Computación Científica

Yarko Niño C. y Paulo Herrera R.

Departamento de Ingeniería Civil, Universidad de Chile

Semestre Primavera 2011

Anuncio

- Charla "Programa de estudiantes PRDW-AV 2012"
  - Lugar: Sala G107
  - Hora: 12 hrs.
  - Fecha: Miércoles 02 de noviembre.

- Seminario RHMA
  - Lugar: Sala G302
  - Hora: 13:15 hrs.
  - Fecha: Todos los lunes.

Resumen de clases anteriores

- Procesos físicos de interés en ingeniería hidráulica y ambiental son modelados por ecuaciones diferenciales parciales (EDPs) de segundo orden.

- Esas EDPs admiten solución analítica en muy pocos casos. En general, sólo para casos lineales con coeficientes constantes, etc.

- Entonces, en la mayoría de los casos debemos calcular la solución a través de métodos numéricos.

Computación Científica:
"Diseño y análisis de algoritmos para resolver numéricamente problemas matemáticos en ciencia e ingeniería."

También se le conoce como **Anális Numérico**.

Sus principales objetivos son la simulación de fenómenos físicos y el diseño de prototipos o productos.

Problema "Bien Puesto"

Solución,

- existe.
- es única.
- depende en forma continua de las condiciones iniciales y de borde.

Esto **no garantiza** que la solución no sea sensible a los datos de entrada.

Algoritmos **no deben acentuar la** *sensibilidad* del problema

$\rightarrow$ resolver un problema más fácil o simple.

Fuentes de Errores

Antes de calcular:

- modelamiento matemático, (qué ecuaciones?).
- mediciones de parámetros.
- cálculos previos.

Durante el cálculo:

- errores de truncación o discretización.
- errores de redondeo.

Calidad del resultado final **depende de todas estas fuentes de errores**.

Errores en los datos de entrada **pueden ser amplificados durante el cálculo**.

Perturbaciones durante el cálculo **pueden ser amplificados por ciertos algoritmos** numéricos.

Ejemplo: Superficie de la Tierra

Calcular la superficie de la Tierra asumiendo que es una esfera,

$$A = 4\pi r^2$$

Ejemplo: Superficie de la Tierra

Calcular la superficie de la Tierra asumiendo que es una esfera,

$$A = 4\pi r^2$$

Fuentes de errores:

- Tierra no es exactamente esférica.
- Valor del radio basado en mediciones externas.
- Valor para π deber ser truncado.
- Cómputos en calculadora o PC deben ser redondeados.

Error de entrada y computacional

Problema: Dada una entrada x, calcule el valor de la función $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.

Sin embargo, muchas veces la verdadera entrada x es **aproximada** por una entrada $\hat{x}$ y la función f es **aproximada** por una función $\hat{f}$, de tal forma que el error total es,

$$\begin{aligned} \hat{f}(\hat{x}) - f(x) &= \left[\hat{f}(\hat{x}) - f(\hat{x})\right] + [f(\hat{x}) - f(x)] \\ &= [\text{error computacional}] + [\text{error propagado de entrada}] \end{aligned} \tag{1}$$

Algoritmo afecta **sólo error computacional**.

Errores de truncación y redondeo

Error de Truncación: Diferencia entre resultado verdadero y resultado producido por un algoritmo que usa *aritmética exacta*.
Por ejemplo, truncar una serie infinita para aproximar una función.

Error de Redondeo: Diferencia entre resultados producidos por el mismo algoritmo usando aritmética exacta y aritmética con limitada precisión.
Este error es debido a la representación de números reales en computadores, que tiene limitada precisión.

Error Computational $=$ Error de Truncación $+$ Error de Redondeo.

Generalmente, uno de los dos domina.

Ejemplo: Aproximación por Diferencias Finitas

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)h^2}{2} + \dots$$

Aproximación de primer orden:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h^2)$$

Error de truncación acotado por: $Mh/2$, donde $M \geq |f''(t)|$ para t cerca de x.

Error de redondeo acotado por $2\epsilon/h$, donde error en la evaluación de la función es acotado por ϵ.

Error de redondeo aumenta cuando h disminuye. Por otro lado, error de truncación aumenta cuando h aumenta.

Sensibilidad

Problema no es sensible o es bien condicionado, si cambios en los datos de entrada producen diferencias en los resultados del mismo orden de magnitud.

Problema es sensible o es mal condicionado, si cambios en los datos de entrada producen diferencias muy grandes en los resultados.
Número de condicionamiento (*conditioning number*):

$$\begin{aligned} \text{cond} &= \frac{|\text{cambio relativo en la solucion}|}{|\text{cambio relativo en los datos de entrada}|} \\ &= \frac{|[f(\hat{x}) - f(x)]\,/f(x)|}{|[\hat{x} - x]\,/x|} \end{aligned} \tag{2}$$

Problema es **mal condicionado** si

$$\text{cond} \gg 1$$

Ejemplo: Evaluación de una función

PROBLEMA: Evaluar f para datos de entrada aproximados $x + \Delta x$.

Entonces el error absoluto puede ser aproximado como,

$$f(x + \Delta x) - f(x) \approx f'(x)\Delta x$$

y el error relativo es

$$\frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{f(x)} \approx \frac{f'(x)\Delta x}{f(x)}$$

y,

$$\mathrm{cond} \approx \left| \frac{f'(x)\Delta x / f(x)}{\Delta x / x} \right| = \frac{x f'(x)}{f(x)}$$

El valor de cond depende de la forma de la función f y del valor x.

Ejemplo: Función mal condicionada

Sea $f(x) = \tan x$ y $f'(x) = \sec^2(x) = 1 + \tan^2(x)$.

Entonces,

$$\mathrm{cond} \approx \left|\frac{xf'(x)}{f(x)}\right| = \left|\frac{x\left(1 + \tan^2(x)\right)}{\tan(x)}\right|$$

Ejemplo: Función mal condicionada

Sea $f(x) = \tan x$ y $f'(x) = \sec^2(x) = 1 + \tan^2(x)$.

Entonces,

$$\mathrm{cond} \approx \left| \frac{x f'(x)}{f(x)} \right| = \left| \frac{x\left(1 + \tan^2(x)\right)}{\tan(x)} \right|$$

$$\mathrm{cond} \approx \left| x \left(\frac{1}{\tan(x)} + \tan(x) \right) \right|$$

Entonces, para $x = \pi/2$, $\mathrm{cond} \to \infty$

Ejemplo: Función mal condicionada

Sea $f(x) = \tan x$ y $f'(x) = \sec^2(x) = 1 + \tan^2(x)$.

Entonces,

$$\mathrm{cond} \approx \left| \frac{xf'(x)}{f(x)} \right| = \left| \frac{x\left(1 + \tan^2(x)\right)}{\tan(x)} \right|$$

$$\mathrm{cond} \approx \left| x \left(\frac{1}{\tan(x)} + \tan(x) \right) \right|$$

Entonces, para $x = \pi/2$, $\mathrm{cond} \to \infty$
Por ejemplo,

$$\tan(1,57079) \approx 1,58058 \cdot 10^5$$

$$\tan(1,57078) \approx 6,12490 \cdot 10^4$$

Ejemplo: Función mal condicionada

Sea $f(x) = \tan x$ y $f'(x) = \sec^2(x) = 1 + \tan^2(x)$.

Entonces,

$$\mathrm{cond} \approx \left| \frac{xf'(x)}{f(x)} \right| = \left| \frac{x\left(1 + \tan^2(x)\right)}{\tan(x)} \right|$$

$$\mathrm{cond} \approx \left| x \left(\frac{1}{\tan(x)} + \tan(x) \right) \right|$$

Entonces, para $x = \pi/2$, $\mathrm{cond} \to \infty$
Por ejemplo,

$$\tan(1,57079) \approx 1,58058 \cdot 10^5$$

$$\tan(1,57078) \approx 6,12490 \cdot 10^4$$

Entonces, para $x = 1,57079$, $\mathrm{cond} = 2,48275 \cdot 10^5$

Estabilidad

Estabilidad de un algoritmo es análoga a la sensibilidad de un problema.

Un **algoritmo es estable** si su resultado es relativamente insensible a perturbaciones durante el cálculo.

Para un algoritmo estable, **el error computacional no es peor que el error en los datos de entrada**.

Precisión

Precisión expresa la **proximidad de la solución computada a la verdadera solución** del problema.

Estabilidad $\not\Rightarrow$ precisión.

Precisión depende de la estabilidad del algoritmo y de la sensibilidad del problema.

Falta de precisión puede deberse a:

- usar un algoritmo estable para resolver un problema mal condicionado, o
- a resolver un problema bien condicionado con un algoritmo inestable.

Precisión requiere aplicar un algoritmo estable a un problema bien condicionado.

Números de Coma Flotante

Sistema de números de coma flotante representado por cuatro números enteros:

β	base o radix
p	precisión
$[L, U]$	rango de exponentes

Número x representado como:

$$x = \pm \left(d_0 + \frac{d_1}{\beta} + \frac{d_2}{\beta^2} + \ldots + \frac{d_{p-1}}{\beta^{p-1}} \right) \beta^E$$

con

$0 \leq d_i \leq \beta - 1, \qquad i = 0, \ldots, p-1, \text{ y } \quad L \leq E \leq U$

- $d_0 d_1 \ldots d_{p-1}$ es la **mantissa**.
- $d_1 d_2 \ldots d_{p-1}$ es la **fracción**.
- E es el **exponente**.

Sistemas de Números de Coma Flotante

Gran mayoría de computadores usan sistema binario ($\beta = 2$), pero con distintos parámetros:

Sistema	β	p	L	U
IEEE SP	2	24	-126	127
IEEE DP	2	53	-1022	1023
Cray	2	48	-16383	16384
Calculadora HP	10	12	-499	499

IEEE es el estándar actual implementado en la mayoría de computadores personales y servidores.

Normalización

Un sistema de números de coma flotante es **normalizado** si el primer dígito d_0 **es cero sólo si el número representado es 0**.

En un sistema normalizado la mantissa m de un número distinto de cero siempre satisface

$$1 \leq m \leq \beta$$

Ventajas de normalización:

- representación de cada número es única.
- no es necesario utilizar dígitos para representar ceros al comienzo del número.

Propieades de Sistemas de Coma Flotante

Un sistema de números de coma flotante es **discreto y finito**.

Número máximo de números normalizados de coma flotante:

$$2(\beta - 1)\beta^{p-1}(U - L + 1) + 1$$

Menor número posible de representar:

$$\text{underflow level} = UFL = \beta^{L}$$

Mayor número posible de representar:

$$\text{overflow level} = OFL = \beta^{U+1}\left(1 - \beta^{-p}\right)$$

No todos los números reales son representales en un sistema de números de coma flotante. Los que lo son, son conocidos como **números de máquina** (*machine numbers*).

Ejemplo: UFL y OFL

Asuma sistema de números de coma flotante con $\beta = 2$, $p = 3$, $L = -1$, y $U = 1$, entonces:

$$UFL = \beta^L$$

Ejemplo: UFL y OFL

Asuma sistema de números de coma flotante con $\beta = 2$, $p = 3$, $L = -1$, y $U = 1$, entonces:

$$UFL = \beta^{L} = 0.5$$

$$OFL = \beta^{U+1}\left(1 - \beta^{-p}\right)$$

Ejemplo: UFL y OFL

Asuma sistema de números de coma flotante con $\beta = 2$, $p = 3$, $L = -1$, y $U = 1$, entonces:

$$UFL = \beta^{L} = 0.5$$

$$OFL = \beta^{U+1}\left(1 - \beta^{-p}\right) = 3.5$$

$$NMAX = 2(\beta - 1)\beta^{p-1}(U - L + 1) + 1$$

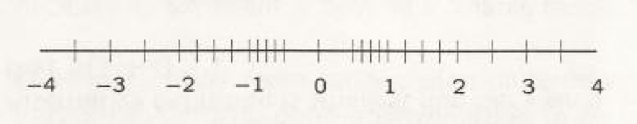
Ejemplo: UFL y OFL

Asuma sistema de números de coma flotante con $\beta = 2$, $p = 3$, $L = -1$, y $U = 1$, entonces:

$$UFL = \beta^{L} = 0.5$$

$$OFL = \beta^{U+1}\left(1 - \beta^{-p}\right) = 3.5$$

$$NMAX = 2(\beta - 1)\beta^{p-1}(U - L + 1) + 1 = 25$$



Sistemas de números de coma flotante son discretos con espaciamiento desigual.

Reglas de redondeo

Si un número real **no es exactamente representable**, entonces deber ser aproximado por un **número cercano**.

Proceso de aproximación llamado **redondeo**.

Las dos reglas de redondeo más comunes son:

- **truncar** (*chop*): cortar expansión en base-β después de $p-1$ dígitos. También se llama **redondeo hacia el cero**.
- **rendondear a más próximo** (*round to nearest*): la representación $\mathrm{fl}(x)$ es el número más cercano a x. Se usa un número de coma flotante cuyo último dígito es par en caso de empate (*round to even*).

Ejemplo: Redondeo y truncación

Ejemplos:

Número	Truncar	Redondear
1,649	1,6	1,6
1,650	1,6	1,6
1,651	1,6	1,7
1,699	1,6	1,7

Redondeo es más preciso que truncación, por lo que es el método estándar en el sistema IEEE (*Institute of Electrical and Electronics Engineers*).

NOTA: Más detalles acerca del sistema IEEE en:
http://en.wikipedia.org/wiki/IEEE_754-2008

Precisión de la máquina

Precisión de la máquina (*machine precision, o machine epsilon*), ϵ_{mach}, representa la precisión de un sistema de números de coma flotante.

- **Truncación**: $\epsilon_{mach} = \beta^{1-p}$
- **Redondeo**: $\epsilon_{mach} = \frac{1}{2}\beta^{1-p}$

Definición alternativa: Menor número ϵ, tal que

$$(1 + \epsilon) > 1$$

El máximo error relativo para representar un número x es,

$$\left| \frac{\mathrm{fl}(x) - x}{x} \right| \leq \epsilon_{mach}$$

Ejemplo: Precisión de la máquina

Para sistema de números de coma flotante con $\beta = 2$, $p = 3$, $L = -1$, y $U = 1$, entonces:

- $\epsilon_{mach} = 0,25$ para truncación.
- $\epsilon_{mach} = 0,125$ para redondeo.

Ejemplo: Precisión de la máquina

Para sistema de números de coma flotante con $\beta = 2$, $p = 3$, $L = -1$, y $U = 1$, entonces:

- $\epsilon_{mach} = 0,25$ para truncación.
- $\epsilon_{mach} = 0,125$ para redondeo.

Para sistema IEEE

- $\epsilon_{mach} = 2^{-24} = 10^{-7}$ para precisión simple (SP).
- $\epsilon_{mach} = 2^{-53} = 10^{-16}$ para precisión doble (DP).