MATEMATIKA 3

NUMERICKÉ METODY

Dana Černá

http://kmd.fp.tul.cz

Katedra matematiky a didaktiky matematiky

Technická univerzita v Liberci

INFORMACE O PŘEDMĚTU

Konzultační hodiny: ÚT 11:00 - 12:00, budova G, 4.patro

Doporučená literatura:

- Studijní materiály: http://kmd.fp.tul.cz (Černá, Hozman)
- E. Vitásek: Numerické metody
- J. Segethová: Základy numerické matematiky
- M. Feistauer: Základy numerické matematiky
- V. Mošová: Numerické metody
- J. Felcman: Numerická matematika
- další literatura viz STAG
- (Ch. Ueberhuber: Numerical Computation I, II)

MATEMATIKA 3

Zkouška:

- Písemná - teoretické otázky (8b) a výpočetní příklady (16b)
- Ústní - obhajoba písemné práce + teorie

Zápočet:

- Aktivní účast na cvičení, test

NUMERICKÉ METODY

Klasifikovaný zápočet:

- Písemná část - teoretické otázky a výpočetní příklady
- Ústní část - obhajoba písemné práce + teorie

OSNOVA PŘEDMĚTU

- Numerická úloha, stabilita, druhy chyb, rychlost výpočtu
- Řešení soustav lineárních algebraických rovnic
- Řešení nelineárních rovnic
- Interpolace
- Numerický výpočet integrálu
- Numerické řešení diferenciálních rovnic

OSNOVA PŘEDNÁŠKY

- Numerická úloha
- Druhy chyb, chyba metody, řád chyby metody
- Složitost algoritmu
- Paralelizace numerických úloh

NUMERICKÉ ŘEŠENÍ:

Realita $\to$ Model $\to$ Matematická úloha $\to$ Diskrétní úloha $\to$ Numerické řešení

Diskrétní úloha je úloha, ve které jsou vstupní parametry a výsledné řešení data konečné velikosti.

Spojitá úloha je úloha, ve které jsou vstupními hodnotami nebo výsledným řešením spojité funkce.

Diskretizace je proces při němž spojitý problém nahradíme vhodným diskrétním problémem, například integrál nahradíme konečným součtem, diferenciální rovnici převedeme na soustavu lineárních algebraických rovnic.

PŘÍKLAD. DISKRETIZACE REÁLNÉ FUNKCE

Uvažujme reálnou funkci f definovanou na intervalu $[a, b]$. Zvolme $n \in \mathbb{N}$. Potom $h = \frac{b-a}{n}$ se nazývá krok. Funkce f je často reprezentována vektorem

$$\mathbf{f} = \left[f\left(x_0\right), \ldots, f\left(x_n\right)\right],$$

kde $x_k = a + kh$, $k = 0, \ldots, n$.

DRUHY CHYB

- Chyba modelu je odchylkou modelu od originálu a někdy ji nelze ani odhadnout.
- Chyba dat je odchylka naměřených dat od skutečných hodnot a jejich vliv lze odhadnout pomocí analýzy čísla podmíněnosti dané úlohy.
- Chyba metody je odchylka přibližného řešení od přesného řešení matematického problému. Rozlišujeme:
  - Chybu aproximace, což je odchylka přibližného řešení od přesného řešení diskrétního problému,
  - Diskretizační chybu, která je důsledkem nahrazení spojitého problému diskrétním.
- Zaokrouhlovací chyba je chyba, která vzniká v důsledku reprezentace reálných čísel v počítači, tedy v důsledku aproximace reálného čísla přibližnou hodnotou. Zaokrouhlovací chyby jsou často obtížně kvantifikovatelné.

ČÍSELNÉ SYSTÉMY S PLOVOUCÍ ŘÁDOVOU ČÁRKOU

(floating point numbers)

Proměnné s plovoucí řádovou čárkou jsou vyjádřeny pomocí znaménka, základu (mantisy) a exponentu.

Podle normy IEEE 754 typ double vyžaduje 64 bitů: 0-51 mantisa $(m_{52}, \ldots, m_1)$, 52-62 exponent $(e_0, \ldots, e_{10})$, 63 znaménko z.

Číselný systém se skládá z čísel
$x = (-1)^z 2^{e-1023} (1+m)$
kde
$e = 2^{10} e_{10} + \ldots + 2e_1 + e_0,$
$m = m_1 2^{-1} + \ldots + m_{52} 2^{-52}.$

Záporná čísla typu double nabývají hodnot od $-1.7977e+308$ do $-2.2251e-308$ a kladná čísla typu double nabývají hodnot od $2.2251e-308$ do $1.7977e+308$.

Přesnost určuje strojové epsilon, tj. nejmenší kladné číslo daného datového typu, které po přičtení k jedničce dává výsledek různý od jedné. Pro typ double je to $2^{-52} \approx 2.2204\ 10^{-16}$.

OMEZENÍ NUMERICKÝCH VÝPOČTŮ

- Reálná čísla jsou reprezentována konečnou množinu racionálních čísel.
- Ostatní čísla musí být aproximována těmito čísly.
- Výsledky aritmetických operací musí být aproximovány.
- Funkční hodnoty elementárních funkcí musí být aproximovány.
- Neexistují libovolně velká ani libovolně malá čísla.
- Výpočty mohou obsahovat jen konečný počet kroků.
- Některé výpočty mohou být příliš náročné na čas a velikost paměti.

MĚŘENÍ CHYBY METODY

Budeme rozlišovat absolutní a relativní chybu:

absolutní chyba $:=$ přibližná hodnota $-$ přesná hodnota,

relativní chyba $:= \dfrac{\text{přibližná hodnota} - \text{přesná hodnota}}{\|\text{přesná hodnota}\|}$.

Velikost chyby charakterizuje její norma $\|.\|$ (např. absolutní hodnota, norma vektoru, maticová norma, norma funkce).

Je-li možné normu chyby metody libovolně zmenšit, potom mluvíme o konvergentní metodě.

ŘÁD CHYBY METODY

Předpokládejme, že h je parametr charakterizující algoritmus, např. krok metody. Řekneme, že chyba metody (algoritmu) $e(h)$ je řádu $f(h)$, jestliže existují konstanty a, b tak, že

$$\|e(h)\| \leq b\, f(h) \qquad \forall h \leq a,$$

a značíme $e(h) = \mathcal{O}(f(h))$.

konvergence	řád chyby
lineární	$\mathcal{O}(h)$
kvadratická	$\mathcal{O}(h^2)$
kubická	$\mathcal{O}(h^3)$

PODMÍNĚNOST ÚLOHY

Řekneme, že matematická úloha je dobře podmíněná, jestliže relativně malá změna ve vstupních datech způsobí relativně malou změnu v řešení.

Řekneme, že matematická úloha je špatně podmíněná, jestliže relativně malá změna ve vstupních datech způsobí relativně velkou změnu v řešení.

U špatně podmíněných úloh ani významné zvýšení přesnosti dat a algoritmu nemusí vést k přesnějšímu výsledku.

Číslo podmíněnosti úlohy je definováno jako podíl relativní chyby řešení a relativní chyby ve vstupních datech.

PŘÍKLAD: Řešením soustavy lineárních rovnic

$$\begin{pmatrix} 4 & 6 & 4 & 1 \\ 10 & 20 & 15 & 4 \\ 20 & 45 & 36 & 10 \\ 35 & 84 & 70 & 20 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 602 \\ 2012 \\ 4581 \\ 8638 \end{pmatrix} \quad \text{je} \quad x = \begin{pmatrix} 22 \\ 57 \\ 36 \\ 28 \end{pmatrix}.$$

Řešením soustavy lineárních rovnic

$$\begin{pmatrix} 4 & 6 & 4 & 1 \\ 10 & 20 & 15 & 4 \\ 20 & 45 & 36 & 10 \\ 35 & 84 & 70 & 20 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 601,69 \\ 2012,72 \\ 4580,41 \\ 8638,17 \end{pmatrix} \quad \text{je} \quad x = \begin{pmatrix} 13,91 \\ 84,03 \\ -25,54 \\ 144,03 \end{pmatrix}.$$

Přitom relativní chyba pravé strany je $\frac{||\Delta b||_2}{||b||_2} \approx 0,0001$, kde b je vektor pravé strany, relativní chyba v řešení je $\frac{||\Delta x||_2}{||x||_2} \approx 1,76$,. Podmíněnost úlohy je tedy 17600.

NUMERICKÁ STABILITA

Řekneme, že metoda (algoritmus) je numericky stabilní, jestliže v průběhu výpočtu nedochází k významné kumulaci chyb.

Jestliže v průběhu výpočtu dochází k významné kumulaci chyb, která má za následek znehodnocení řešení, řekneme, že daná metoda (algoritmus) je numericky nestabilní. Přitom se může jednat o kumulaci zaokrouhlovacích chyb, chyb způsobených nepřesnostmi ve vstupních datech nebo chyb metody.

Cílem je pro daný problém určit metodu, která je stabilní, umožňuje nalézt přibližné řešení s požadovanou přesností a je co nejméně výpočetně náročná. Často bereme v úvahu také paměťové nároky.

RYCHLOST VÝPOČTU

Rychlost výpočtu ovlivňuje zejména

- volba metody (algoritmu) a její implementace
- hardware
- (sekvenční $\times$ paralelní zpracování)

SLOŽITOST ALGORITMU

Předpokládejme, že N je parametr charakterizující velikost dat, např. délka vektoru, počet uzlů. Složitost algoritmu $C\,(N)$ je veličina charakterizující výpočtovou náročnost algoritmu, nejčastěji počet operací s plovoucí řádovou čárkou $(+, -, *, :, \sin, \cos, \ldots)$.

Řekneme, že složitost algoritmu $C\,(N)$ je řádu $f\,(N)$, jestliže existují konstanty a, C tak, že

$$C(N) \leq C\, f(N) \qquad \forall N \geq a,$$

a značíme $C\,(N) = \mathcal{O}\,(f\,(N))$.

TŘÍDY SLOŽITOSTI

konstantní	$\mathcal{O}(1)$
logaritmická	$\mathcal{O}(\ln N)$
lineární	$\mathcal{O}(N)$
	$\mathcal{O}(N \ln N)$
kvadratická	$\mathcal{O}(N^2)$
kubická	$\mathcal{O}(N^3)$
polynomiální	$\mathcal{O}(N^m),\ m \in \mathbb{N}$
exponenciální	$\mathcal{O}(c^N),\ c \in \mathbb{R}^+$
faktoriálová	$\mathcal{O}(N!)$

Algoritmy, které mají složitost $\mathcal{O}(N \ln N)$ nebo menší, jsou považovány za rychlé algoritmy.

N	10	20	30	40	50
N	0.00001 s	0.00002 s	0.00003 s	0.00004 s	0.00005 s
N^2	0.0001 s	0.0004 s	0.0009 s	0.0016 s	0.0025 s
N^3	0.001 s	0.008 s	0.027 s	0.064 s	0.125 s
2^N	0.001 s	1.0 s	17.19 min	12.7 dne	35.7 let
3^N	0.059 s	58 min	6.5 roku	3855 stol.	200 mil. stol.

Tabulka : Srovnání časů pro různé velikosti dat a časové složitosti.

OPERACE S PLOVOUCÍ ŘÁDOVOU ČÁRKOU

Některé operace s plovoucí řádovou čárkou jsou náročnější než jiné, proto se někdy počítají s váhou, která charakterizuje jejich náročnost ve srovnání se sčítáním.

operace	váha
$+, -, *$	1 flop
$: , \sqrt{}$	10 – 30 flop
sin, cos, exp	50 flop

PARALELIZACE NUMERICKÝCH VÝPOČTŮ

- Funkční paralelismus - MPMD model (Multiple Program, Multiple Data) - výpočetní jednotky (jádra a procesory) zpracovávají různé programy.
- Datový paralelismus - SPMD model (Single Program, Multiple Data) - na všech výpočetních jednotkách běží stejný program s různými daty. Je typický pro numerické výpočty.

Ukazatelem doby výpočtu je Amdahlův zákon:

$$d = 1 - P + \frac{P}{n},$$

kde P určuje poměrnou část programu, kterou lze paralelizovat, n je počet použitých výpočetních jednotek a d vyjadřuje poměrné porovnání výpočtového času oproti času na jednoprocesorovém počítači.