Arytmetyka...

Literatura: O.B. Arushanyan, S.f. Zalotkin, Chyslennye reshenie obyknovennykh differencyalnych uravnenyi.

1. Podstawy arytmetyki komputerowej

Komputer nie jest idealnym rachmistrzem. Z powodu swojej dyskretnej budowy wciąż robi błędy. Operacje w komputerze wykonywane są na **skończonych zbiorach liczb**, a nie na wszystkich liczbach rzeczywistych.

Podstawowe trzy źródła błędów obliczeń komputerowych:

1. błędy danych wejściowych
2. zamiana procesów nieskończonych skończonymi
3. dokładność reprezentowania liczb w komputerze (zaokrąglenia)

Nie da się uniknąć żadnego z wymienionych błędów. Należy więc kontrolować ich ewolucję w toku prowadzonych rachunków.

Zbiór liczb rzeczywistych ma taką własność, że między dowolnie bliskie dwie liczby można wstawić inne. Jest gęsty. Zbiór liczb maszynowych jest natomiast zbiorem dyskretnym, skończonym.

Różnice te określają dokładność arytmetyki maszynowej.

1.1. Maszynowe systemy liczbowe

Ograniczona długość słów maszynowych, które tworzą elementy pamięci komputerów, pozwala jedynie na to by każda liczba była reprezentowana przez ustaloną liczbę cyfr i znak. Istnieją dwa sposoby reprezentowania liczb w komputerze.

§a Część ułamkowa liczby zawiera określoną stałą liczbę cyfr. Jest to reprezentacja z ustaloną kropką dziesiętną, przecinkiem dziesiętnym. Charakteryzują ją trzy parametry:

— b - podstawa systemu liczbowego
— t - liczba znaków w całej reprezentacji
— f - liczba cyfr w części ułamkowej.

Zbiór liczb scharakteryzowany tymi trzema parametrami będziemy dalej oznaczać przez $P(b,t,f)$.

Dla przykładu rozpatrzmy zbiór $P(10,4,1)$. Zawiera on 19999 liczb. Kolejne liczby są *równoodległe* od siebie. Dowolna liczba rzeczywista z przedziału (-1000, 1000) może być zapisana w tym systemie obliczeniowym przez $\mathrm{fix}(x) \in P(10,4,1)$ z błędem absolutnym nie większym niż 0.05. Np. $x = 865.54$ reprezentowana jest w $P(10,4,1)$ przez 865.5, a błąd absolutny wynosi 0.04.

Zobaczmy teraz jak zachowuje się *błąd względy* $(x-\mathrm{fix}(x))/ź$, $x \neq 0$. Dla liczby 865.54 błąd względny wynosi $0.04/865.54 \approx 0.00055$ (=0.005%). Z drugiej strony, jeśli $x = 0.86554$ to $\mathrm{fix}(x) = 000.9$ i błąd względny wynosi 4%. Oznacza to, że chociaż liczby zbioru $P(10,4,1)$ tworzą sieć jednorodną na przedziale (-1000,1000)

to *względna gęstość* tej sieci nie jest jednorodna. Jest to mankament wszystkich układów z ustaloną kropką.

§b Większość komputerów korzysta z innego układu liczbowego $F(b, t, L, U)$ reprezentowania liczb zwanego układem z *ruchomą kropką* (floating point). Układ taki charakteryzują cztery parametry:
— b - podstawa układu liczb
— t - liczba cyfr w reprezentacji mantysy liczby (ułamkowej części liczby; dokładność reprezentacji)
— L, U - dolna (L) i górna (U) granica przedziału zmienności liczb.
Dowolna, niezerowa liczba jest postaci

$$x = \pm(d_1/b + d_2/b^2 + \dots d_t/b^t) \times b^e$$

i zapisuje się ją jako

$$x = \pm d_1 d_2 \dots d_t \times b^e,$$

gdzie cyfry mantysy $d_1, d_2, \dots, d_t$ spełniają warunki

$$1 \le d_1 < b, \quad 0 \le d_i < b, \quad 2 \le i \le t,$$

a wykładnik e jest liczbą całkowitą taką, że

$$L \le e \le U.$$

Liczba *zero* jest reprezentowana przez

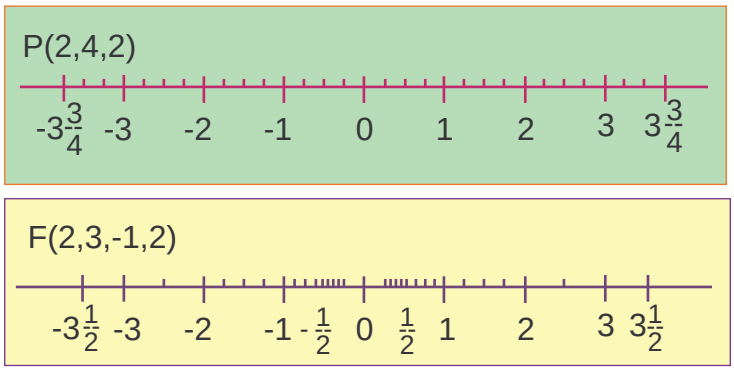
$$0 = +.000 \dots 0 \times b^L.$$

Jeżeli dla dowolnego $x \in F, x \neq 0$, wartość $d_1 = 1$ (tak jak to jest w przypadku właśnie wprowadzonego układu F), to taki układ nazywa się znormalizowanym.

Liczby należące do F tworzą sieć niejednorodną o jednorodnej gęstości względnej.

Dla przykładu rozpatrzmy układ $F(10, 4, -2, 3)$. Liczbie 865.54 odpowiada w F reprezentant postaci $.8655 \times 10^3$, a liczbie 0.86554 reprezentant $.8654 \times 10^0$. W obu wypadkach błędy względne są identyczne i równe 0.005%.

Rysunek przedstawia dwa układy zliczania $P(2, 4, 2)$ i $F(2, 3, -1, 2)$. P zawiera 31 liczb, a F 33 liczby.



Ogólnie, układ F zawiera

$$2(b-1)b^{t-1}(U - L + 1) + 1$$

liczb.

Zadanie 1. Ilość liczb

2

Ile jest liczb w systemie liczbowym F(10,7,-20,20)?

[Spis]

1.2. Parametry arytmetyki maszynowej

W praktyce, do charakteryzowania układu $F(b,t,L,U)$ używa się parametrów σ, λ, ϵ, które można wyrazić przez b, t, L, U.

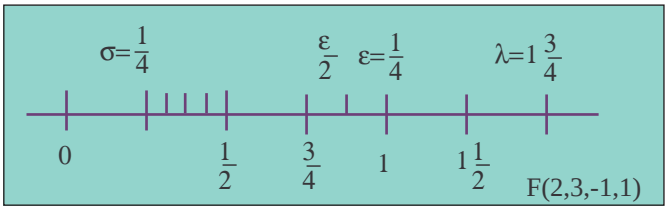
Zilustrujemy to na przykładzie $F(2,3,-1,1)$. Układ ten zawiera zero oraz wszystkie liczby, których dwójkowa postać jest następująca:

$$x = \pm.1d_2d_3 \times 2^e\,,$$

gdzie $-1 \le e \le 1$, a d_2 i d_3 są zerem lub jedynką. Mamy dwie możliwości reprezentowania znaku ($+$ i $-$), trzy możliwości dla e $(-1,0,1)$ oraz cztery możliwości reprezentowania ułamka $(0.100, 0.101, 0.110, 0.111)$. Układ F zawiera więc $2\cdot 4\cdot 3+1 = 25$ liczb maszynowych. W celu uproszczenia rozważań zamienimy ułamki dwójkowe na zwykłe. Mamy w F następujące ułamki: 1/2, 5/8, 3/4 i 7/8. (Np. $(0.101)_2 = 1\times 2^{-1} + 0\times 2^{-2} + 1\times 2^{-3} = 1/2 + 1/8 = 5/8$).

W rozpatrywanym układzie *najmniejszą liczbą* jest $\sigma = 1/2\times 2^{-1} = 1/4$, a największą $\lambda = 7/8\times 2^1 = 7/4$ (patrz rysunek).

Odległość ϵ między liczbą 1 i liczbą następną układu F (>1) nosi nazwę maszynowego epsilon. Jest to jeden z najważniejszych parametrów charakteryzujących dany układ liczbowy. Jest on miarą "dyskretności"układu.



Ważna własność F: *odległość między $x \in F$ i liczbą sąsiednią jest nie mniejsza niż $|x|\epsilon/b$ i nie większa niż $\epsilon|x|$ (jeśli x nie sąsiaduje z zerem).*

Odległość ϵ/b z lewej strony 1 i epsilon z prawej są ważnymi charakterystykami przy pomiarach odległości między kolejnymi liczbami układu F.

Parametry σ, λ i ϵ dane są przez b, t, L i U następująco:

$$\sigma = b^{L-1}\,,$$

$$\lambda = b^U(1-b^{-t})\,,$$

$$\epsilon = b^{1-t}\,.$$

W celu lepszego zrozumienia sensu parametrów σ, λ i ϵ rozpatrzmy układ $F(b=10, t=6, L=-100)$. W tym przypadku $\epsilon = 10^{-5}$, $\sigma = 10^{-101}$. Prócz tego pomiędzy zerem i σ nie ma żadnej liczby, która należy do F. Jednocześnie w przedziale $[\sigma, 10\sigma]$ znajduje się 899999 liczb z układu F.

Na ostatnim rysunku widać, że w pobliżu σ odległości między liczbami układu F są mniejsze od σ. Wynika stąd, że liczb tych nie można otrzymać przez dodawanie ich; można je dostać tylko w wyniku obliczania wyrażeń arytmetycznych.

Inne własności systemu F. Jeśli $L \le e < U$ to pomiędzy liczbami b^{e-1} i b^e znajduje się $(b-1)b^{t-1}+1$ liczb z F i są one rozłożone jednorodnie z krokiem $b^{e-t} = b^{e-1}\epsilon$. Jeżeli $x, y \in F$, $b^{e-1} \le |x| \le b^e$, $b^{e-1} \le |y| \le b^e$, to różnica $x-y$ wyliczana jest w F dokładnie, tzn. $x - y \in F$ (z pożyczaniem). Odległość między dwoma liczbami z F z wykładnikiem e wynosi $b^{e-1}\epsilon$.

Operacje arytmetyczne nad liczbami z F są przestawne (komutują) jeśli ma miejsce poprawne zaokrąglanie, nie są jednak dla nich spełnione prawa łączności i rozdzielczości.

Jeżeli liczbę z F podzielimy (pomnożymy) przez b to odległość od niej do liczby następnej z F zmniejszy się (zwiększy się) dokładnie o czynnik b.

Jeżeli x i $x+l$ są sąsiadami z F i liczbę x pomnożymy przez y/z, gdzie $y \in F$, to pomiędzy y i $y+l$ znajdzie się około $|x/y|$ liczb z F.

Zadanie 2. Granice systemów liczbowych [2]

Podaj najmniejszą dodatnią i największą liczbę w systemie F(10,7,-20,20). [Spis]

Zadanie 3. Najmniejsza liczba znacząca [2]

Oblicz EPS maszynowe dla systemu liczbowego F(10,7,-20,20). [Spis]

1.3. Błędy zaokrągleń

Zastanowimy się teraz nad różnicami w obliczeniach w układzie liczbowym F i w zbiorze liczb rzeczywistych. Sedno tych róznic polega na tym, że wiele operacji wykonanych na liczbach z F daje wyniki, które do F nie należą. Dlatego też aby pozostać w F (zapisać wynik w pamięci komputera) musimy zastąpić prawdziwy wynik liczbą z F, a więc dokonać przybliżenia. To z kolei oznacza, że pojawił się błąd zaokrąglenia.

Mamy tutaj dwa przypadki, w których powstają błędy. Z pierwszym spotykamy się tam gdzie wykładnik e wyniku nie spełnia równości $L \leq e \leq U$. Jeśli $e < L$, to $|x| < \sigma$ mamy tzw. **antynadmiar**, a jeśli $e > U$ to $|x| > \lambda$ - **nadmiar**.

Drugi przypadek pojawia się tam gdzie mantysa (część ułamkowa) posiada więcej cyfr niż t. Dla przykładu w $F(2,3,-1,2)$ mamy

$$.110 \times 2^0 + .111 \times 2^0 = .1101 \times 2^1 \quad (3/4 + 7/8 = 13/8)\,.$$

Wynik dodawania nie należy do F ponieważ do zapamiętania jego mantysy potrzeba czterech cyfr. Podobnie iloczyn

$$.111 \times 2^0 \times .110 \times 2^0 = .10101 \times 2^0 \quad (7/8 \times 3/4 = 21/32)$$

nie należy do F. Rozpatrywana sytuacja w przypadku mnożenia pojawia sią bardzo często.

Chcąc by wynik leżał w F musimy go więc przybliżyć liczbą z F – zaokrąglić wynik. Można to zrobić na wiele sposobów. Załóżmy, że wynik jest postaci

$$.d_1 d_2 \ldots d_t d_{t+1} \ldots d_n \times b^e\,,$$

gdzie $L \leq e \leq U$. Pierwszy sposób zaokrąglania polega na odrzuceniu cyfr $d_{t+1} \ldots d_n$ po cyfrze d_t Drugi sposób zaokrąglania, zwany prawidłowym polega na wzięciu części ułamkowej zbudowanej z t pierwszych cyfr następującej sumy

$$d_1 d_2 \ldots d_t d_{t+1} \ldots + b/2\,.$$

Odpowiada to dodaniu $b/2 \times b^{-(t+1)}$ do liczby $.d_1 d_2 \ldots d_t d_{t+1} \ldots d_n \times b^e$. Dla przykładu, liczbie $.1101 \times 2^1$ w zbiorze $F(2,3,-1,2)$ przypisuje się liczbę $.110 \times 2^1$ w metodzie odrzucania i liczbę $.111 \times 2^1$ w metodzie zaokrąglania prawidłowego. Liczbie $.10101 \times 2^0$ odpowiada w F $.101 \times 2^0$ w obu wypadkach.

Podane sposoby zaokrąglania prowadzą do błędów zaokrąglania. Mówiąc dokładniej, błąd zaokrąglania jest różnicą $fl(x) - x$, gdzie x jest liczbą rzeczywistą z $L \leq e \leq U$, a $fl(x)$ jest jej reprezentacją maszynową. Można wprowadzić wielkość $\delta(x)$ zwaną względnym błędem zaokrąglenia, który pojawia się w liczbie $fl(x)$, $(x \neq 0)$:

$$\delta(x) = (fl(x) - x)/\acute{z}\,,$$

która spełnia nierówność

$$|\delta(x)| \leq EPS = \begin{cases} b^{1-t} = \epsilon, & \text{odrzucanie} \\ b^{1-t}/2 = \epsilon/2, & \text{zaokrąglanie prawidłowe} \end{cases} \qquad (*)$$

Przykład. Pokażemy to. Liczby z przedzialu $\langle b^{e-1}, b^e \rangle$ w systemie z ruchomą kropką są odległe o b^{e-t}. W przypadku odrzucania (obcinania) młodszych cyfr

liczba $fl(x)$ różni się od x nie bardziej niż o b^{e-t}, a w przypadku zaokrąglania prawidłowego nie bardziej niż o $b^{e-t}/2$, tzn.

$$|fl(x) - x| \leq \begin{cases} b^{e-t}, & \text{obcinanie,} \\ b^{e-t}/2, & \text{zaokrąglanie prawidłowe.} \end{cases}$$

Ponieważ $b^{e-1} \leq x$ to

$$|fl(x) - x|/x \leq \begin{cases} \frac{b^{e-t}}{b^{e-1}} = b^{1-t}, & \text{obcinanie} \\ \frac{b^{e-t}/2}{b^{e-1}} = b^{1-t}/2, & \text{zaokrąglanie prawidłowe} \end{cases}$$

Metoda odrzucania jest szybsza od metody zaokrąglania prawidłowego lecz jej dokładność jest dwa razy mniejsza od tej ostatniej. Prócz tego błąd w metodzie odrzucania ma zawsze ten sam znak, przeciwny do znaku zaokrąglanej liczby. Prowadzi to do narastania błedu w przypadku dużych obliczeń. Pomimo tego, że czas wykonania zaokrągleń prawidłowych jest dłuższy w porównaniu z czasem zaokrąglania przez obcinanie, to korzyści z ich stosowania są większe (znoszenie się błędów o przeciwnych znakach).[1]

Zilustrujemy teraz zależność (*) w systemie $F(10, 4, -50, 50)$. Liczbie $x = 12.467$ w F odpowiada przy zaokrąglaniu z odrzucaniem liczba $fl(x) = .1246 \times 10^2$; błąd względny zaokrąglania wynosi

$$\delta(x) = 0.007/12.467 \approx 0.00056 < EPS = 10^{-3} = 0.001.$$

Stosując zaokrąglanie prawidłowe mamy natomiast $<fl(x) = .1247 \times 10^2$ i

$$\delta(x) = 0.003/12.467 \approx 0.00024 < EPS = 10^{-3}/2 = 0.0005.$$

Parametr EPS charakteryzuje względną dokładność układu F, a jego wartość zależy od sposobu zaokrąglania. Można go zdefiniować jako najmniejszą liczbę taką, która dodana do 1 w układzie F daje w wyniku liczbę należącą do F i większą od 1:

$$fl(1 + EPS) > 1.$$

Np. w $F(10, 4, -50, 50)$ z odrzucaniem, $EPS = 10^{-3}$, bo

$$fl(1 + 0.001) = fl(.1001 \times 10^1) = .1001 \times 10^1 > 1$$

i nie można znaleźć liczby mniejszej o tej własności. Jeśli w F stosujemy zaokrąglanie prawidłowe, to $EPS = 0.0005$, bo

$$fl(1 + 0.0005) = fl(.10005 \times 10^1) = .1001 \times 10^1 > 1.$$

Zadanie 4. Błędy obcinania

2

Podaj błąd obcinania w systemie F(10,7,-20,20)

[Spis]

1.4. Śledzenie błędów zaokrągleń

W fizyce prowadzi się często duże obliczenia numeryczne. Potrzebna jest zawsze wysoka dokładność obliczeń. W jaki sposób błędy zaokrągleń propagują się w czasie obliczeń i jaki jest ich wpływ na końcowe wyniki rachunków? Spróbujemy krótko zastanowić się nad tym problemem.

[1] Załóżmy, że wszystkie błędy zaokrągleń są tej samej wielkości, ich znaki są niezależne i pojawiają się jednakowo często. Z centralnego twierdzenia granicznego teorii prawdopodobieństwa wynika, że prawdopodobny błąd sumy n dodatnich składników przy stosowaniu metody odrzucania jest w przybliżeniu $\sqrt{n}$ razy większy niż błąd metody zaokrąglania prawidłowego.

Istnieje wiele sposobów minimalizacji błędów końcowych. Pewne z nich realizuje się sprzętowo (maszyna), a inne programowo (języki). Tutaj będą nas głównie interesować sposóby programowe.

1 Dla przykładu, zastanowimy się jak można uniknąć dużych błędów w przypadku wykonywania operacji prostego wyliczania średniej arytmetycznej $(a+b)/2$ z liczb a, b. Taka operacja wykonywana jest bardzo często, np. w przypadku wyznaczania pierwiastka równania $f(x) = 0$ na odcinku $< a, b >$ metodą połowienia.

Możliwe są dwa sposoby obliczeń!

$$c = \frac{a+b}{2} \tag{3}$$

oraz

$$c = a + \frac{b-a}{2}\,. \tag{4}$$

Załóżymy, że obliczenia przeprowadzane są w systemie dziesiętnym z trzema liczbami znaczącymi, z zaokrąglaniem, i $a = 0.596$, $b = 0.600$. Według formuły (3) mamy

$$c = (0.596 + 0.600)/2 = 1.20/2 = 0.600.$$

Wartość dokładna jest równa 0.598. Według formuły (4)

$$c = 0.596 + (0.600 - 0.596)/2 = 1.196/2 \approx 1.20/2 = 0.596 + 0.004/2 = 0.598.$$

Zauważymy, że w tym przykładzie, dla którego wzór (4) daje lepszy wynik, obie liczby są jednakowego znaku.

2 Rozpatrzymy przykład obliczeń w systemie dziesiętnym z czterema liczbami znaczącymi, w którym zamiast zaokrąglania stosuje się odrzucanie. Niech $a = -3.483$, $b = 8.765$. Według (3)

$$c = (-3.483 + 8.765)/2 = 5.282/2 = 2.641\,.$$

Jest to również wynik dokładny. Według wzoru (4)

$$c = -3.483 + (8.765 + 3.483)/2 = -3.483 + 12.24/2 = -3.483 + 6.120 = 2.637\,.$$

Jeśli nawet dokonalibyśmy zaokrąglania to wynik nadal różniłby się od dokładnego gdyż mielibyśmy $c = 2.642$. A więc, w wypadku gdy liczby a i b różnią się znakami, wzór (3) jest lepszy od wzoru (4). Można wyciągnąć wniosek, że *najlepsza formuła liczenia średniej polega na tym, by w przypadku gdy* $(\mathrm{sign}(a) \neq \mathrm{sign}(b))$ *wziąć* $c = (a+b)/2$, *a w innym przypadku* $c = a + (b-a)/2$.

Teraz już nikt nie powie, że zna dobrze algorytmy numeryczne. Przykład ten pokazuje jakie środki ostrożności należy stosować w przypadku nawet najprostszych operacji i w jaki sposób wybór formuły (algorytmu) może poprawić dokładność programu.

1.5. Przykłady *dobrych* i *złych* algorytmów

Ostatnie przykłady pokazały, że wielkość błędów zależy od sposobu obliczeń, a więc od przyjętego algorytmu. Podamy jescze inne przykłady algorytmów, które chociaż prawidłowe z formalnego punktu widzenia, mogą spowodować błędy rachunkowe powodowane specyfiką arytmetyki komputera.

1.5.1. Rozwiązywanie równań kwadratowych

Rozpatrzmy równanie

$$ax^2 + bx + c = 0\,.$$

Pierwiastki tego równania są dane przez formuły

$$x_1 = (-b + \sqrt{b^2 - 4ac})/2a\,, \qquad x_2 = (-b - \sqrt{b^2 - 4ac})/2a\,.$$

Założymy, że rachunki przeprowadzane są w systemie $F(10, 4, -50, 50)$ z jedną cyfrą zapasową i odrzucaniem młodszych bitów. Niech $a = 1$, $b = -320$, $c = 16$. Dla wygody, liczby z F będziemy zapisywać w *fortranowskiej* notacji z E, tzn. $\pm.d_1d_2d_3d_4Ee$, gdzie d_i - cyfra liczby z F, a e - cecha. Np. $-320 = -.3200\times10^3 \in F$ w formacie E ma postać $-.3200E3$. Obliczenia przeprowadzone wg. wzorów dają dla x_1:

$$\begin{aligned} x_1 &= (.3200E3 + \sqrt{.1024E6 - .6400E2}/.2000E1 \\ &= (.3200E3 + .3198E3)/.2000E1 \\ &= .6398E3/.2000E1 = .3199E3 = 319.9\,, \end{aligned}$$

a dla x_2 mamy

$$x_2 = (.3200E3 - .3198E3)/.2000E1 = .20000/.2000E1 = .1000E0 = 0.1\,.$$

Zostały podkreślone pierwsze niepewne na skutek zaokrągleń cyfry.

Dokładne wartości pierwiastków są równe

$$x_1 = 319.950, \quad x_2 = 0.0500078\,.$$

Stąd, bezpośrednie obliczenia wg. wzorów dla x_1 dały dobry wynik, a dla x_2 zły gdyż względny błąd obliczeń x_2 wynosi 100%.

Łatwo zrozumieć dlaczego tak się stało. W liczniku ułamka dla x_2 obliczana jest różnica dwóch dużych liczb 320 i 319.8. Z tego powodu ich starsze cyfry wzajemnie się znoszą, a wynik odejmowania określają ich młodsze cyfry. Ponieważ ostatnia cyfra liczby 319.8 zawiera błędy zaokrąglania, więc wynik operacji odejmowania jest bezwartościowy ponieważ jego pierwsza cyfra znacząca jest obarczona błędem. Taka sytuacja nosi nazwę *katastrofalnej utraty dokładności*. Powstaje ona zawsze tam gdzie odejmowane są bliskie sobie liczby. Prowadzi to do wzrostu poziomu błędów obliczeń.

Można uciec od katastrofy utraty dokładności stosując inny algorytm obliczeń. W rozpatrywanym przypadku należy zastosować następujące wzory rachunkowe

$$x_1 = (-b - \mathrm{sign}(b)\sqrt{b^2 - 4ac})/(2a)\,, \quad x_2 = c/(ax_1)\,,$$

gdzie $\mathrm{sign}(b)$ oznacza znak liczby b. Dla wybranych poprzednio wartości a, b, c mamy

$$x_2 = \frac{.1600E2}{.3199} = .5002E - 1 = 0.05002\,.$$

Rozsądny wybór algorytmu ustrzegł nas przed niepotrzebnymi błędami. Należy o tym pamiętać.

1.5.2. Obliczanie funkcji eksponencjalnej

Załóżmy, że chcemy zbudować algorytm obliczania funkcji eksponencjalnej e^x słuszny dla dowolnych x. Ponieważ w rachunkach funkcja ta będzie pojawiać się bardzo często chcemy by jej wartość była maksymalnie dokładna. Założymy, że w tym celu postanowiliśmy wykorzystać rozkład e^x w szereg

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3!} + \dots\,,$$

który jest zbieżny dla dowolnych rzeczywistych i zespolonych x. W obliczeniach numerycznych musimy ograniczyć ilość składowych szeregu do skończonej ich liczby. Liczba ta zależy od x i od żądanej dokładności.

Załóżmy że należy wyliczyć wartość $e^{-5.5}$ w systemie arytmetycznym $F(10, 5, -50, 50)$. Mamy

$$
\begin{array}{c}
e^{-5.5} = 1.0000 \\
-5.5000 \\
+15.125 \\
-27.730 \\
+38.129 \\
-41.942 \\
+38.446 \\
-30.208 \\
+20.768 \\
-12.692 \\
+6.9803 \\
-\ 3.4902 \\
+\ 1.5997 \\
\cdots \\
\hline
+0.0026363.
\end{array}
$$

Szereg został ucięty do 25 składowych ponieważ dalsze składowe nie mają już wpływu na wartość jego sumy w arytmetyce F. Otrzymaliśmy więc maksymalnie dokładny wynik w F. Wynik dokładny jest jednakże równy 0.0408677! Znów mamy do czynienia z katastrofalną utratą dokładności.

Wynika to z analizy wartości składowych szeregu. Młodsza cyfra znacząca każdej składowej większej co do modułu od 10 wpływa na starszą cyfrę wyniku. Ponieważ składowe szeregu są wyliczone w przybliżeniu to fakt ten wyjaśnia błąd wyniku końcowego. Aby uniknąć powstałej sytuacji wystarczy obliczyć dyskutowaną metodą $e^{5.5}$, a następnie odwrócić otrzymany wynik:

$$e^{-5.5} = \frac{1}{e^{5.5}} = 1/(1 + 5.5 + 15.125 + \ldots) = 0.0040865\,.$$

Pokazany przykład posiada czysto ilustracyjny charakter. Zbieżność zastosowanego szeregu jest bardzo słaba, a to prowadzi do dużej liczby składowych o ile chcemy zapewnić żądaną dokładność obliczeń. W praktyce do obliczeń e^x stosowane są bardziej efektywne algorytmy.

Rozpatrzone przykłady pokazują w jakim stopniu metoda numeryczna może zależeć od małych zmian parametrów, a więc danych początkowych. Przykładowo, niech w problemie równania kwadratowego parametr $b = -320.0$ zostanie zamieniony na -320.1. Dla x_2 obliczanego według wzoru wyjściowego otrzymamy 0.05. Stąd, zmiana o 0.03% tylko jednego współczynnika prowadzi do zmiany wyniku o 200%. (Zauważmy, że dokładna zmiana pierwiastka spowodowana zamianą b jest równa 0.03%. Dokładny pierwiastek jest równy 0.0499922.) Stosowany wzór jest wrażliwy na parametry z przedziału $b < 0$ i $b^2 \gg 4ac$; w innych przypadkach pracuje on całkiem dobrze. *Problem numeryczny może więc w pewnych przypadkach zależeć silnie od wartości początkowych, a w innych nie. Ponieważ błędy zaokrągleń można traktować jako niewielkie zmiany danych początkowych więc stosowanie algorytmu, który jest wrażliwy na tego typu zmiany może okazać się niebezpieczne. Należy w takich przypadkach poszukiwać metod alternatywnych.*

1.5.3. Obliczanie pierwiastków wielomianów

Poprzednie przykłady pokazują, że metoda numeryczna (algorytm) może silnie reagować na małe zmiany danych początkowych. Pokażemy teraz, że istnieją problemy, które same w sobie są czułe na tego typu zaburzenia. Klasycznym przykładem są obliczenia pierwiastków wielomianu

$$p(x) = (x-1)(x-2)\dots(x-20) = x^{20} - 210x^{19} + \dots$$

Wielomian ten posiada dobrze odseparowane pierwiastki 1, 2, 3, ..., 20. Załóżmy, że współczynnik przy x^{20} został zaburzony i jest równy $-(210 + 2^{-23})$. Nowy wielomian nieznacznie różni się od wyjściowego wielomianu $p(x)$ lecz jego pierwiastki różnią się bardzo. Zapiszemy ich wartości z dokładnością do pięciu cyfr po przecinku:

$$\begin{aligned}
&1.00000\,, && 10.09527 \pm 0.64350i\,,\\
&2.00000\,, && 11.79363 \pm 1.65232i\,,\\
&3.00000\,, && 13.99236 \pm 2.51883i\,,\\
&4.00000\,, && 16.73074 \pm 2.81262i\,,\\
&5.00000\,, && 19.50244 \pm 1.94033i\,,\\
&6.00001\,, && 20.84691\,.\\
&6.99970\,,\\
&8.00727\,,\\
&8.91725\,,
\end{aligned}$$

Widać wyraźnie, że niewielkie zaburzenie wielomianu $p(x)$ doprowadziło do znacznych zmian pierwiastków, a niektóre z nich stały się nawet zespolone Nie miało to miejsca w przypadku dyskutowanego wcześniej równania kwadratowego. Tam, wystarczyła zmiana algorytmu. Tutaj, w przypadku wielomianu $p(x)$ problem jest sam z siebie czuły na zmiany parametrów. Niezależnie od metody obliczeń, wprowadzenie błędów zaokrąglania, a więc zaburzenie, zawsze doprowadzą do znacznych zmian w pierwiastkach.

1.5.4. Układ równań liniowych

Przykładem problemu, który jest mało stabilny jest układ równań

$$\begin{aligned}
11x + 10y + 4z &= 1,\\
12x + 11y - 13z &= 1,\\
14x + 13y - 66z &= 1.
\end{aligned}$$

Dokładnym rozwiązaniem jest $x = 1$, $y = -1$, $z = 0$. Załóżmy, że zaburzymy prawą stronę układu zastępując $(1, 1, 1)$ przez $(1.001, 0.999, 1.001)$. Rozwiązanie wzięte z trzema cyframi znaczącymi jest w tym przypadku dane przez: $x = -0.683$, $y = 0.843$, $z = 0.006$. Widzimy, że zaburzenie prawej strony o 0.1% doprowadziło do wyniku różnego od poprzedniego o 175% licząc w stosunku do maksymalnie zmienionego pierwiastka.

1.6. Inne przykłady

Rozpatrzmy jeszcze parę przykładów, które demonstrują w jaki sposób propagują się błędy zaokrągleń.

1.6.1. Przykład algorytmu niestabilnego

Załóżmy, że chcemy obliczyć całkę

$$E_n = \int_0^1 x^n e^{x-1}\,dx, \quad n = 1, 2, \ldots .$$

Zachodzi następujący związek rekurencyjny

$$E_n = x^n e^{x-1}|_0^1 - \int_0^1 x^{n-1} e^{x-1} = 1 - nE_{n-1}, \quad n = 2, 3, \ldots \quad E_1 = 1/e\,.$$

Jeśli wykonamy obliczenia według pokazanego schematu w układzie $F(10, 6, -50, 50)$ otrzymamy

$$\begin{aligned}
E_1 &\approx 0.367879\,, \quad E_6 \approx 0.127120\,,\\
E_2 &\approx 0.264242\,, \quad E_7 \approx 0.110160\,,\\
E_3 &\approx 0.207274\,, \quad E_8 \approx 0.118720\,,\\
E_4 &\approx 0.170904\,, \quad E_9 \approx -0.0684800\,.\\
E_5 &\approx 0.145480\,,
\end{aligned}$$

Jedyny błąd zaokrąglania pojawił się w przybliżeniu $E_1 \approx 1/e$ i doprowadził do tego, że E_9 jest ujemna chociaż wiadomo, że w przedziale $(0, 1)$ funkcja $x^9 e^{x-1}$ jest dodatnio określona i $E_9 \approx 0.0916123$. Inne błędy w procesie rekurencyjnych obliczeń E_9 nie zostały wprowadzone.

Przyczyną tak szybkiego wzrostu błędu jest fakt, że początkowy błąd równy 4.412×10^{-7} przy obliczaniu E_n jest mnożony przez $n!$. W szczególności, przy $n = 9$ błąd w E_9 jest równy $4.412 \times 10^{-7} \times 9! \approx 0.1601$ i jest prawie równy rzeczywistej wartości E_9. W ten sposób wybrany algorytm okazał się niestabilnym ponieważ w każdym kroku błędy stają się coraz większe.

Jeśli zapiszemy nasz algorytm w postaci

$$E_{n-1} = \frac{1 - E_n}{n}\,, \quad n = \ldots, 3, 2\,,$$

to łatwo zauważyć, że w n-tym kroku błąd nie powiększa się, lecz zmniejsza się n razy, tzn. dany algorytm jest stabilny. Widomym jego mankamentem jest to, że nie znamy początkowego przybliżenia. Niezależnie jednak od tego z jakim błędem wybierzemy początkową wartość dla $n \gg 1$ błędy będą bardzo szybko maleć w każdym kroku obliczeń. Możliwe do przyjęcia przybliżenie początkowe może być oszacowane następująco

$$E_n = \int_0^1 x^n e^{x-1}\,dx \le \int_0^1 x^n\,dx = \frac{x^{n+1}}{n+1}|_0^1 = \frac{1}{n+1}\,.$$

Jeśli weźmiemy np. $E_{20} \approx \frac{1}{21}$ to błąd przy E_{19} będzie już pomnożony przez $1/20$ i będzie wynosił 0.0024. Kiedy dojdziemy do E_{15} błąd będzie mniejszy od 4×10^{-8} (a więc mniejszy od rzeczywistego błędu zaokrąglenia) i będzie malał z powodu stabilności metody. Poczynając od E_{15} wartości E_n są dokładne do szóstego miejsca co odpowiada możliwości zaokrągleń na ostatnim miejscu.

1.6.2. Czy zawsze $10 \times 0.1 = 1$?

Rozpatrywany przykład jest cenny z tego względu, że liczba 0.1 często brana jest jako wielkość kroku przy całkowaniu równań różniczkowych oraz jako parametr w innych algorytmach numerycznych. Jeśli maszyna korzysta z układu dziesiętnego, tzn. $b = 10$ wówczas równość $10 \times 0.1 = 1$ jest bezwarunkowo spełniona. Jeżeli $b = 2$ to tak nie jest ponieważ 0.1 nie posiada skończonego rozwinięcia w potęgi 2^{-1}. Rzeczywiście, w układzie dwójkowym 0.1 jest równe

$$(0.1)_{10} = (0.0001100110011\ldots)_2\,.$$

W niektórych komputerach reprezentacja 0.1 ma w Fortranie postać

$$(0.1)_{10} = 2^{-3} \times 0.\underbrace{1100110011\ldots001100}_{40-\text{miejsc}}|11\ldots .$$

Widać stąd, że kompilator wziął 0.1 z niedomiarem gdyż miejsce 41-e zawiera 1. Jeśli pomnożymy tę wielkość przez 10 (na komputerze) i odejmiemy od wyniku jedynkę to otrzymamy $2^{-40} \neq 0$. Jeśli przedstawimy 0.1 jako $1/10$ to po wykonaniu dzielenia w komputerze otrzymamy inną reprezentację liczby 0.1:

$$(0.1)_{10} = 2^{-3} \times 0.\underbrace{110011001100\ldots001101}_{40} .$$

W tym przypadku $10 \times 0.1 = 1$.

Zobaczmy teraz, czy spełniona jest równość

$$\sum_{1}^{10} 0.1 = 0.1 + 0.1 + \ldots + 0.1 = 1 .$$

Ponieważ rozwinięcie dwójkowe 0.1 jest nieskończone to odpowiedź jest negatywna. W przypadku rozpatrywanej reprezentacji różnica między 1 i sumą $\sum_1^{10} 0.1$ wynosi $2^{-39} - 2^{40}$.

1.7. Propagacja błędów danych początkowych w algorytmach rozwiązań zwyczajnych równań różniczkowych

Rozważmy prosty przykład numerycznego rozwiązywania problemu Cauchy'ego zwykłego równania różniczkowego

$$y' = \lambda y , \quad y(0) = y_0 . \tag{1}$$

Rozwiązaniem jest funkcja

$$y(x) = y_0 e^{\lambda x} .$$

Przeanalizujemy algorytm Eulera z ustalonym krokiem h. Przybliżone rozwiązanie (1) u_{n+1} w punkcie x_{n+1} jest dane przez[2]

$$\begin{aligned} u_{n+1} &= u_n + hf(x_n, u_n) && (2)\\ &= (1 + h\lambda)u_n && (3)\\ &= (1 + h\lambda)^2 u_{n-1} && (4)\\ &= \ldots && (5)\\ &= (1 + h\lambda)^{n+1} u_0 . && (6) \end{aligned}$$

Wielkość u_0 jest przybliżeniem wartości początkowej y_0. Różnica między u_0 i y_0 może pochodzić z niedokładności w danych początkowych lub z błędów zaokrągleń maszynowych. Mogą też wystąpić obie te przyczyny jednocześnie. Wielkość u_0 zawiera więc błąd $e_0 = y_0 - u_0$. Zauważmy także, że w metodzie Eulera używamy przyliżenia $1 + h\lambda$ funkcji $e^{\lambda x}$.

Zapiszemy teraz wyrażenie określające globalny błąd E_{n+1} w $(n+1)$-szym kroku całkowania. Ponieważ

$$u_{n+1} = (1 + h\lambda)^{n+1} u_0 = (1 + h\lambda)^{n+1}(y_0 - e_0) ,$$

to błąd E_{n+1} jest równy

$$\begin{aligned} E_{n+1} &= y_{n+1} - u_{n+1} && (7)\\ &= y_0 e^{(n+1)h\lambda} - (1 + h\lambda)^{n+1}(y_0 - e_0) && (8)\\ &= [e^{(n+1)h\lambda} - (1 + h\lambda)^{n+1}]y_0 + (1 + h\lambda)^{n+1} e_0 . && (9) \end{aligned}$$

[2] Ogólnie $y' = f(x, y)$ i rozwiązania poszukujemy zapisując pochodną y' w postaci $y' = (y_{n+1} - y_n)/h$, gdzie $y_n = y(x_n)$, i $x_{n+1} = x_n + h$, co wynika z definicji pochodnej, a więc jest słuszne dla $h \to 0$.

Globalny błąd posiada dwie składowe. Pierwsza pochodzi z przybliżenia funkcji $e^{h\lambda}$ przez $(1 + h\lambda)$, druga opisuje propagację błędu e_0 z warunku początkowego. Jeśli $|1+h\lambda| > 1$, to składowa druga rośnie ze wzrostem n i w ostateczności staje się dominującą częścią globalnego błędu E_{n+1}. Jeżeli chcemy ograniczyć propagację błędu dla przypadku $\lambda < 0$ musimy zadbać o to by spełniony był warunek

$$|1 + h\lambda| < 1 \quad \text{lub} \quad h < 2/|\lambda| .$$

Otrzymany warunek na ograniczenie kroku całkowania h nosi nazwę *warunku stabilności*. W przypadku jego niespełnienia przybliżone rozwiązanie problemu będzie niestabilne. Tak więc maksymalna wartość kroku całkowania h_{max} zależy zarówno od parametrów problemu (w naszym przypadku od parametru λ) jak również od zastosowanego algorytmu obliczeń. Warunek stabilności $h < 2/|\lambda|$ został otrzymany z konkretnej aproksymacji $1 + h\lambda$ funkcji $e^{h\lambda}$.

W jednym z algorytmów rozwiązywania równań różniczkowych, tzw. metodzie Runge-Kutta 4-go rzędu, funkcję $e^{h\lambda}$ aproksymuje się wyrażeniem

$$e^{h\lambda} = 1 + h\lambda + \frac{(h\lambda)^2}{2!} + \frac{(h\lambda)^3}{3!} + \frac{(h\lambda)^4}{4!} .$$

To nakłada inne ograniczenia na h. W tym przypadku dokładne wyznaczenie warunku stabilności w jawnej postaci jest trudne do wyliczenia, można jednak powiedzieć, że stabilność ma miejsce dla takich h, dla których wartości przedstawionego wielomianu są absolutnie mniejsze od 1.

Jeżeli $\lambda > 1$ to nierówność $1 + h\lambda > 1$ jest spełniona dla dowolnego $h > 0$, a to oznacza, że w każdym kroku procesu całkowania obserwuje się wzrost błędów lokalnych. W tym wypadku niestabilność nie jest oczywista ponieważ dominującą składową błędu globalnego E_{n+1} staje się w tym wypadku pierwsza składowa. Niezależnie od tego jak mały krok h wybierzemy, różnica $e^{(n+1)h\lambda} - (1+h\lambda)^{n+1}$ będzie przy dostatecznie dużych n większa od $(1+h\lambda)^{n+1}$. Tego typu problem nosi nazwę *źle uwarunkowanego*.

Jeśli w analogiczny sposób przeprowadzimy analizę ogólnego przypadku $y' = f(x, y)$, to można dojść do następujących ogólnych wniosków:

a) jeśli $\partial f/\partial y < 0$, to wpływ błędów lokalnych zmniejsza się dla h spełniających warunek stabilności
b) jeśli $\partial f/\partial y > 0$, to wpływ< błędów lokalnych rośnie niezależnie od tego jak małe jest h.

W wielu problemach znak $\partial f/\partial y$ zmienia się w przedziale całkowania, tzn. błędy lokalne są raz mniejsze, a raz większe. W tym wypadku dobrze jest wykonać całkowanie tak by wiedzieć jaki jest znak $\partial f/\partial y$ i w ten sposób kontrolować sytuację. W prostym przypadku $y' = \lambda y$, $\lambda > 0$ lepiej jest całkować w kierunku mniejszych x, tzn, z ujemnym krokiem h. Oczywiście, każde równanie różniczkowe wymaga oddzielnego podejścia.

Zadanie 5. Liczby dwójkowe

1

Zapisz w systemie binarnym liczby 2013, 777, 100, 0.1 [Spis]

Zadanie 6. Różne systemy liczbowe

1

Zapisz liczby z zadania poprzedniego w systemie ósemkowym i szesnastkowym [Spis]

Zadanie 7. Systemy

2

Napisać (FORTRAN) program przeliczania liczb z jednego systemu liczbowego (inpsys) do innego (outsys) [Spis]

Zadanie 8. Systemy liczbowe

3

Napisz program w PASCALu, który wszystkie działania (+,-,*,/) będzie wykonywał w arytmetyce F(b,t,L,U), gdzie danymi będą b, t, L i U. [Odp.][Spis]

Spis zadań