Επιστημονικός Υπολογισμός Ι

Ενότητα 4 : Μοντέλο Αριθμητικής και Σφάλματα Υπολογισμού

Ευστράτιος Γαλλόπουλος
Τμήμα Μηχανικών Η/Υ & Πληροφορικής

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Άδειες Χρήσης

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Πατρών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σκοπός Ενότητας

- Απώλεια πληροφορίας στον επιστημονικό υπολογισμό.
- Αριθμητικό μοντέλο και πρότυπο αριθμητικής κινητής υποδιαστολής IEEE.
- Σφάλματα στρογγύλευσης και διάδοσή τους.
- Σφάλματα στρογγύλευσης και διάδοσή τους.
- Δείκτες κατάστασης προβλήματος και αλγορίθμου.
- Θεωρία και εργαλεία εκτίμησης σφάλματος και ποιότητας υπολογισμών.

Περιεχόμενα

Στόχος

Στόχος

Δοθέντος του (μαθηματικού) προβλήματος $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$, και του αλγορίθμου/προγράμματος f_{prog} να εκτιμηθεί άνω φράγμα για το εμπρός σχετικό ή απόλυτο σφάλμα:

$$\text{ΣΣ:}\frac{\|f(x) - f_{\text{prog}}(x^*)\|}{\|f(x)\|}, \quad \text{ΑΣ:}\|f(x) - f_{\text{prog}}(x^*)\|$$

Εμπρός ανάλυση σφάλματος: Θεωρούμε τον αλγόριθμο ως μιά σειρά στοιχειωδών πράξεων. Σε κάθε βήμα, υπολογίζεται μία τιμή α_{k+1} με βάση προηγούμενες τιμές και στοιχεία εισόδου, π.χ. $\alpha_{k+1} = g_k(\alpha_1, \ldots, \alpha_k)$. Μερικές από τις τιμές μπορεί να είναι δεδομένα εισόδου. Στη συνέχεια, υπολογίζουμε φράγματα για τα σφάλματα στα τελικά αποτελέσματα.

Κριτική

Η ιδέα της εμπρός ανάλυσης είναι απλή, αλλά

- ... η εφαρμογή της μπορεί να είναι περίπλοκη
- ... σκληρή άσκηση σε ανισότητες
- ... τεράστιες εκφράσεις, κ.λπ.
- ΠΡΟΣΟΧΗ ... δεν αναδεικνύεται κάτι ευδιάκριτο για την ποιότητα του αλγορίθμου

Κριτική

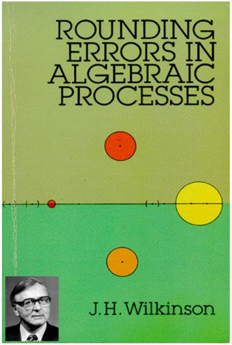
Η ιδέα της εμπρός ανάλυσης είναι απλή, αλλά

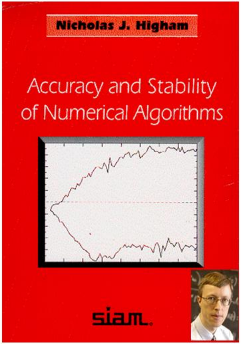
- ... η εφαρμογή της μπορεί να είναι περίπλοκη
- ... σκληρή άσκηση σε ανισότητες
- ... τεράστιες εκφράσεις, κ.λπ.
- ΠΡΟΣΟΧΗ ... δεν αναδεικνύεται κάτι ευδιάκριτο για την ποιότητα του αλγορίθμου

  Vel Kahan: ``In the 1950's almost no programmers knew how to distinguish numerical instability from ill condition. In other words, the distinction between an algorithm's hypersensitivity to its own internal rounding errors, and a true solution's hypersensitivity to roundoff-like errors in its problem's data, as contributors to wrongly computed solutions, was obscure. By the 1960s the distinction had been clarified through ``Bacwkward Error Analyses'' ....''

Βιβλία σταθμοί στη μελέτη των σφαλμάτων στρογγύλευσης

των (Βρεπανών) J.H. Wilkinson (Wil63) και N. Higham (Hig96)





J.H. Wilkinson: ``It is a matter of some surprise that one of the simplest methods of solution generally leads to an error, the expected value of which is precisely that resulting from random perturbations ... This means that when the original elements are not exactly representable ... the errors resulting from any initial rounding that may be necessary are as serious as those arising from any initial rounding from all the steps in the solution...''

Κατάσταση (**conditioning**)

Έννοιες που θα εισαγάγουμε για να μετρήσουμε την επίδραση διαταραχών και σφαλμάτων στα δεδομένα του προβλήματος και στις πράξεις α.κ.υ. επί των υπολογισμένω αποτελεσμάτων.

Κατάσταση προβλήματος: Αφορά στην ευαισθησία των αποτελεσμάτων της f ως προς μικρές διαταράξεις των στοιχείων εισόδου, και μόνο ως προς αυτές.

Κατάσταση (υλοποίησης) αλγορίθμου: Αφορά στην επίδραση της αριθμητικής πεπερασμένης ακριβειας στην υλοποίηση του αλγορίθμου (μέσω ενός προγράμματος).

Πρός τα πίσω ανάλυση - προς τα πίσω ευστάθεια

Ορισμός

Με τον γνωστό συμβολισμό, έστω ότι υπάρχει x_{prog} κοντά στο x τέτοιο ώστε $f_{\text{prog}}(x) = f(x_{\text{prog}})$. Τότε ο αλγόριθμος χαρακτηρίζεται (αριθμητικά) «προς τα πίσω ευσταθής» στο x.

Αν αυτό συμβαίνει για κάθε x στο πεδίο ορισμού της f ο αλγόριθμος αποκαλείται «προς τα πίσω ευσταθής»

> *«Ένας πίσω ευσταθής αλγόριθμος απαντά με ακρίβεια σε ένα παραπλήσιο ερώτημα.»*

Κρίσιμη παρατήρηση: Αν κατασκευάσουμε x_{prog} «κοντά» στο x ώστε αν το αποτέλεσμα που υπολογίστηκε με πράξεις α.κ.υ. είναι $z_{\text{prog}} = f_{\text{prog}}(x)$ τότε $z_{\text{prog}} = f(x_{\text{prog}})$. Τότε

$$\|z_{\text{prog}} - z\| \quad = \quad \|f_{\text{prog}}(x) - f(x)\| = \|f(x_{\text{prog}}) - f(x)\|.$$

Ιδέα

Αντί να εκτιμούμε το προς τα εμπρός σφάλμα απευθείας, εκτιμούμε πρώτα τη διαφορά $\|f(x_{\mathrm{prog}}) - f(x)\|$ που αφορά την ευαισθησία της f σε αλλαγές.
Αν υπάρχει x_{prog} ώστε το $\|x_{\mathrm{prog}} - x\|$ να είναι μικρό, τότε το πρόβλημα ανάγεται στο μαθηματικό (και όχι αριθμητικό) πρόβλημα της ευαισθησίας της f σε μικρές διαταράξεις (= perturbations) των στοιχείων εισόδου.

> *«Ρίξαμε το σφάλμα προς τα πίσω»*[1] *αναγάγοντάς το σε (εικονικές) διαταραχές των στοιχείων εισόδου. Από εκεί και πέρα δεν χρειάζεται να ασχοληθούμε με τα σφάλματα των ενδιάμεσων πράξεων!*

Η f_{prog} αποτελείται από όλες τις στοιχειώδεις πράξεις (ό,τι επηρεάζει δεδομένα α.κ.υ. του προβλήματος) και με τη σειρά που εκτελούνται από το πρόγραμμα που υλοποιεί την f.

- Δεν περιμένουμε η υλοποίηση f_{prog} να λύνει το πρόβλημα με πιστότητα αν τα δεδομένα x^* είναι κοντά σε στοιχεία όπου η f είναι «ευαίσθητη».
- Αυτό που μας ενδιαφέρει είναι η υλοποίηση της f να μην εισάγει από μόνη της «μεγάλα» σφάλματα.

[1] Θυμηθείτε το συμπέρασμα του Wilkinson!

Έχουμε ήδη συναντήσει την πίσω ευστάθεια!

Θυμηθείτε την *Αρχή Ακριβούς Στρογγύλευσης*:

> *Αν $\tilde{\odot}$ είναι η υλοποίηση της αριθμητικής πράξης $\odot$, τότε αν $x, y \in F$ ισχύει ότι*
>
> $$x \tilde{\odot} y = \mathrm{fl}(x \odot y) = (x \odot y)(1+\delta), \text{ για κάποιο } |\delta| \leq \mathbf{u}.$$

Παράδειγμα: από άμεση επαλήθευση,

$$f_{\mathrm{prog}}(x) = f(x_{\mathrm{prog}})$$

όπου

$$\begin{aligned} x &= [\xi_1, \xi_2]^\top \\ x_{\mathrm{prog}} &= [\xi_1(1+\delta), \xi_2(1+\delta)] \end{aligned}$$

και

$$\|x_{\mathrm{prog}} - x\| = \|[\xi_1\delta, \xi_2\delta]^\top\| \leq \|x\|\mathbf{u}$$

Συμπέρασμα Όλες οι απλές αριθμητικές πράξεις ικανοποιούν την αρχή ακριβούς στρογγύλευσης επομένως είναι πίσω ευσταθείς.

Αν οι x_1, x_2, x_3 είναι α.κ.υ. τότε για τον 'αλγόριθμο' $f(x) = (x_1 + x_2) + x_3$ όπου $x = [x_1, x_2, x_3]$ ισχύει ότι

$$f_{\text{prog}}(x) = (x_1 \tilde{+} x_2) \tilde{+} x_3 \quad = \quad x_1(1+\theta_2) + x_2(1+\zeta_2) + x_3(1+\delta)$$

όπου $|\theta_2||, |\zeta_2| \leq \gamma_2$ και $|\delta| \leq \mathbf{u}$.
Επομένως αν θέσουμε $x_{\text{prog}} = [x_1(1+\theta_2), x_2(1+\zeta_2), x_3(1+\delta)]$ ισχύει ταυτοτικά ότι

$$f_{\text{prog}}(x) \quad = \quad f(x_{\text{prog}}).$$

Επίσης

$$\|x - x_{\text{prog}}\| = \|[x_1\theta_2, x_2\zeta_2, x_3\delta]\|$$

Επειδή όμως για τις γνωστές νόρμες διανύσματος (όχι μητρώων) ισχύει ότι $\|x\| = \||x|\|$ τότε $\|x - x_{\text{prog}}\| \leq \gamma_2\|x\|$ άρα αν $x \neq 0$ $\frac{\|x - x_{\text{prog}}\|}{\|x\|} \leq \gamma_2$.

Συνεπώς ο αλγόριθμος (άθροισης τριών αριθμών από τα αριστερά προς τα δεξιά) είναι πίσω ευσταθής.

Παράδειγμα

Γινόμενο 3 αριθμών κ.υ. (από τα αριστερά προς δεξιά)

Αν $f(x) = (x_1 \times x_2) \times x_3$ όπου $x = [x_1, x_2, x_3]$ μπορείτε να συμπεράνετε ότι

$$f_{\text{prog}}(x) = (x_1 \tilde{\times} x_2) \tilde{\times} x_3 \quad = \quad x_1 x_2 (1 + \delta_1) x_3 (1 + \delta_2) = x_1 x_2 x_3 (1 + \theta_2)$$

όπου $|\theta_2| \leq \gamma_2$.
Επομένως αν θέσουμε $x_{\text{prog}} = [x_1, x_2, x_3(1 + \theta_2)]$ ισχύει ταυτοτικά ότι

$$f_{\text{prog}}(x) \quad = \quad f(x_{\text{prog}}).$$

Επίσης (ένα χαλαρό άνω φράγμα)

$$\|x - x_{\text{prog}}\| = \|[0, 0, x_3\theta_2]\| \leq \gamma_2 \|x\|.$$

άρα αν $x \neq 0$ $\frac{\|x - x_{\text{prog}}\|}{\|x\|} \leq \gamma_2$.

Ο αλγόριθμος (πολλαπλασιασμού τριών αριθμών από τα αριστερά προς τα δεξιά) είναι πίσω ευσταθής.

Παράδειγμα (συνέχεια)

<u>ΠΡΟΣΟΧΗ</u> Μπορείτε εύκολα να διαπιστώσετε ότι υπάρχουν και άλλα x_{prog} για τα οποία να ισχύει το ζητούμενο $f_{\text{prog}}(x) = f(x_{\text{prog}})$.

<u>Προσέξτε</u> Όλα τα παρακάτω διανύσματα μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως x_{prog}:

$$[x_1, x_2, x_3(1+\theta_2)], [x_1, x_2(1+\theta_2), x_3], [x_1(1+\theta_2), x_2, x_3],$$

καθώς επίσης και

$$[x_1, x_2\sqrt{1+\theta_2}, x_3\sqrt{1+\theta_2}], [x_1\sqrt{1+\theta_2}, x_2\sqrt{1+\theta_2}, x_3],$$

καθώς επίσης και

$$[x_1(1+\theta_2)^{1/3}, x_2(1+\theta_2)^{1/3}, x_3(1+\theta_2)^{1/3}], \ldots$$

όπως βλέπετε, μπορεί να υπάρχουν άπειρες επιλογές!

> *Μπορούμε επομένως να αναζητήσουμε την καλύτερη (δηλ. πλησιέστερη στο x)*

αλλά συχνά αρκούμαστε σε κάποιο x_{prog} που είναι αρκούντος κοντά στο x και αφήνουμε τα περαιτέρω για τους ερευνητές!!!

Παρατηρήσεις

- Προσοχή: Όταν λέμε ότι

  υπολογισμός *είναι* **«προς τα πίσω ευσταθής»**

  πρόκειται για κάτι που αφορά αποκλειστικά το συγκεκριμένο πρόγραμμα υπολογισμού.
- Επίσης συχνά απλουστεύουμε και δεν διακρίνουμε τον αλγόριθμο από το πρόγραμμα που τον υλοποιεί.
- Επομένως για ένα υπολογιτικό πρόβλημα μπορεί κάποιοι αλγόριθμοι επίλυσης να είναι πίσω ευσταθείς και άλλοι όχι.
- Προσοχή: ένας αλγόριθμος που δεν μπορεί να αποδειχτεί ότι είναι πίσω ευσταθής δεν συνεπάγεται αυτόματα ότι είναι αναξιόπιστος.
- Ποσοτικοποίηση: ανάμεσα σε όσους μπορούμε να δείξουμε ότι είναι πίσω ευσταθείς, μπορεί να υπάρχει διαφορά ως προς το πόσο πίσω ευσταθείς είναι.
- Μετράμε την «πίσω ευστάθεια» με το **πίσω σφάλμα** και το **δείκτη κατάστασης του αλγορίθμου**.

«Δείκτης κατάστασης αλγορίθμου» και μέτρηση πίσω σφάλματος

Ορισμός

Έστω ότι ένας αλγόριθμος (πρόγραμμα) f_{prog} αποδείχθηκε ότι είναι πίσω ευσταθής.

1. Ο δείκτης κατάστασης του αλγορίθμου f_{prog} συμβολίζεται $\mathrm{cond}(f_{\mathrm{prog}})$ και είναι η μικρότερη τιμή (το *ελάχιστο άνω φράγμα*) για την οποία

$$\frac{\|x - x_{\mathrm{prog}}\|}{\|x\|} \leq \mathrm{cond}(f_{\mathrm{prog}})\mathbf{u}.$$

   για όλα τα δυνατά x_{prog}.
2. Το $\frac{\|x - x_{\mathrm{prog}}\|}{\|x\|}$ είναι το πίσω σφάλμα στο x.
3. Το $\mathrm{cond}(f_{\mathrm{prog}})\mathbf{u}$ είναι το πίσω σφάλμα για όλο το πεδίο ορισμού της f.

«Από πίσω προς τα μπρος !»

Έστω ότι ένας αλγόριθμος είναι «προς τα πίσω ευσταθής.»

Είναι αρκετό για να συμπεράνουμε ότι το (προς τα εμπρός) σφάλμα είναι μικρό;

Αφού είναι προς τα πίσω ευσταθής, υπάρχει x_{prog} κοντά στο x ώστε $f_{\mathrm{prog}}(x) = f(x_{\mathrm{prog}})$. Επομένως

$$\|f_{\mathrm{prog}}(x) - f(x)\| = \|f(x_{\mathrm{prog}}) - f(x)\|$$

Για να δείξουμε ότι το προς τα εμπρός σφάλμα είναι μικρό θα πρέπει να φράξουμε το $\|f(x_{\mathrm{prog}}) - f(x)\|$ δεδομένου του άνω φράγματος του $\|x_{\mathrm{prog}} - x\|$ που προϋποθέτει η προς τα πίσω ευστάθεια.
Προσοχή: Η απόσταση $\|f(x_{\mathrm{prog}}) - f(x)\|$ εξαρτάται από την απόσταση $\|x_{\mathrm{prog}} - x\|$ και την ευαισθησία ή μεταβλητότητα της f.

Κατάσταση προβλήματος

- Για μερικές κατηγορίες προβλημάτων, η απόλυτη ή σχετική απόσταση μεταξύ των $f(x^*)$ και $f(x)$ μπορεί να είναι μεγάλη ακόμα και όταν $x^* \approx x$.
- άρα το f είναι πολύ ευαίσθητο για μικρές αλλαγές σε τιμές εισόδου περί το x.
- Αυτό το γεγονός είναι ανεξάρτητο των σφαλμάτων στρογγύλευσης.

Τότε λέμε ότι

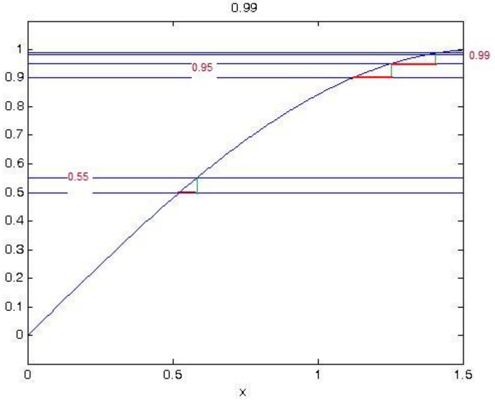
η κατάσταση του προβλήματος είναι κακή κοντά στο x.

- Πώς ποσοτικοποιούμε τον παραπάνω ποιοτικό χαρακτηρισμό;
- Χρειαζόμαστε μετρητές που ονομάζονται δείκτες κατάστασης.

Παράδειγμα

Υπολογισμός σημείου τομής της γραμμής $y = \sin(x)$ με το ευθύγραμμο τμήμα $y = c$ όπου $c \in [0, 1]$ και $x \in [0, \pi/2]$.

Πρόβλημα ευαισθησίας: Πόσο μετακινείται το σημείο τομής αν μετακινηθεί λίγο η ευθεία $y = c$; (πολύ, λίγο, είναι παντού το ίδιο;)



Έστω $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ και ότι υπολογίζουμε το $y := f(x)$. Αν στην είσοδο χρησιμοποιηθεί το $x^* = x + \Delta x$ (λόγω σφαλμάτων στρογγύλευσης ή εισόδου), ακόμα και αν δεν προέκυπτε κανένα σφάλμα κατά τη διάρκεια του υπολογισμού της f, το αποτέλεσμα θα είναι $\tilde{y} = f(x + \Delta x)$.
Τότε

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

αν τα $f, f^{'}, f^{''}$ υπάρχουν και είναι συνεχείς περί το $(x, x + \Delta x)$. Αν η παράγωγος $f^{'}(x)$ είναι μεγάλη, το σφάλμα μπορεί να είναι μεγάλο.

Για να λάβουμε υπόψη μας και το μέγεθος των δεδομένων, γράφουμε

$$\frac{\tilde{y} - y}{y} = \boxed{\frac{f'(x)x}{f(x)}} \frac{\Delta x}{x} + O((\Delta x)^2)$$

- Το $\left|\frac{f'(x)x}{f(x)}\right|$ αποκαλείται **σχετικός ασυμπτωτικός δείκτης κατάστασης•** της f στο x.
- ... καθορίζει τη σχετική αλλαγή στο αποτέλεσμα y που οφείλεται σε σχετικά μικρές αλλαγές του x.

Παρατηρήσεις:

- Ο δείκτης είναι το γινόμενο τριών στοιχείων και το μέγεθός του εξαρτάται από τον τρόπο που συνδυάζονται μεταξύ τους. π.χ. θα είναι μεγάλος αν $|f'(x)x| \gg |f(x)|$.
- Ο δείκτης εξαρτάται συνήθως από το x: Για μία περιοχή του πεδίου ορισμού ο δείκτης μπορεί να είναι μεγάλος ενώ για άλλη να είναι αποδεκτός.

Παραδείγματα συναρτήσεων

... όλα με το $x \in \mathbb{R}$ και τέτοιο ώστε $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$

$f(x)$	$\left\lvert \frac{f'(x)x}{f(x)} \right\rvert$
x^k	k
$x^k - 1$	$\left\lvert k\frac{x^k}{x^k-1} \right\rvert$
e^x	$\lvert x \rvert$
$\ln x$	$\left\lvert \frac{1}{\ln x} \right\rvert$

Ασυμπτωτικός δείκτης κατάστασης (Rice' 66)

Έστω δύο νορμισμένοι γραμμικοί χώροι X, Y και η απεικόνιση $f : \Omega \subset X \to Y$, όπου $\mathcal{D}$ είναι ανοικτό χωρίο. Έστω x σταθερό και η τιμή $y := f(x)$. Υποθέτουμε ότι τα x, y δεν είναι τα μηδενικά στοιχεία των X, Y. Ο *ασυμπτωτικός σχετικός δείκτης κατάστασης* της απεικόνισης f στο x ως προς μικρές αλλαγές του x ορίζεται ως

$$\mathrm{cond}(f; x) := \lim_{\delta \to 0} \sup_{\|h\|=\delta} \left\{ \frac{\frac{\|f(x+h)-f(x)\|}{\|f(x)\|}}{\frac{\|h\|}{\|x\|}} \right\}$$

εφόσον το όριο υπάρχει.

Παρατηρήσεις

Ο δείκτης είναι

σχετικός γιατί περιγράφει τη σχετική αλλαγή στο $f(x)$ για σχετικές αλλαγές του x.

ασυμπτωτικός γιατί αφορά την αλλαγή στο f για απειροστικές αλλαγές στο x.

Όταν $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned}
\mathrm{cond}(f;x) &= \lim_{h\to 0}\left\{\frac{\frac{|f(x+h)-f(x)|}{|f(x)|}}{\frac{|h|}{|x|}}\right\} \\
&= \lim_{h\to 0}\left\{\frac{|f(x+h)-f(x)|}{|h|}\frac{|x|}{|f(x)|}\right\} \\
&= |f'(x)|\frac{|x|}{|f(x)|}
\end{aligned}$$

όπως ορίσαμε και προηγουμένως.

Λεπτομερής μέτρηση ευαισθησίας συνάρτησης

Ιακωβιανό μητρώο

Το $J = [\frac{\partial f_i}{\partial \xi_j}] \in \mathbb{R}^{m \times n}$ αποκαλείται Ιακωβιανό μητρώο[α΄] της f στο x.

[α΄] γενίκευση της 1ης παραγώγου για συναρτήσεις πολλών μεταβλητών.

Δείκτες ευαισθησιας

Αν η f είναι διαφορίσιμη στο $x = (\xi_1, \ldots, \xi_m)^\top$, οι mn παράγοντες

$$\kappa_{ij} = \frac{\left|\xi_j \frac{\partial f_i}{\partial \xi_j}\right|}{|f_i(x)|}$$

δείχνουν την ευαισθησία των συνιστωσών της f ως προς διαταραχές των στοιχείων x.

Ειδικές περιπτώσεις: Αν $x = 0, f(x) = 0$ χρησιμοποιούμε ως δείκτη το $|f'(x)|$.

Δείκτες κατάστασης κοινών (βαθμωτών) συναρτήσεων

Συνοπτικοί δείκτες: Συνοπτικές μορφές που προκύπτουν χρησιμοποιώντας νόρμες.

Άθροισμα n αριθμών	$\dfrac{\sum_{j=1}^{n} \lvert\xi_j\rvert}{\lvert\sum_{j=1}^{n} \xi_j\rvert}$
Εσωτερικό γινόμενο	$\dfrac{2\sum_{j=1}^{n} \lvert\xi_j\psi_j\rvert}{\lvert\sum_{j=1}^{n} \xi_j\psi_j\rvert}$
Τιμή πολυωνύμου σε μορφή δύναμης	$\dfrac{\sum_{j=1}^{n} \lvert\alpha_j\rvert\lvert x^j\rvert}{\lvert\sum_{j=1}^{n} \alpha_j x^j\rvert}$
Απλή ρίζα πολυωνύμου σε μορφή δύναμης	$\dfrac{\sum_{j=1}^{n} \lvert\alpha_j\rvert\lvert\xi^j\rvert}{\lvert\xi p'(\xi)\rvert}$

Παράδειγμα

Έστω $f(\xi_1, \xi_2) = \xi_1 - \xi_2$. Τότε $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ και $\frac{\partial f}{\partial x} = [1, -1]$

$$\begin{aligned} \frac{|f(x+\Delta x) - f(x)|}{|f(x)|} &= \frac{|((\xi_1 + \Delta\xi_1) - (\xi_2 + \Delta\xi_2)) - (\xi_1 - \xi_2)|}{|\xi_1 - \xi_2|} \\ &= \frac{|\Delta\xi_1 - \Delta\xi_2|}{|\xi_1 - \xi_2|} \end{aligned}$$

Ο παράγοντας μπορεί να γίνει πολύ μεγάλος αν $|f(\xi_1, \xi_2)| = |\xi_1 - \xi_2|$ είναι πολύ μικρό.

Αυτό είναι που ονομάσαμε καταστροφική απαλοιφή

Η αφαίρεση ομόσημων αριθμών που είναι πολύ κοντά μεταξύ τους οδηγεί σε ανάδειξη και μεγέθυνση του σφάλματος που περιέχεται στον κάθε ένα.

Δείκτης κατάστασης αλγορίθμου $\mathrm{cond}(f_{\mathrm{prog}})$ είναι είναι η μικρότερη τιμή (το *ελάχιστο άνω φράγμα*) για την οποία

$$\frac{\|x - x_{\mathrm{prog}}\|}{\|x\|} \leq \mathrm{cond}(f_{\mathrm{prog}})\mathbf{u}.$$

για όλα τα δυνατά x_{prog}. Το $\frac{\|x-x_{\mathrm{prog}}\|}{\|x\|}$ είναι το πίσω σφάλμα στο x.

Δείκτης κατάστασης προβλήματος

$$\mathrm{cond}(f;x) = \lim_{\delta\to 0} \sup_{\|h\|=\delta} \left\{ \frac{\frac{\|f(x+h)-f(x)\|}{\|f(x)\|}}{\frac{\|h\|}{\|x\|}} \right\}$$

ΠΡΟΣΟΧΗ: Στη συνέχεια θα χρησιμοποιήσουμε το **πίσω σφάλμα** και το **δείκτη κατάστασης προβλήματος** για να εκτιμήσουμε το πίσω σφάλμα.

$$\frac{\|f_{\mathrm{prog}}(x^*) - f(x)\|}{\|f(x)\|} = \frac{\|f(x^*_{\mathrm{prog}}) - f(x)\|}{\|f(x)\|} \le \frac{\|f(x^*_{\mathrm{prog}}) - f(x^*)\|}{\|f(x)\|} + \frac{\|f(x^*) - f(x)\|}{\|f(x)\|}.$$

Εξετάζουμε και φράζουμε τον κάθε όρο ξεχωριστά:

$$\frac{\|f(x^*_{\mathrm{prog}}) - f(x^*)\|}{\|f(x)\|} \le \frac{\|f(x^*_{\mathrm{prog}}) - f(x^*)\|}{\|f(x^*)\|}\frac{\|f(x^*)\|}{\|f(x)\|} \le \mathrm{cond}(f;x^*)\frac{\|x^* - x^*_{\mathrm{prog}}\|}{\|x^*\|}\frac{\|f(x^*)\|}{\|f(x)\|} \le \mathrm{cond}(f;x^*)\mathrm{cond}(f_{\mathrm{prog}})\mathbf{u}\frac{\|f(x^*)\|}{\|f(x)\|}.$$

και εξ ορισμού

$$\frac{\|f(x^*) - f(x)\|}{\|f(x)\|} \leq \mathrm{cond}(f;x)\frac{\|x^* - x\|}{\|x\|} \leq \mathrm{cond}(f;x)\mathcal{E}$$

όπου

$$\frac{\|x^* - x\|}{\|x\|} \leq \mathcal{E}$$

Επομένως

$$\frac{\|f_{\mathrm{prog}}(x^*) - f(x)\|}{\|f(x)\|} \leq \mathrm{cond}(f;x^*)\mathrm{cond}(f_{\mathrm{prog}})\mathbf{u}\frac{\|f(x^*)\|}{\|f(x)\|} + \mathrm{cond}(f;x)\mathcal{E}$$

Χονδρικά, όταν ο παράγοντας $\mathcal{E}$ είναι μικρός και $\frac{\|f(x^*)\|}{\|f(x)\|} \approx 1$, έχουμε τη σχέση:

$$\boxed{\text{προς τα εμπρός σφάλμα} < \text{δείκτης κατάστασης πρβλ.} \times \text{πίσω σφάλμα}}$$

Βιβλιογραφία I

W. Gautschi.
Numerical Analysis: An Introduction.
Birkhauser, Boston, 1997.

N.J. Higham.
Accuracy and Stability of Numerical Algorithms.
SIAM, Philadelphia, 1996.

Ε. Γαλλόπουλος.
Επιστημονικός Υπολογισμός Ι.
Πανεπιστήμιο Πατρών, 2008.

J.H. Wilkinson.
Rounding Errors in Algebraic Processes.
Dover, 1994 (First published in 1963).

Χρήση Έργου Τρίτων I

1. http://ecx.images-amazon.com/images/I/41YCGH90JBL._SY344_BO1,204,203,200_.jpg (βλ. σελ 7)
2. http://www.npl.co.uk/upload/img/jim-wilkinson.jpg (βλ. σελ 7)
3. http://i.bookfi.org/covers/8000/1ac57943ebbd5b81cc27a539ad62972d-d.jpg (βλ. σελ 7)
4. http://www.ma.man.ac.uk/ higham/graphics/nick-higham.jpg (βλ. σελ 7)

Σημείωμα Αναφοράς

Τέλος Ενότητας

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ