vstupních datech vyvolá malou změnu řešení (resp. $C_{\mathsf{p}} \approx 1$).

Taxonomie úloh



Reference

[1] Oberstar, E. L. Fixed-Point Representation and Fractional Math. `http://www.superkits.net/whitepapers/Fixed%20Point%20Representation%20&%20Fractional%20Math.pdf`

[2] Míka, S. – Brandner, M. *Numerické metody I.* Plzeň : ZČU, 2002

[3] Heath, M.T. *Scientific Computing: An Introductory Survey.* 2nd Edition. New York : McGraw-Hill, 2002. 563pp.