

Numerička matematika

2. predavanje

Saša Singer

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Uvodna priča o greškama (nastavak):
 - Analiza pojedinih vrsta grešaka:
 - Greške metode — teorija aproksimacija.
 - Greške u podacima — teorija perturbacija.
 - Uvjetovanost problema.
 - Mjerenje grešaka — razne norme.
 - Uvjetovanost višedimenzionalnog problema.
 - Primjeri:
 - Uvjetovanost problema, izbjegavanje kraćenja.
 - Približno računanje i perturbacije podataka.
 - Greške zaokruživanja — direktna i obratna analiza.
 - Stabilni i nestabilni algoritmi.
 - Primjer analize grešaka: Zbrajanje brojeva.

Greške i uvjetovanost

Greške — ponavljanje

Pri **numeričkom** rješavanju nekog problema javljaju se različiti tipovi **grešaka**:

- greške **modela** — svodenje **realnog** problema na neki “**matematički**” problem,
- greške u **ulaznim podacima** (mjerjenja 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,
...

Greške (*nastavak*)

Sljedeće tri kategorije (podaci, metoda, računanje) su vezane za “matematički” problem, i

- spadaju u domenu numeričke matematike!

O njima nešto “moramo reći”.

Skica numeričkog rješavanja nekog problema sliči algoritmu:



Posebno, ako dozvolimo da, umjesto riječi “algoritam”,

- piše i riječ “metoda”.

Zamislite da pojam “algoritam” uključuje

- metodu i stvarno računanje rezultata!

Greške (*nastavak*)



Sve tri vrste grešaka — podaci, metoda, računanje,

- rezultiraju nekom greškom u konačnom rezultatu!

Ta greška nas “zanima”.

Uočite da greške u ulaznim podacima možemo gledati

- neovisno o metodi ili algoritmu za rješenje problema,
- i tako dolazimo do pojma uvjetovanosti problema.

Za razliku od toga, greške metode i računanja, naravno,

- ovise o metodi, odnosno, algoritmu za rješenje problema.

Analiza grešaka

Greška metode

Gruba podjela **numeričkih metoda** — prema greškama:

Egzaktne metode

- daju **egzaktno** rješenje u **konačnom** broju “koraka”, odnosno, računskih operacija.

Primjer:

- Gaussove eliminacije ili LR faktorizacija za linearne sustave.

Greška takvih metoda je **nula**, uz **egzaktno** računanje.

Približne ili neegzaktne metode

- daju **približno** rješenje problema, u **konačnom** broju “koraka” (računskih operacija).

Greška metode — približne metode

Mogu biti **egzaktne** — na nekom limesu!

Primjeri:

- zamjena kompliciranog modela jednostavnijim,
- greške diskretizacije (numerička integracija),
- greške odbacivanja/rezanja, konačne iteracije (rješavanje nelinearnih jednadžbi)

Analiza ovih grešaka spada u **teoriju aproksimacija**.

Pošteno, to je **standardni** predmet proučavanja **numeričke matematike**, u **širem** smislu,

- numerička analiza, funkcionalna analiza, itd.

Time se bavimo **veći** dio kolegija!

Greške u podacima

Ključno svojstvo **problema** je

- ovisnost rješenja o greškama ili perturbacijama ulaznih podataka.

To spada u teoriju perturbacije.

Da bi problem uopće **imao smisla**, očekujemo

- neku vrstu **neprekidnosti** rješenja,
- ili barem **ograničenu** osjetljivost rješenja na perturbacije.

Inače imamo “**loše**” postavljen (engl. “ill-posed”) problem!

Osjetljivost se obično mjeri tzv. **brojem uvjetovanosti** problema (engl. “condition number”). Može ih biti i **više**.

Uvjetovanost problema

Neformalno rečeno, **uvjetovanost problema** mjeri

- osjetljivost problema na greške u podacima.

Osnovno svojstvo **uvjetovanosti**:

- Ne ovisi o konkretnoj numeričkoj metodi za rješenje problema, već samo o **problemu**.

Svrha **uvjetovanosti** = daje odgovor na pitanje:

- Koju **točnost rezultata** možemo očekivati
- pri **točnom računanju**, bez grešaka zaokruživanja,
- s (malo) pomaknutim — **netočnim podacima**?

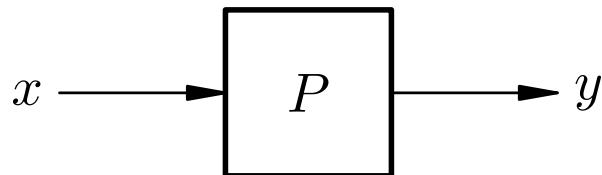
Velika uvjetovanost \longleftrightarrow nestabilan problem.

Model problema

Matematički model problema, zovimo ga P :

- za zadani ulaz — podatak $x \in \mathcal{X}$,
- dobivamo izlaz — rezultat $y \in \mathcal{Y}$.

Slikica modela je



Problem P interpretiramo kao računanje vrijednosti funkcije

$$f : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y},$$

gdje su \mathcal{X} i \mathcal{Y} odgovarajući matematički objekti. Na primjer, vektorski prostori, a vrlo često su i normirani prostori (treba nam mjera za grešku). Najčešće, $\mathcal{X} = \mathbb{R}^m$, $\mathcal{Y} = \mathbb{R}^n$.

Uvjetovanost problema (nastavak)

Ideja uvjetovanosti:

$$\text{greška u rezultatu} \approx \text{uvjetovanost} \cdot \text{greška u podacima}$$

Ovisi o **obje** vrijednosti: točnoj x i približnoj \hat{x} .

Za $m > 1$ ili $n > 1$, ovisi i o tome **kako** mjerimo greske.

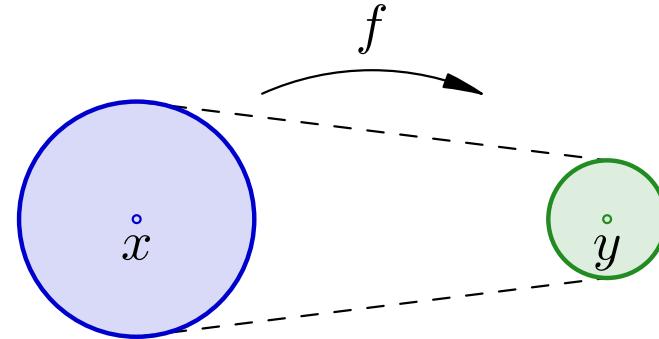
Napomene:

- Obično nas **uvjetovanost** posebno zanima za **male** perturbacije (greske, smetnje) podataka.
- Ako je f dovoljno **glatka** funkcija, možemo koristiti **Taylorov** razvoj u okolini **točnog** ulaznog podatka x
- i dobiti procjenu **uvjetovanosti** preko **derivacija!**

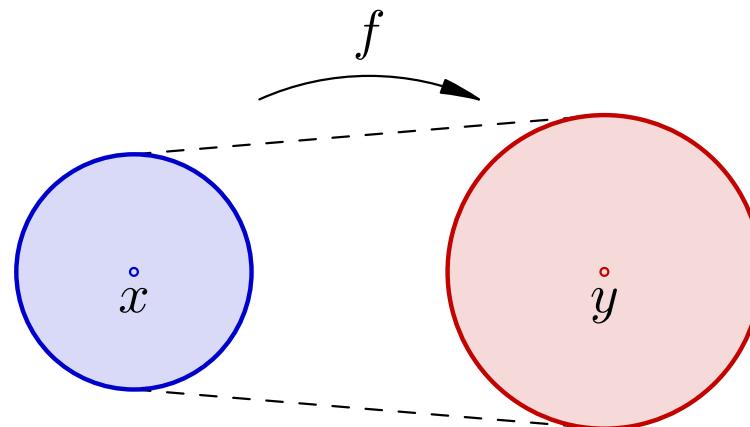
Više detalja malo kasnije, kad “sredimo” mjerjenje grešaka!

Uvjetovanost — prigušivač i pojačalo grešaka

Mala uvjetovanost \longleftrightarrow funkcija f je “prigušivač” grešaka:



Velika uvjetovanost \longleftrightarrow funkcija f je “pojačalo” grešaka:



Norme i uvjetovanost

Kako mjeriti grešku?

Kad x i $y = f(x)$ nisu brojevi, nego vektori ili matrice, grešku možemo mjeriti na više načina.

- Po svakoj od komponenata vektora/matrica,
 - što je “vrlo precizno”,
 - međutim, to je malo previše brojeva.
- Kao neku “ukupnu ili najveću” grešku,
 - što je samo jedan broj — pa se lakše nalazi,
 - iako može biti “neprecizno” (sažeta informacija).

Ovo se radi korištenjem vektorskih i/ili matričnih normi.

Prisjetite se: vektorski prostor na kojem je definirana norma zove se normirani prostor.

Vektorske norme

“Vektorska” norma na vektorskem prostoru V (nad poljem F , gdje je $F = \mathbb{R}$ ili $F = \mathbb{C}$) je

- svaka funkcija $\|\cdot\| : V \rightarrow \mathbb{R}$

koja zadovoljava sljedeća svojstva:

- $\|x\| \geq 0, \quad \forall x \in V,$

a jednakost vrijedi ako i samo ako je $x = 0$,

- $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|, \quad \forall \alpha \in F, \quad \forall x \in V,$

- $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|, \quad \forall x, y \in V$

(nejednakost poznata pod imenom nejednakost trokuta).

Najpoznatije vektorske norme

Kad je vektorski prostor konačnodimenzionalan, $V = \mathbb{R}^n$ ili $V = \mathbb{C}^n$, najčešće se koriste sljedeće tri norme:

- 1-norma ili ℓ_1 norma $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$,

- 2-norma ili ℓ_2 norma ili euklidska norma

$$\|x\|_2 = (x^*x)^{1/2} = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i|^2},$$

- ∞ -norma ili ℓ_∞ norma $\|x\|_\infty = \max_{i=1,\dots,n} |x_i|$.

Samo je 2-norma izvedena iz skalarnog produkta.

Norme na prostoru funkcija

Vektorski prostor V ne mora biti konačnodimenzionalan.

Na primjer, norme definirane na vektorskem prostoru $C[a, b]$ neprekidnih funkcija f na segmentu $[a, b]$, definiraju se slično normama na \mathbb{R}^n (suma \mapsto integral):

- L_1 norma $\|f\|_1 = \int_a^b |f(t)| dt,$
- L_2 norma $\|f\|_2 = \left(\int_a^b |f(t)|^2 dt \right)^{1/2},$
- L_∞ norma $\|f\|_\infty = \max\{ |f(x)| \mid x \in [a, b] \}.$

Ekvivalentnost normi

Može se pokazati da vrijedi sljedeći teorem.

Teorem. Na svakom konačnodimenzionalnom vektorskom prostoru V sve su norme ekvivalentne, tj. za svake dvije norme $\|\cdot\|_a$ i $\|\cdot\|_b$, postoji konstante c i C , takve da za sve $v \in V$ vrijedi

$$c\|v\|_a \leq \|v\|_b \leq C\|v\|_a.$$



Na primjer,

$$\|x\|_\infty \leq \|x\|_2 \leq \sqrt{n} \|x\|_\infty,$$

za sve $x \in \mathbb{R}^n$.

Razlika između teorije i prakse — kad je n ogroman.

Matrične norme

Zamijenimo li u definiciji vektorske norme, čisto formalno, vektor x matricom A , dobivamo **matričnu normu**.

Matrična norma je svaka funkcija $\|\cdot\| : \mathbb{C}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}$ koja zadovoljava sljedeća svojstva:

1. $\|A\| \geq 0$, $\forall A \in \mathbb{C}^{m \times n}$,
a jednakost vrijedi ako i samo ako je $A = 0$,
2. $\|\alpha A\| = |\alpha| \|A\|$, $\forall \alpha \in \mathbb{C}$, $\forall A \in \mathbb{C}^{m \times n}$,
3. $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$, $\forall A, B \in \mathbb{C}^{m \times n}$.

Tome se često dodaje i zahtjev **konzistentnosti**

4. $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$, kad god je produkt AB definiran.

Matrične norme (nastavak)

Matrične norme nastaju na dva načina.

- Matricu A promatramo kao **vektor** s $m \times n$ elemenata i za taj vektor koristimo odgovarajuću vektorsku normu.

Najpoznatija takva norma odgovara vektorskoj 2-normi i zove se **euklidska**, **Frobeniusova**, **Hilbert–Schmidtova**, ili **Schurova** norma

$$\|A\|_F = (\text{tr}(A^* A))^{1/2} = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2}.$$

- Operatorske norme:

$$\|A\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \quad \text{ili} \quad \|A\| = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|.$$

Najpoznatije operatorske matrične norme

Uvrštavanjem odgovarajućih vektorskih normi, dobivamo

- matrična 1-norma, “maksimalna stupčana norma”

$$\|A\|_1 = \max_{j=1,\dots,n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}|,$$

- matrična 2-norma, spektralna norma

$$\|A\|_2 = (\rho(A^* A))^{1/2} = \sigma_{\max}(A),$$

ρ je spektralni radijus, a σ singularna vrijednost matrice,

- matrična ∞ -norma, “maksimalna retčana norma”

$$\|A\|_\infty = \max_{i=1,\dots,m} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|.$$

Matrične norme (nastavak)

Svojstva:

- Za matrične norme, također, vrijedi **ekvivalentnost**.
- Matrična **2-norma** se **teško računa** u praksi — uobičajeno se **procjenjuje** korištenjem ostalih normi.
- Za svaku **operatorsku normu** vrijedi

$$\|Ay\| \leq \|A\| \|y\|,$$

za svaki vektor y . To se često koristi kod ocjena. Ova formula direktno izlazi iz definicije operatorske norme.

- **Unitarna invarijantnost spektralne i Frobeniusove norme:** za bilo koje **unitarne** matrice U (reda m) i V (reda n) vrijedi $\|UAV\|_2 = \|A\|_2$, $\|UAV\|_F = \|A\|_F$.

Uvjetovanost

Vrste uvjetovanosti — kratki pregled

Prema **vrsti** (tipu) greške koju gledamo:

- **Apsolutna, relativna** — po x , odnosno, po $y = f(x)$.

Prema načinu **mjerena** greške (u više dimenzija):

- Po pojedinim **komponentama** ili po **normi** cijelog vektora.

Po dozvoljenoj “**varijaciji**” argumenata x i \hat{x} :

- U “**fiksnim**” točkama — tj. x i \hat{x} su zadani. Nema puno smisla kao informacija o funkciji f , jer su točke fiksne.
- **Lokalno** oko x — \hat{x} varira u nekoj zadanoj okolini oko x .
- **Lokalno** u točki x , za **male** perturbacije — na **limesu** kad $\hat{x} \rightarrow x$, tj. $\Delta x \rightarrow 0$, ako limes postoji. Ovisi samo o x .
- **Globalno** po x — (obično) kao **najgori** slučaj po **svim** x iz nekog skupa ili cijelog prostora. Ovisi samo o f .

Apsolutna greška i absolutna uvjetovanost

Apsolutna, odnosno, relativna uvjetovanost problema mjeri koliko je problem **osjetljiv** na odgovarajuće promjene polaznih podataka.

- Apsolutna greška: $\|\Delta x\|$, $\|\Delta y\|$, (svaka norma u svom prostoru), gdje je

$$\Delta x = \hat{x} - x, \quad \Delta y = \hat{y} - y.$$

- Apsolutna uvjetovanost:

$$\kappa_{\text{abs}}(x) := \frac{\|\Delta y\|}{\|\Delta x\|}.$$

Za male greške $\|\Delta x\|$, veza s derivacijom $f'(x)$ je očita!

Relativna greška i relativna uvjetovanost

U praksi se češće koristi **relativna** mjera za grešku (na primjer, zbog aritmetike računala).

- Relativna greška (po normi):

$$\delta_x := \frac{\|\Delta x\|}{\|x\|}, \quad \delta_y := \frac{\|\Delta y\|}{\|y\|}.$$

- Relativna uvjetovanost (po normi):

$$\kappa_{\text{rel}}(x) := \frac{\delta_y}{\delta_x}.$$

Problem je **dobro uvjetovan** u relativnom smislu ako je

- κ_{rel} što je moguće **manji**, (barem) za $\delta_x \rightarrow 0$.

Landaov simbol — red veličine

Za zapis “reda veličine” vrijednosti neke funkcije u okolini neke točke koristimo tzv. Landaov simbol \mathcal{O} (“veliko O”).

Definicija. Neka su $g, h : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ funkcije, $\|\cdot\|_{\mathbb{R}^m}$ i $\|\cdot\|_{\mathbb{R}^n}$ norme i neka je $x_0 \in \mathbb{R}^m$.

Ako postoje konstante $\delta > 0$ i $C > 0$, takve da za sve x vrijedi

$$\|x - x_0\|_{\mathbb{R}^m} \leq \delta \implies \|g(x)\|_{\mathbb{R}^n} \leq C \|h(x)\|_{\mathbb{R}^n},$$

onda kažemo da je

“funkcija g reda veličine \mathcal{O} od h , kad x teži prema x_0 ”

i to pišemo ovako

$$g(x) = \mathcal{O}(h(x)) \quad (x \rightarrow x_0).$$

Landauov simbol (nastavak)

Napomena. Umjesto znaka “=”, **korektno** bi bilo pisati \in , tj.

$$g(x) \in \mathcal{O}(h(x)) \quad (x \rightarrow x_0).$$

Također, često se piše “veliko” \mathcal{O} , umjesto “pisanog” \mathcal{O} .

Primjer. Za $m = n = 1$ vrijedi:

$$\sin x = \mathcal{O}(x), \quad \sin x = x + \mathcal{O}(x^3) \quad (x \rightarrow 0),$$

$$x^2 + 3x = \mathcal{O}(x) \quad (x \rightarrow 0),$$

$$x^2 - x - 6 = \mathcal{O}(x - 3), \quad (x \rightarrow 3).$$

Zadnje dvije relacije opisuju ponašanje polinoma u okolini **jednostrukih** nultočke, a izlaze iz zapisa

$$x^2 + 3x = x(x + 3), \quad x^2 - x - 6 = (x - 3)(x + 2).$$

Uvjetovanost i Taylorov teorem

Istražimo **uvjetovanost** problema računanja vrijednosti funkcije $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ u nekoj točki x .

Promatramo ponašanje funkcije f za **male** perturbacije Δx u okolini točke x . Neka je Δy pripadna perturbacija funkcijске vrijednosti $y = f(x)$, tj.

$$f(x + \Delta x) = y + \Delta y.$$

Neka je f još dva puta neprekidno derivabilna oko x .

Korištenjem Taylorovog polinoma stupnja 1 dobivamo da je

$$\begin{aligned}\Delta y &= f(x + \Delta x) - f(x) \\ &= f'(x) \Delta x + \frac{f''(x + \vartheta \Delta x)}{2!} (\Delta x)^2, \quad \vartheta \in (0, 1).\end{aligned}$$

Apsolutna uvjetovanost i Taylorov teorem

Druga derivacija f'' je neprekidna oko $x \implies f''$ je ograničena oko x , tj. vrijedi

$$f''(x + \vartheta \Delta x) = \mathcal{O}(1),$$

za sve dovoljno male Δx i sve $\vartheta \in [0, 1]$.

Za male perturbacije Δx , absolutni oblik relacije za grešku je

$$\Delta y = f'(x) \Delta x + O((\Delta x)^2).$$

Odavde slijedi da je absolutna uvjetovanost funkcije f jednaka $f'(x)$ ili $|f'(x)|$, za male perturbacije Δx ,

$$\kappa_{\text{abs}}(x) = |f'(x)|.$$

Relativna uvjetovanost i Taylorov teorem

Ako je $x \neq 0$ i $y \neq 0$, dijeljenjem s y izlazi **relativna** forma

$$\frac{\Delta y}{y} = \frac{xf'(x)}{f(x)} \cdot \frac{\Delta x}{x} + O\left(\left(\frac{\Delta x}{x}\right)^2\right).$$

Ovdje koristimo da su $1/x$ i $1/y$ ograničene, pa za sve dovoljno **male** relativne perturbacije $\Delta x/x$ vrijedi

$$\frac{(\Delta x)^2}{y} = \frac{x^2}{y} \left(\frac{\Delta x}{x}\right)^2 = O\left(\left(\frac{\Delta x}{x}\right)^2\right).$$

Onda **relativnu** uvjetovanost funkcije f možemo definirati kao

$$\kappa_{\text{rel}}(x) = (\text{cond } f)(x) := \left| \frac{xf'(x)}{f(x)} \right|.$$

Uvjetovanost — posebni slučajevi oko nule

Ako je $x = 0$ i $y \neq 0$, onda relativna greška u x nema smisla (nije ograničena). Zato gledamo **apsolutnu** grešku u x i **relativnu** u y . Pripadni tzv. “miješani” broj uvjetovanosti je

$$(\text{cond } f)(x) := \left| \frac{f'(x)}{f(x)} \right|.$$

Analogno, za $x \neq 0$ i $y = 0$, pripadni broj uvjetovanosti je

$$(\text{cond } f)(x) := |xf'(x)|.$$

Ako je $x = y = 0$, onda gledamo samo absolutne greške, pa je

$$(\text{cond } f)(x) := |f'(x)|.$$

Uvjetovanost — primjer

Primjer. Relativna uvjetovanost funkcije

$$f(x) = \ln x$$

jednaka je

$$(\text{cond } f)(x) = \left| \frac{x f'(x)}{f(x)} \right| = \left| \frac{1}{\ln x} \right|,$$

što je veliko za $x \approx 1$, kada je $\ln x \approx 0$.

Pitanje: Apsolutna uvjetovanost?

Uvjetovanost višedimenzionalnog problema

Što u više dimenzija?

Kad je $f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$, problem postaje **složeniji**. Uz oznake

$$x = (x_1, x_2, \dots, x_m)^T \in \mathbb{R}^m, \quad y = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T \in \mathbb{R}^n,$$

preslikavanje f možemo komponentno zapisati kao

$$y_k = f_k(x_1, x_2, \dots, x_m), \quad k = 1, 2, \dots, n.$$

Ponovno, prepostavljamo da **svaka funkcija f_k** ima

- neprekidne parcijalne derivacije po **svim komponentnim varijablama x_ℓ** u točki x , do barem drugog reda.

Najdetaljniju analizu dobivamo gledajući promjene

- **svake komponentne funkcije f_k** po **svakoj** varijabli x_ℓ .

Finija analiza — svaki izlaz po svakom ulazu

Promjena koju uzrokuje mala relativna perturbacija varijable x_ℓ u funkciji f_k ista je kao za funkciju jedne varijable.

Relativna uvjetovanost tog problema je

$$\gamma_{k\ell}(x) := (\text{cond}_{k\ell} f)(x) := \left| \frac{x_\ell}{f_k(x)} \cdot \frac{\partial f_k}{\partial x_\ell} \right|.$$

Ako to napravimo za sve varijable x_ℓ i za svaku funkciju f_k , dobivamo matricu brojeva uvjetovanosti

$$\Gamma(x) = [\gamma_{k\ell}(x)] \in \mathbb{R}_+^{n \times m}.$$

Da bismo iz matrice $\Gamma(x)$ dobili jedan broj, koristimo neku normu i definiramo

$$(\text{cond } f)(x) := \|\Gamma(x)\|.$$

Primjer — uvjetovanost aritmetičkih operacija

Zadatak. Osnovne aritmetičke operacije $\circ = +, -, *, /$, na realnim brojevima gledamo kao računanje vrijednosti funkcije $f_\circ : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, gdje je

$$f_\circ(x_1, x_2) = x_1 \circ x_2.$$

Izračunajte pripadne matrice $\Gamma_\circ(x_1, x_2)$ za svaku operaciju \circ i nadite pripadnu **relativnu** uvjetovanost u ∞ -normi. ■

Rješenje.

$$\|\Gamma_\pm(x_1, x_2)\|_\infty = \frac{|x_1| + |x_2|}{|x_1 \pm x_2|},$$

$$\|\Gamma_*(x_1, x_2)\|_\infty = \|\Gamma_/(x_1, x_2)\|_\infty = 2.$$

To odgovara ranijim rezultatima za (vrlo) male relativne greške u polaznim podacima, tj. na limesu kad $\varepsilon \rightarrow 0$!

Grublja analiza — po normi

Grublju analizu — s manje parametara, dobivamo po ugledu na jednodimenzionalnu, promatranjem

- apsolutnih i relativnih perturbacija vektora u smislu norme, pri čemu je $\|\cdot\|$ bilo koja vektorska norma.

Relativnu perturbaciju vektora $x \in \mathbb{R}^m$ “po normi” definiramo kao

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|}, \quad \Delta x = (\Delta x_1, \Delta x_2, \dots, \Delta x_m)^T,$$

Prepostavljamo da su komponente Δx_ℓ vektora perturbacije Δx male u odnosu na pripadne komponente x_ℓ vektora x . Tada je i $\|\Delta x\|/\|x\|$ malo (obrat ne vrijedi).

Isto napravimo i za vektor $y \in \mathbb{R}^n$, tj. gledamo $\|\Delta y\|/\|y\|$.

Taylorov razvoj komponentnih funkcija

Sada možemo pokušati povezati relativnu perturbaciju od y s relativnom perturbacijom od x .

Za male perturbacije Δx , iz početka Taylorovog razvoja funkcije f_k dobivamo

$$\Delta y_k = f_k(x + \Delta x) - f_k(x) \approx \sum_{\ell=1}^m \frac{\partial f_k}{\partial x_\ell} \Delta x_\ell.$$

Ovu relaciju možemo zapisati u vektorsko-matričnom obliku

$$\Delta y \approx \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \Delta x,$$

gdje je $\frac{\partial f}{\partial x} = J_f(x)$ Jacobijeva matrica funkcije f u točki x .

Jacobijeva matrica preslikavanja

Jacobijeva matrica $J_f(x)$ sadrži parcijalne derivacije svih komponentnih funkcija po svim varijablama:

$$[J_f(x)]_{k\ell} = \frac{\partial f_k}{\partial x_\ell}, \quad k = 1, \dots, n, \quad \ell = 1, \dots, m,$$

ili

$$J_f(x) = \frac{\partial f}{\partial x} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_m} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_m} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times m}.$$

Apsolutne perturbacije po normi

Iz približne jednakosti za male perturbacije

$$\Delta y \approx \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \Delta x,$$

uzimanjem bilo koje operatorske ili konzistentne norme izlazi

$$\|\Delta y\| \approx \left\| \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \Delta x \right\| \lesssim \left\| \frac{\partial f}{\partial x} \right\| \cdot \|\Delta x\|.$$

Za operatorske norme, prethodna nejednakost oštra, tj. postoji perturbacija Δx za koju se ona dostiže.

Odavde vidimo da normu Jacobijeve matrice možemo uzeti kao absolutnu uvjetovanost “po normi”.

Uočite: Za $m = n = 1$ dobivamo isto kao i ranije!

Relativne perturbacije po normi

Kao i ranije, ako je $x \neq 0$ i $y \neq 0$, dijeljenjem s $\|y\|$ dobivamo da za relativne perturbacije po normi vrijedi

$$\frac{\|\Delta y\|}{\|y\|} \lesssim \frac{\|x\|}{\|f(x)\|} \cdot \left\| \frac{\partial f}{\partial x} \right\| \cdot \frac{\|\Delta x\|}{\|x\|}.$$

To opravdava definiciju relativne uvjetovanosti “po normi” u obliku

$$(\text{cond } f)(x) := \frac{\|x\|}{\|f(x)\|} \cdot \left\| \frac{\partial f}{\partial x} \right\|.$$

Ova uvjetovanost je mnogo grublja nego $\|\Gamma(x)\|$, jer norma pokušava “uništiti” detalje o komponentama vektora.

Ako su komponente bitno različitih redova veličina, samo najveće po absolutnoj vrijednosti igraju neku ulogu.

Primjer uvjetovanosti problema

Problem — računanje integrala (Gautschi)

Ispitajmo **uvjetovanost** problema računanja integrala

$$I_n = \int_0^1 \frac{t^n}{t+5} dt,$$

za **zadani** nenegativni cijeli broj $n \in \mathbb{N} \cup \{0\} = \mathbb{N}_0$.

U **ovom** obliku, problem je napisan kao preslikavanje iz \mathbb{N}_0 u \mathbb{R} i ne “paše” ranijem pojmu **problema**.

- Domena ovdje **nije** \mathbb{R} , nego \mathbb{N}_0 (diskretan skup), pa nema smisla govoriti o neprekidnosti, derivabilnosti i sl.

Zato prvo **transformiramo** problem.

Rekurzija za integral

Nadimo vezu između I_k i I_{k-1} , s tim da I_0 znamo izračunati

$$I_0 = \int_0^1 \frac{1}{t+5} dt = \ln(t+5) \Big|_0^1 = \ln \frac{6}{5}.$$

Za početak, očito vrijedi da je

$$\frac{t}{t+5} = 1 - \frac{5}{t+5}.$$

Množenjem obje strane s t^{k-1} dobivamo

$$\frac{t^k}{t+5} = t^{k-1} - 5 \frac{t^{k-1}}{t+5}.$$

Rekurzija za integral (nastavak)

Na kraju, integracijom na segmentu $[0, 1]$ izlazi

$$I_k = \int_0^1 t^{k-1} dt - 5I_{k-1} = \frac{1}{k} - 5I_{k-1}, \quad k = 1, 2, \dots, n.$$

Dakle, I_k je rješenje (linearne, nehomogene) diferencijske jednadžbe prvog reda

$$y_k = -5y_{k-1} + \frac{1}{k}, \quad k = 1, 2, \dots,$$

uz početni uvjet $y_0 = I_0$.

Ovo gore je dvočlana rekurzivna relacija za y_k (pogledajte priču o rekurzivnim relacijama u Diskretnoj matematici).

Rekurzija unaprijed — zapis funkcijama

Varijacija početnog uvjeta definira niz funkcija f_k , $y_k = f_k(y_0)$.

Zanima nas relativna uvjetovanost funkcije f_n u točki $y_0 = I_0$, u ovisnosti o $n \in \mathbb{N}_0$. Razlog:

- I_0 nije egzaktno prikaziv u računalu,
- umjesto I_0 , spremi se aproksimacija \widehat{I}_0 ,
- konačni rezultat — neka aproksimacija $\widehat{I}_n = f_n(\widehat{I}_0)$.

Indukcijom ili supstitucijom unatrag lako se dokaže da vrijedi

$$y_n = f_n(y_0) = (-5)^n y_0 + p_n, \quad p_n = \sum_{k=1}^n \frac{(-5)^{n-k}}{k},$$

gdje je p_n ovisi samo o nehomogenim članovima rekurzije, ali ne i o početnom uvjetu y_0 .

Rekurzija unaprijed — relativna uvjetovanost

Relativna uvjetovanost funkcije f_n u točki y_0 je

$$(\text{cond } f_n)(y_0) = \left| \frac{y_0 f'_n(y_0)}{y_n} \right| = \left| \frac{y_0 (-5)^n}{y_n} \right|.$$

Iz definicije integrala slijedi: I_n monotono padaju po n , čak

$$\lim_{n \rightarrow \infty} I_n = 0.$$

Zbrajanjima dobivamo sve manje i manje brojeve! U $y_0 = I_0$ je

$$(\text{cond } f_n)(I_0) = \frac{I_0 \cdot 5^n}{I_n} > \frac{I_0 \cdot 5^n}{I_0} = 5^n.$$

Zaključak: f_n je vrlo loše uvjetovana u $y_0 = I_0$, i to tim gore kad n raste.

Rekurzija unaprijed — rezultati

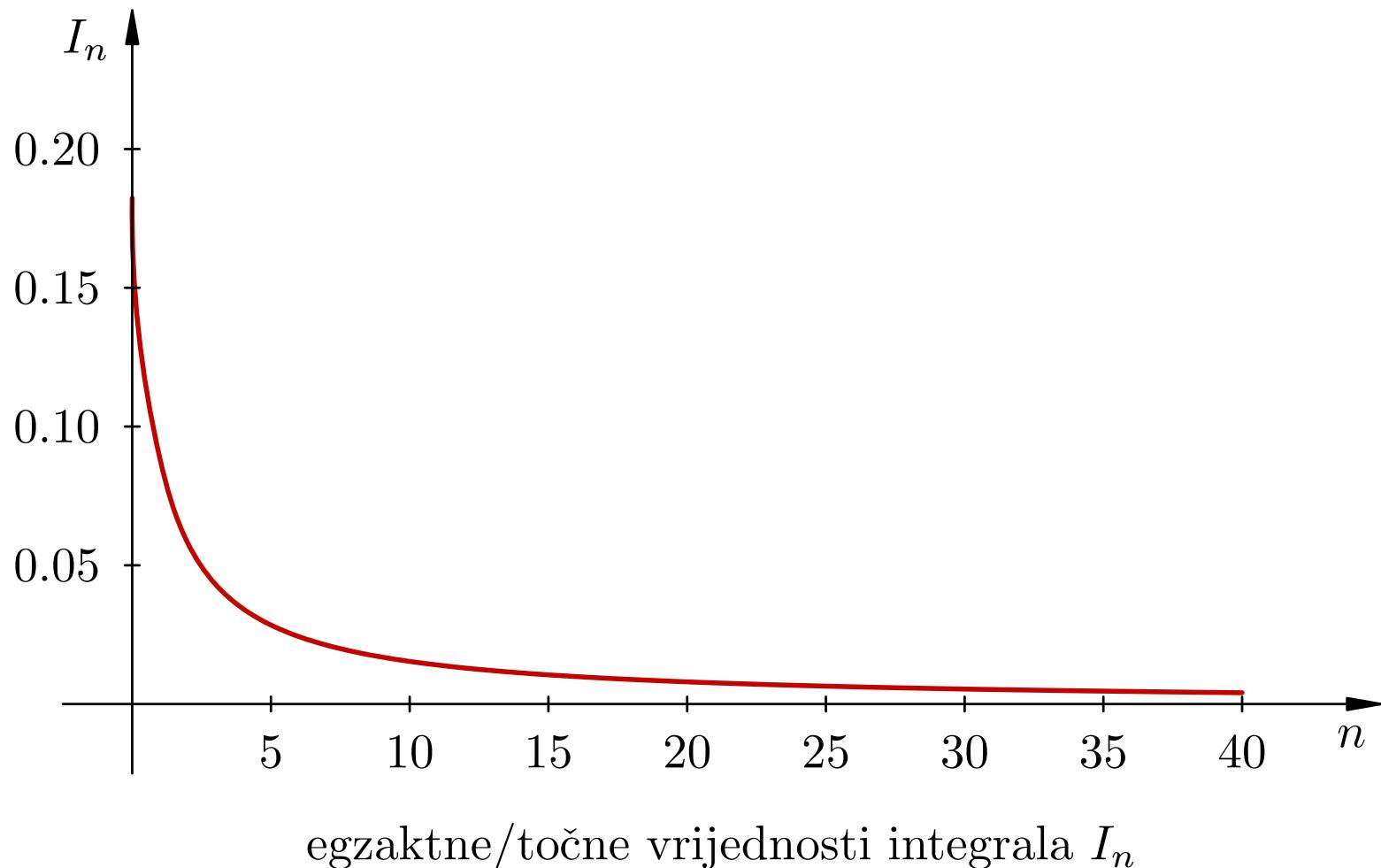
Pitanje: Kako se loša uvjetovanost vidi, kad stvarno računamo $f_n(I_0)$ u aritmetici računala?

Algoritam **unaprijed**, za zadani n (pseudokôd):

```
k = 0;  
y = ln( 6.0 / 5.0 );      /* y_0 */  
ispisi k, y;  
za k = 1 do n radi {  
    y = -5.0 * y + 1.0 / k;    /* y_k */  
    ispisi k, y;  
}
```

Slikice! Pokaži program i rezultate!

Točne vrijednosti integrala I_n

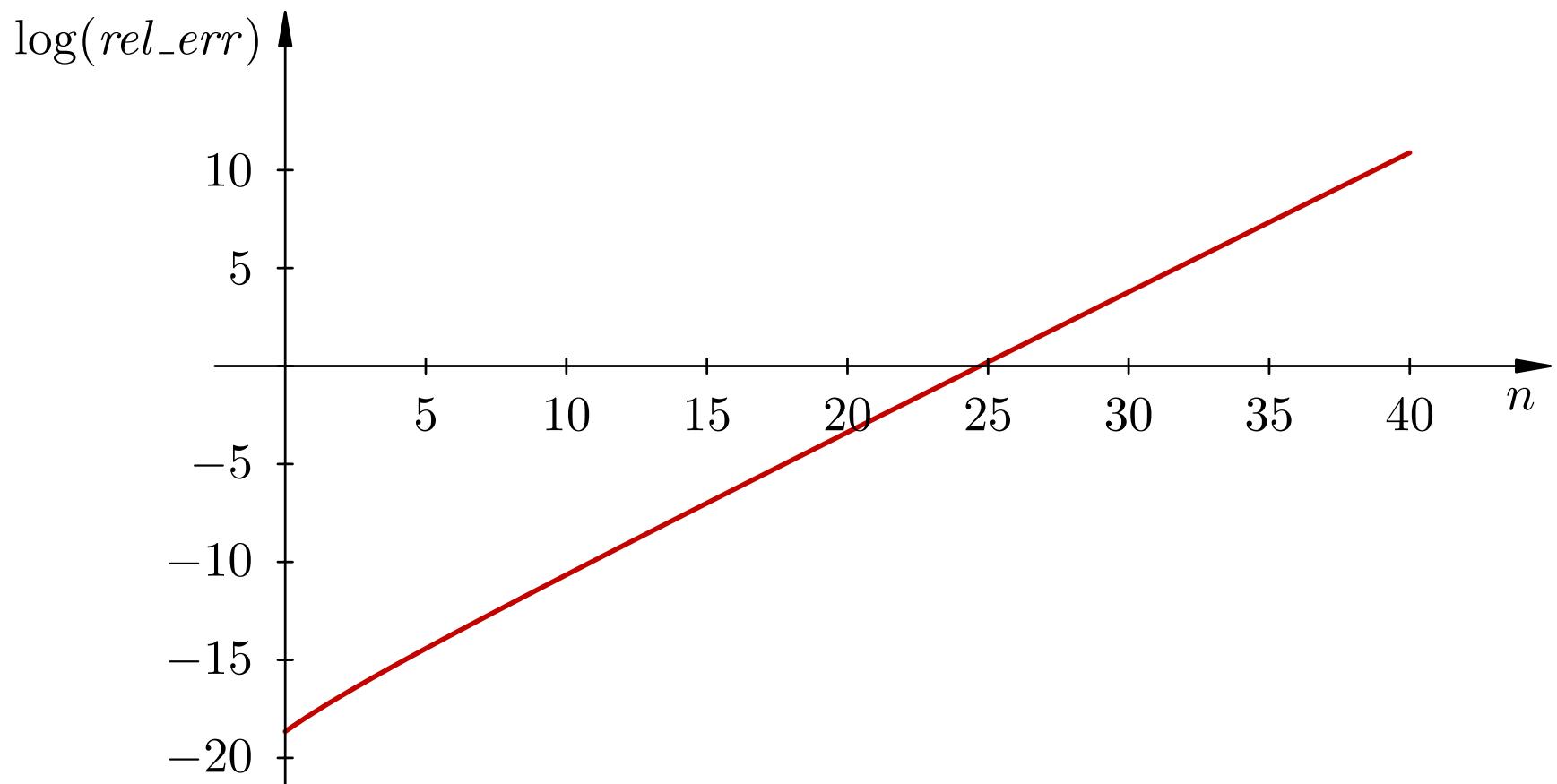


Rekurzija unaprijed — numerički rezultati

Izračunate vrijednosti u tipu **extended** ($u \approx 5.42 \cdot 10^{-20}$).
Crvene znamenke su pogrešne!

n	\hat{I}_n	I_n	rel. greška
0	1.82321556793954626E–1	1.82321556793954626E–1	2.2E–19
1	8.83922160302268688E–2	8.83922160302268689E–2	–2.0E–18
2	5.80389198488656562E–2	5.80389198488656553E–2	1.5E–17
..
22	7.38035060732479776E–3	7.29738306511145509E–3	1.1E–02
23	6.57650783294122857E–3	6.99134554400794192E–3	–5.9E–02
24	8.78412750196052383E–3	6.70993894662695705E–3	3.1E–01
25	–3.92063750980261915E–3	6.45030526686521474E–3	–1.6E+00
..
39	–6.32992112791892692E+7	4.18374034921478077E–3	–1.5E+10
40	3.16496056420946346E+8	4.08129825392609613E–3	7.8E+10

Rekurzija unaprijed za I_n — relativne greške



(\log_{10}) relativne greške izračunate vrijednosti
integrala I_n rekurzijom unaprijed

Rekurzija unaprijed — komentar rezultata

Izračunata vrijednost \hat{I}_0 ima

- vrlo **malu** relativnu grešku — samo **nekoliko u** .

Međutim, ta mala greška “**eksplodira**” vrlo **brzo**,

- jer se **pojačava** s faktorom **5** u **svakoj** iteraciji.

Isto vrijedi i za **sve** greške zaokruživanja iza toga, samo je **ukupni** faktor pojačanja malo manji (kasnije su nastale).

Stvarni problem i **bitna** razlika od primjera “**sin 24π**”:

- Ovdje **nema** velikih omjera brojeva u algoritmu.

Brojevi I_n relativno **sporo** padaju — omjer I_0/I_{40} je ispod **50**. Po tome, očekivali bismo gubitak točnosti od oko **2** decimale,

- a stvarno imamo **užasno** i još “**nevidljivo**” kraćenje.

Rekurzija unatrag — zapis funkcijama

Može li se loša uvjetovanost **izbjjeći**?

- Može — okretanjem rekurzije, unaprijed \mapsto unatrag!

Treba uzeti neki $\nu > n$ i “silazno” računati

$$y_{k-1} = \frac{1}{5} \left(\frac{1}{k} - y_k \right), \quad k = \nu, \nu - 1, \dots, n + 1.$$

Ovo, u principu, smijemo koristiti i za $n = 0$, tj. računati y_0 .

Problem: Kako izračunati **početnu** vrijednost y_ν ?

Nova rekurzija definira niz funkcija $g_{n,\nu}$, koje vežu y_n i y_ν , uz $\nu > n$, tj.

$$y_n = g_{n,\nu}(y_\nu).$$

Rekurzija unatrag — relativna uvjetovanost

Relativna uvjetovanost za $g_{n,\nu}$ je

$$(\text{cond } g_{n,\nu})(y_\nu) = \left| \frac{y_\nu (-1/5)^{\nu-n}}{y_n} \right|, \quad \nu > n.$$

Za $y_\nu = I_\nu$ dobivamo da je $y_n = I_n$, a iz monotonosti I_n slijedi

$$(\text{cond } g_{n,\nu})(I_\nu) = \frac{I_\nu}{I_n} \cdot \left(\frac{1}{5} \right)^{\nu-n} < \left(\frac{1}{5} \right)^{\nu-n}, \quad \nu > n,$$

što je ispod 1, tj. relativne greške se prigušuju.

- ➊ Prigušenje grešaka ide s faktorom $1/5$ po svakoj iteraciji!
- ➋ To vrijedi i za greške zaokruživanja napravljene u ranijim iteracijama (u aritmetici računala).

Rekurzija unatrag — početna vrijednost

Ako je \hat{I}_ν neka aproksimacija za I_ν , onda za relativne perturbacije vrijedi

$$\left| \frac{\hat{I}_n - I_n}{I_n} \right| = (\operatorname{cond} g_{n,\nu})(I_\nu) \cdot \left| \frac{\hat{I}_\nu - I_\nu}{I_\nu} \right| < \left(\frac{1}{5} \right)^{\nu-n} \cdot \left| \frac{\hat{I}_\nu - I_\nu}{I_\nu} \right|.$$

Zbog linearnosti funkcije $g_{n,\nu}$, ova relacija vrijedi za bilo kakve perturbacije, a ne samo za male.

- Početna vrijednost \hat{I}_ν uopće ne mora biti blizu prave I_ν .
- Možemo uzeti $\hat{I}_\nu = 0$, čime smo napravili relativnu grešku od 100% (tj. 1) u početnoj vrijednosti . . .

Rekurzija unatrag — točnost i start ν

- ... a još uvijek dobivamo \widehat{I}_n s relativnom greškom

$$\left| \frac{\widehat{I}_n - I_n}{I_n} \right| < \left(\frac{1}{5} \right)^{\nu-n}, \quad \nu > n.$$

- Povoljnim izborom ν , ocjenu na desnoj strani možemo napraviti po volji malom — ispod tražene točnosti ε .
- Dovoljno je uzeti $\widehat{I}_\nu = 0$ i

$$\nu \geq n + \frac{\log(1/\varepsilon)}{\log 5},$$

a zatim računamo vrijednosti

$$\widehat{I}_{k-1} = \frac{1}{5} \left(\frac{1}{k} - \widehat{I}_k \right), \quad k = \nu, \nu - 1, \dots, n + 1.$$

Rekurzija unatrag — rezultati

Pitanje: Kako se **dobra** uvjetovanost **vidi**, kad stvarno računamo $g_{n,\nu}(I_\nu)$ u aritmetici računala?

Pokaži program i rezultate za $\varepsilon = 10^{-19}$!

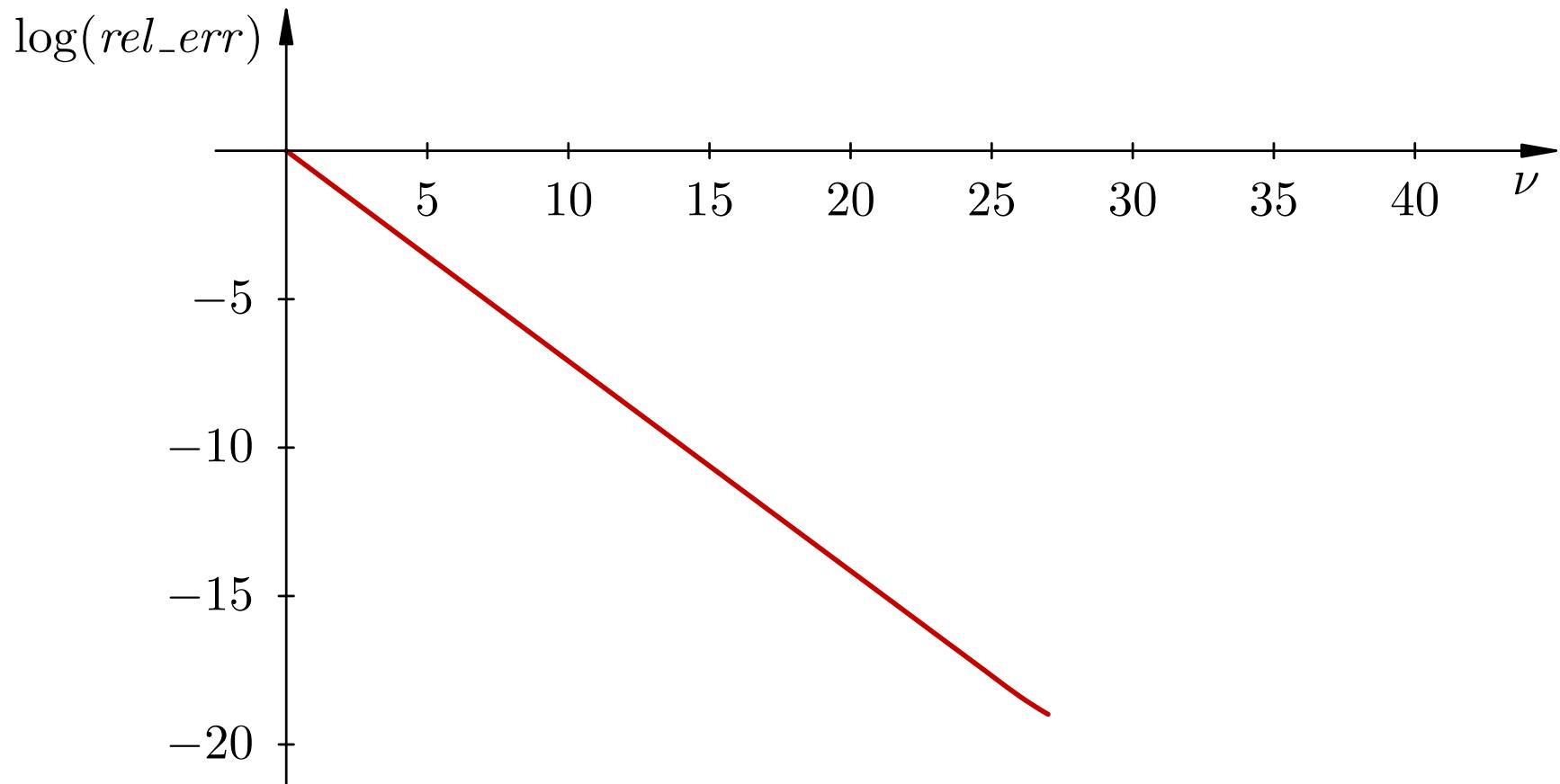
- Početna vrijednost je $\widehat{I}_\nu = 0$.
- Za ovaj ε dobijemo

$$\nu \geq n + \frac{\log(1/\varepsilon)}{\log 5} \approx n + 28.$$

Dakle, “silazno” računamo 28 vrijednosti.

Usput, to su vrijednosti za I_n iz ranije tablice i **sve** prikazane znamenke su **točne** (ima ih 18). Dakle, “ništa se **ne vidi**”. Greška je samo **nekoliko** u , jer je $\varepsilon \approx 2u$ i imamo 3 operacije.

Rekurzija unatrag za I_{40} — ovisno o startu ν



(\log_{10}) relativne greške izračunate vrijednosti
integrala I_{40} obratnom rekurzijom za $I_{40+\nu} = 0$

Rekurzivno računanje — završne napomene

Rekurzije prvog i (posebno) drugog reda se vrlo često koriste u praksi

- ne samo za računanje vrijednosti integrala,
- već za računanje raznih specijalnih funkcija (poput Besselovih) i ortogonalnih polinoma (v. kasnije).

Zato oprez ...

- treba znati nešto o stabilnosti rekurzije, prije računanja!

“Trik” okretanja rekurzije poznat je kao Millerov algoritam. Prvi puta je iskorišten baš za računanje Besselovih funkcija.

Primjeri izbjegavanja kraćenja

Primjer: Kvadratna jednadžba

Kvadratna jednadžba

Uzmimo da treba riješiti (realnu) kvadratnu jednadžbu

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

gdje su a , b i c zadani, i vrijedi $a \neq 0$.

Matematički gledano, problem je lagan: imamo 2 rješenja

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}.$$

Numerički gledano, problem je mnogo izazovniji:

- ni uspješno računanje po ovoj formuli,
- ni točnost izračunatih korijena,

ne možemo uzeti “zdravo za gotovo”.

Kvadratna jednadžba — standardni oblik

Za početak, jer znamo da je $a \neq 0$, onda jednadžbu možemo podijeliti s a , tako da dobijemo tzv. “normalizirani” oblik

$$x^2 + px + q = 0, \quad p = \frac{b}{a}, \quad q = \frac{c}{a}.$$

Po standardnim formulama, rješenja ove jednadžbe su

$$x_{1,2} = \frac{-p \pm \sqrt{p^2 - 4q}}{2}.$$

Međutim, u praksi, stvarno računanje se radi po formuli

$$x_{1,2} = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{p}{2}\right)^2 - q},$$

s tim da na početku izračunamo i zapamtimo $p/2$ ili $-p/2$. Ovim postupkom štedimo jedno množenje (ono s 4).

Kvadratna jednadžba — problem

Primjer. Rješavamo kvadratnu jednadžbu $x^2 - 56x + 1 = 0$.

U dekadskoj aritmetici s $p = 5$ značajnih znamenki dobijemo

$$x_1 = 28 - \sqrt{783} = 28 - 27.982 = 0.018000,$$

$$x_2 = 28 + \sqrt{783} = 28 + 27.982 = 55.982.$$

Točna rješenja su

$$x_1 = 0.0178628\dots \quad \text{i} \quad x_2 = 55.982137\dots$$

Apsolutno manji od ova dva korijena — x_1 , ima samo dvije točne znamenke (kraćenje), relativna greška je $7.7 \cdot 10^{-3}$!

Apsolutno veći korijen x_2 je “savršeno” točan.

Kvadratna jednadžba — popravak

Prvo izračunamo većeg po absolutnoj vrijednosti, po formuli

$$x_2 = \frac{-(b + \text{sign}(b)\sqrt{b^2 - 4ac})}{2a} = -\frac{p}{2} - \text{sign}(p)\sqrt{\left(\frac{p}{2}\right)^2 - q},$$

a manjeg po absolutnoj vrijednosti, izračunamo iz

$$x_1 \cdot x_2 = \frac{c}{a} = q$$

(Vièteova formula), tj. formula za x_1 je

$$x_1 = \frac{c}{x_2 a} = \frac{q}{x_2}.$$

Opasnog kraćenja za x_1 više nema!

Kvadratna jednadžba (nastavak)

Ovo je bila samo **jedna**, od (barem) **tri** “opasne” točke za računanje. Preostale **dvije** su:

- “**kvadriranje**” pod korijenom — mogućnost za **overflow**. Rješenje — “**skaliranjem**”.
- **oduzimanje** u diskriminanti s velikim **kraćenjem** — nema jednostavnog rješenja. Naime, “krivac” nije aritmetika.
- To je samo odraz tzv. **nestabilnosti** problema. Tad imamo **dva bliska korijena**, koji su **vrlo osjetljivi** na male **promjene** (perturbacije) koeficijenata jednadžbe.
- Na primjer, pomak c = pomak grafa “**gore–dolje**”. Mali pomak rezultira **velikom** promjenom korijena!

Neki primjeri izbjegavanja kraćenja

Primjer. Treba izračunati

$$y = \sqrt{x + \delta} - \sqrt{x},$$

gdje su x i δ zadani ulazni podaci, s tim da je $x > 0$,

- a $|\delta|$ vrlo mali broj.

U ovoj formuli, očito, dolazi do velike greške zbog kraćenja — zaokruživanje korijena prije oduzimanja.

Ako formulu “deracionaliziramo” u oblik

$$y = \frac{\delta}{\sqrt{x + \delta} + \sqrt{x}},$$

problema više nema!

Neki primjeri izbjegavanja kraćenja

Primjer. Treba izračunati

$$y = \cos(x + \delta) - \cos x,$$

gdje su x i δ zadani ulazni podaci, s tim da je $|\cos x|$ razumno velik,

- a $|\delta|$ vrlo mali broj.

Opet, dolazi do velike greške zbog kraćenja.

Ako formulu napišmo u “produktnom” obliku

$$y = -2 \sin \frac{\delta}{2} \sin \left(x + \frac{\delta}{2} \right),$$

problema više nema!

Primjer za nultočke polinoma

Svojstvene vrijednosti i nultočke polinoma

U linearnoj algebri, **svojstvene vrijednosti** zadane matrice A se računaju “na ruke” kao

- nultočke karakterističnog polinoma te matrice

$$k_A(\lambda) = \det(\lambda I - A) = 0.$$

Prvo, računanjem determinante, nađemo “standardni” oblik karakterističnog polinoma, preko **koeficijenata**

$$k_A(\lambda) = \lambda^n + c_{n-1}\lambda^{n-1} + \cdots + c_1\lambda + c_0,$$

a onda tražimo **nultočke** $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ tog polinoma.

Oprez: Nultočke polinoma mogu biti **vrlo osjetljive** na male perturbacije u **koeficijentima** polinoma.

Primjer — Wilkinsonov polinom

Primjer. Uzmimo tzv. Wilkinsonov polinom stupnja $n = 20$,

$$P_{20}(\lambda) = (\lambda - 1) \cdot (\lambda - 2) \cdots (\lambda - 19) \cdot (\lambda - 20).$$

Iz ovog “multiplikativnog” oblika odmah čitamo da su nultočke tog polinoma, redom, prirodni brojevi

$$\lambda_i = i, \quad i = 1, \dots, 20.$$

Ovaj oblik polinoma — kao produkt linearnih faktora, je

- idealno stabilan na male perturbacije “polaznih” podataka,
- jer su ti podaci upravo nultočke polinoma!

Wilkinsonov polinom — razvijen po potencijama

Kad polinom P_{20} “razvijemo” po potencijama od λ , tj. zapišemo preko koeficijenata c_j , dobivamo

$$P_{20}(\lambda) = \lambda^{20} + c_{19}\lambda^{19} + \cdots + c_1\lambda + c_0,$$

s koeficijentima:

$$c_{19} = -(1 + 2 + \cdots + 19 + 20) = -210,$$

⋮

$$c_0 = (-1) \cdot (-2) \cdots (-19) \cdot (-20) = 20!$$

Baš to je oblik kojeg bismo, na primjer, izračunali iz pripadne matrice. Poanta:

- Ovdje se nultočke baš i “ne vide” odmah . . .

Treba ih **izračunati**!

Egzaktni koeficijenti Wilkinsonovog polinoma

Točne vrijednosti koeficijenata c_j su

$c_0 =$	2432 90200 81766 40000	$c_{10} =$	1 30753 50105 40395
$c_1 =$	-8752 94803 67616 00000	$c_{11} =$	-13558 51828 99530
$c_2 =$	13803 75975 36407 04000	$c_{12} =$	1131 02769 95381
$c_3 =$	-12870 93124 51509 88800	$c_{13} =$	-75 61111 84500
$c_4 =$	8037 81182 26450 51776	$c_{14} =$	4 01717 71630
$c_5 =$	-3599 97951 79476 07200	$c_{15} =$	-16722 80820
$c_6 =$	1206 64780 37803 73360	$c_{16} =$	533 27946
$c_7 =$	-311 33364 31613 90640	$c_{17} =$	-12 56850
$c_8 =$	63 03081 20992 94896	$c_{18} =$	20615
$c_9 =$	-10 14229 98655 11450	$c_{19} =$	-210

Koeficijenti su “jedva” prikazivi u tipu `extended`, a sigurno nisu egzaktно prikazivi u manjim tipovima, poput `double`.

Mala perturbacija koeficijenta c_{19}

U polinomu P_{20} napravimo

- jednu jedinu perturbaciju veličine 2^{-23} u koeficijentu c_{19} , tako da dobijemo polinom

$$\tilde{P}_{20}(\lambda) = P_{20}(\lambda) - 2^{-23}\lambda^{19}.$$

Prirodna relativna perturbacija koeficijenta c_{19} je

- reda veličine 2^{-30} , odnosno, ispod 10^{-9} .

Reklo bi se — zaista mala perturbacija!

Kako izgledaju nultočke tog perturbiranog polinoma \tilde{P}_{20} , tj.

- jesu li se i nultočke “malo” promijenile?

Nažalost, ne!

Nestabilnost nultočaka Wilkinsonovog polinoma

Egzaktne nultočke polinoma \tilde{P}_{20} , na 9 decimala, su

1.00000 0000	6.00000 6944	$10.09526\,6145 \pm 0.64350\,0904 i$
2.00000 0000	6.99969 7234	$11.79363\,3881 \pm 1.65232\,9728 i$
3.00000 0000	8.00726 7603	$13.99235\,8137 \pm 2.51883\,0070 i$
4.00000 0000	8.91725 0249	$16.73073\,7466 \pm 2.81262\,4894 i$
4.99999 9928	20.84690 8101	$19.50243\,9400 \pm 1.94033\,0347 i$

Od 20 realnih nultočaka polinoma P_{20} , dobili smo

- samo 10 realnih — prvih 9 i zadnja,
- i 5 parova konjugirano kompleksnih, s vrlo “nezanemarivim” imaginarnim dijelovima.

Ni govora o “maloj” perturbaciji!

Svojstvene vrijednosti matrica — pouka

Zato se, u praksi, **svojstvene vrijednosti** matrice A

- nikad (ili gotovo nikad) **ne** računaju kao
- nultočke karakterističnog polinoma k_A .

Za taj problem postoji gomila **raznih** numeričkih metoda, ovisno o vrsti matrice i raznim drugim stvarima.

Približno računanje i perturbacije podataka

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 gresaka je

- svodenje 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 , spremi 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

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

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

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 komplikirana 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

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

“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

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

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**.

Naime, **uzroka** grešaka može biti mnogo, ovisno o tome što računamo. Od grešaka **modela** i **metode**, preko grešaka mjerenja (u ulaznim podacima), do grešaka **zaokruživanja**.

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:

ulaz (domena) \rightarrow 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 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.

U protivnom, moramo znati grešku za operative, a to je greška unaprijed za prethodni dio algoritma.

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 pojmove:

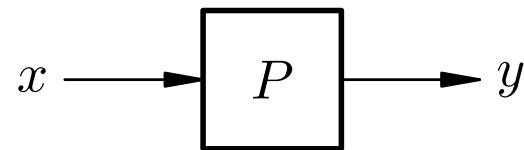
- stabilno i **nestabilno** računanje ili algoritam = “prigušivač” ili “pojačalo” grešaka.

Slikice (skripta NA, Higham) — su na sljedećoj stranici.

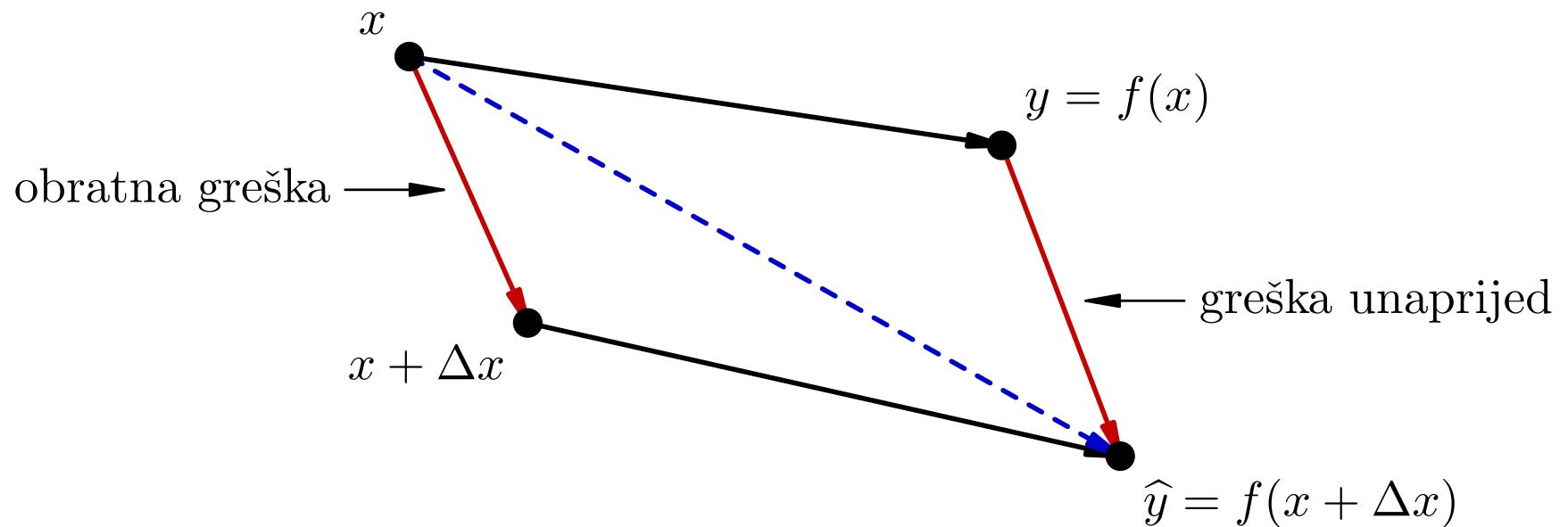
- Primjeri nestabilnosti — **uklonjivi** i **NEuklonjivi**.

Greška unaprijed i obratna greška

Uzmimo da algoritam “rješava” problem P .



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



Zbrajanje brojeva

Primjer: računanje sume u aritmetici računala

Primjer. Računamo sumu (zbroj) $s_n = x_1 + x_2 + \cdots + x_n$, uz pretpostavku da su svi brojevi x_i prikazivi u računalu, tj. vrijedi $x_i = f\ell(x_i)$, za $i = 1, \dots, n$.

Algoritam. Zbrajamo unaprijed — redom po indeksima:

```
s = x_1;  
za i = 2 do n radi  
    s = s + x_i;
```

Oznake. Razlikujemo egzaktne i izračunate parcijalne sume:

- Egzaktne parcijalne sume su $s_i = s_{i-1} + x_i = x_1 + \cdots + x_i$,
 - Izračunate parcijalne sume su $\hat{s}_i = f\ell(\hat{s}_{i-1} + x_i)$,
- za $i = 2, \dots, n$. Za početnu sumu vrijedi $s_1 = \hat{s}_1 = x_1$.

Greške zaokruživanja u aritmetici računala

Prema IEEE standardu, za svaki izračunati rezultat vrijedi

$$\hat{s}_i = f\ell(\hat{s}_{i-1} + x_i) = (1 + \varepsilon_{i-1})(\hat{s}_{i-1} + x_i), \quad i = 2, \dots, n,$$

s tim da je $|\varepsilon_{i-1}| \leq u$, uz pretpostavku da su svi \hat{s}_i unutar prikazivog raspona (nadalje smatramo da je tako).

Jedino razumno je izraziti završni rezultat \hat{s}_n u terminima

- polaznih vrijednosti x_1, \dots, x_n .

Kad to napravimo i sredimo po x_i , dobivamo

$$\begin{aligned}\hat{s}_n &= (1 + \varepsilon_1) \cdots (1 + \varepsilon_{n-1}) x_1 + (1 + \varepsilon_1) \cdots (1 + \varepsilon_{n-1}) x_2 \\ &\quad + (1 + \varepsilon_2) \cdots (1 + \varepsilon_{n-1}) x_3 + \cdots \\ &\quad + (1 + \varepsilon_{n-2}) (1 + \varepsilon_{n-1}) x_{n-1} + (1 + \varepsilon_{n-1}) x_n.\end{aligned}$$

Zapis izračunate sume

Izračunatu sumu \hat{s}_n možemo napisati u obliku

$$\hat{s}_n = (1 + \eta_1) x_1 + (1 + \eta_2) x_2 + \cdots + (1 + \eta_n) x_n,$$

gdje je

$$\eta_1 = \eta_2 = (1 + \varepsilon_1) \cdots (1 + \varepsilon_{n-1}) - 1$$

$$\eta_3 = (1 + \varepsilon_2) \cdots (1 + \varepsilon_{n-1}) - 1$$

⋮

$$\eta_{n-1} = (1 + \varepsilon_{n-2}) (1 + \varepsilon_{n-1}) - 1$$

$$\eta_n = (1 + \varepsilon_{n-1}) - 1 = \varepsilon_{n-1}.$$

Iz $|\varepsilon_i| \leq u$ dobivamo ocjene (v. “velika” skripta, str. 135–136)

$$|\eta_i| \leq (1 + u)^{n+1-i} - 1 \leq \gamma_{n+1-i} := \frac{(n+1-i)u}{1 - (n+1-i)u},$$

za $i = 2, \dots, n$, i $|\eta_1| = |\eta_2| \leq \gamma_{n-1}$ (uz uvjet $(n-1)u < 1$).

Što ćemo s tim — interpretacija unatrag

Pogled **unatrag** u domenu — **obratna** greška, **stabilnost unatrag** (engl. backward error, backward stability), iz relacije

$$\hat{s}_n = (1 + \eta_1) x_1 + (1 + \eta_2) x_2 + \cdots + (1 + \eta_n) x_n.$$

Izračunati rezultat \hat{s}_n je egzaktna suma

- malo “perturbiranih” polaznih podataka x_1, \dots, x_n ,
- s **obratnim** ili polaznim relativnim greškama η_1, \dots, η_n .

To kaže da je algoritam zbrajanja stabilan “**unatrag**”.

Pogled **unaprijed** = teorija **perturbacije** za greške η_1, \dots, η_n .

Prava greška izračunate sume je

$$\hat{s}_n - s_n = \eta_1 x_1 + \eta_2 x_2 + \cdots + \eta_n x_n.$$

Ocjena relativne greške unaprijed

Odavde slijedi

$$\begin{aligned} |\hat{s}_n - s_n| &\leq (|x_1| + \cdots + |x_n|) \cdot \max_{i=1,\dots,n} |\eta_i| \\ &\leq (|x_1| + \cdots + |x_n|) \cdot \gamma_{n-1}. \end{aligned}$$

Za relativnu grešku izračunate sume dobivamo ocjenu

$$\frac{|\hat{s}_n - s_n|}{|s_n|} \leq \frac{|x_1| + \cdots + |x_n|}{|x_1 + \cdots + x_n|} \cdot \gamma_{n-1} = \text{cond}(s_n) \cdot \gamma_{n-1},$$

gdje je

$$\text{cond}(s_n) = \frac{|x_1| + \cdots + |x_n|}{|x_1 + \cdots + x_n|}.$$

Zbrajanje brojeva istog predznaka $\Rightarrow \text{cond}(s_n) = 1$.

Poredak zbrajanja za *iste predznake*

Zbog prijelaza $|\eta_i| \leq \max_{i=1,\dots,n} |\eta_i|$, prethodna ocjena vrijedi

- za bilo koji algoritam — neovisno o poretku sumanada!

Prave obratne greške η_i , naravno, ne znamo. Međutim, znamo da za ocjene tih grešaka vrijedi:

$$|\eta_1| = |\eta_2| \leq \gamma_{n-1}, \quad |\eta_i| \leq \gamma_{n+1-i}, \quad i = 2, \dots, n,$$

tj. najveća je ocjena za prva dva sumanda x_1, x_2 , i ocjena pada kako indeksi rastu (sumandi kasnije ulaze u zbrajanja).

Kad zbrajamo brojeve istog predznaka (tj. nema kraćenja), najmanju ocjenu greške dobivamo tako da

- sumande x_i poredamo uzlazno po apsolutnoj vrijednosti!
Razlog: veće (ocjene) greške idu na manje sumande.

Pogledati primjer za parcijalne sume harmonijskog reda.