CS381: Numerical Computation & Softwares

Error Analysis

Jakramate Bootkrajang

Department of Computer Science

Chiang Mai University

Quote of the day

"Theory is the first term in the Taylor series of practice"

- Thomas M. Cover -

เป้าหมาย

เนื้อหาในบทนี้เราจะเรียนรู้เกี่ยวกับ

- ความจริงที่ว่าคอมพิวเตอร์สามารถเก็บตัวเลขที่มีความละเอียดจำกัดเท่านั้น
- มาตรฐาน IEEE สำหรับการเก็บตัวเลขแบบมีทศนิยมในคอมพิวเตอร์
- Numerical errors and condition numbers

การคำนวณทางวิทยาศาสตร์บนคอมพิวเตอร์

การคำนวณพื้นฐานดังตัวอย่างเหล่านี้ถูกใช้เป็นประจำ

- Example 1: $8 + 8 = 16$?
- Example 2: $(\sqrt{5})^2 = 5$?
- Example 3: $1.1 + 0.1 = 1.2$?

ถามว่า ฝั่งซ้ายของสมการเท่ากันกับฝั่งขวาของสมการหรือไม่ ตามหลักการแล้วมันควรจะเท่ากัน

ลองทำใน JULIA ดู

Let's try this with JULIA:

julia> $(1.1 + 0.1) == 1.2$	julia> $1.1 + 0.1$
false	1.2000000000000002

Problem: numerical error: $\approx 2 * 10^{-16}$.

Why ?

การกระทำทางคณิตศาสตร์ทำโดยบวกลบบิทที่เป็นตัวแทนของตัวเลข

ไม่ได้เอาตัวเลขบวกลบกันโดยตรง

Number representation in a computer

- จำนวนเต็ม (Integers)
  - A number that can be written without a fractional component, e.g., 1, -5 ,0 102
  - คอมพิวเตอร์เก็บจำนวนเต็มโดยแปลงตัวเลขให้อยู่ในรูปของเลขฐาน 2 โดยตรง
- จำนวนที่อยู่ในรูปของทศนิยม (floating-point numbers)
  - เก็บในรูปแบบของ Scientific notation ได้แก่ $0.xxx \times B^e$
  - จำเป็นต้องมีมาตรฐานในการจัดเก็บตัวเลขเหล่านี้ (IEEE standard)
- Try this in JULIA: bits(3) and bits(3.0) — ฟังก์ชัน bits() ใช้เรียกดู number representation ในหน่วยความจำ

IEEE standard for Floating Point Numbers

IEEE standard for double-precision (64 bits) floating point numbers:

$$x = \pm(1+m)\cdot 2^{e} \quad \text{with} \quad m = \sum_{i=1}^{52} m_i 2^{-i} \quad \text{and} \quad e = \sum_{i=0}^{10} c_i 2^{i} - \bar{c}$$

m เรียกว่า mantissa และ e เรียกว่า exponent

เนื้อที่หน่วยความจำที่ต้องใช้ในการเก็บตัวเลข:

- 1 bit สำหรับเครื่องหมาย ค่าบวกแทนด้วยเลข 0 ค่าลบแทนด้วยเลข 1
- 11 bits สำหรับ exponent; $\bar{c}$ เรียกว่า offset มีค่าเท่ากับ 1023
- 52 bits สำหรับ mantissa

รวมทั้งหมด $1 + 11 + 52 = 64$ bits หรือ 8 bytes.

Floating Point Numbers

IEEE standard for double-precision floating point numbers:

$$x = \pm(1+m)\cdot 2^{e} \quad \text{with} \quad m = \sum_{i=1}^{52} m_i 2^{-i} \quad \text{and} \quad e = \sum_{i=0}^{10} c_i 2^{i} - \bar{c}\,,$$

Example:

```
julia>bits(3.0)
0100000000001000000000000000000000000000000000000000000000000000
```

The number 3.0 is represented as $+(1+1*2^{-1})*2^{1*2^{10}-1023}$.

A closer look at the example

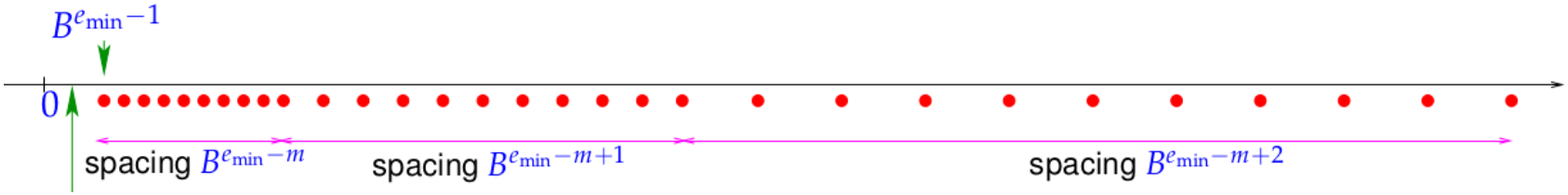
```
julia>bits(1.1)
"0011111111110001100110011001100110011001100110011001100110011010"
julia>bits(0.1)
"0011111110111001100110011001100110011001100110011001100110011010"
julia>bits(1.2)
"0011111111110011001100110011001100110011001100110011001100110011"
julia>bits(1.1+0.1)
"0011111111110011001100110011001100110011001100110011001100110100"
```

Some properties of (double-precision) floating point numbers

$$x = \pm(1 + m) \cdot 2^e$$

- เนื่องจากจำนวนบิทมีจำกัด คอมพิวเตอร์สามารถแสดงค่าตัวเลขได้บางตัวเท่านั้น
  - เซทของค่าที่แสดงได้ $\mathbb{M}$ เป็นเซทย่อยของเซทของจำนวนจริง $\mathbb{M} \subset \mathbb{R}$
- ขอบเขตของตัวเลข
  - ตัวเลขที่มี exponent น้อยกว่า 2^{-1022} ถือว่ามีค่าเท่ากับ 0
  - ตัวเลขที่มีค่ามากกว่า $2^{1023}(2 - 2^{-52})$ ถือว่าเกินขอบเขต (overflow) (แทนด้วย Inf)
- ถ้าค่าของตัวเลขไม่ overflow นั่นคือไม่เกิน $2^{1023}(2 - 2^{-52})$, ตัวเลข นั้นจะถูกปัด (round) ให้เป็นค่าที่ใกล้ที่สุดที่คอมพิวเตอร์สามารถแสดงได้
  - ตัวอย่างเช่น 1.1999999999999996 จะแสดงเป็น 1.2

Floating Point Numbers distribution



- ตัวเลขที่มีค่าระหว่าง 1 ถึง $1+2^{-52}$ ไม่สามารถแสดงได้บนคอมพิวเตอร์
- The (relative) rounding error, eps = 2^{-52}, is called *machine precision*.
- The absolute rounding error, eps * 2^{e}, depends on exponent e.

  (ถ้าเราทำงานกับตัวเลขขนาดใหญ่ เราจะต้องประสบปัญหาของ rounding errors ที่มากขึ้น)
- **Important** eps (ย่อมาจาก epsilon) มีค่าเท่ากับ $2^{-52} \approx 2 \times 10^{-16}$

Numerical instability

การคำนวณทางวิทยาศาสตร์ อาจไม่ได้ผลลัพธ์ตามที่เราต้องการ เนื่องมาจากปัญหาต่อไปนี้

- Roundoff error
- Overflow
- Cancellation

Roundoff error

- ผลลัพธ์จากการคำนวณอาจถูกปัดเป็นตัวเลขที่คอมพิวเตอร์สามารถแสดงได้
- หากมีการคำนวณหลายขั้นตอน rounding error อาจจะสะสมจนเกิดปัญหา
  - เช่น การทดสอบ `if(x == s)` อาจอันตรายถ้า x เป็นผลลัพธ์ของการคำนวณ เพราะ x อาจไม่มีโอกาสมีค่าเท่ากับ s เลย
  - แต่ควรใช้การทดสอบว่า x อยู่ในช่วงที่ห่างจาก s ไม่เกิน machine precision

```
if(abs(x) < eps*s)
```

Overflow

- ผลลัพธ์จากการคำนวณอาจเกินขอบเขตที่คอมพิวเตอร์สามารถแสดงค่าได้
- แก้ไขโดยการจัดลำดับการคำนวณใหม่ เช่น การคำนวณขนาดเวคเตอร์ในสองมิติ

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

straightforward evaluation: overflow, when $|x| > \sqrt{\max |\mathbb{M}|}$ or $|y| > \sqrt{\max |\mathbb{M}|}$.

$$r = \begin{cases} |x|\sqrt{1 + (y/x)^2} & \text{, if } |x| \geq |y| \text{ ,} \\ |y|\sqrt{1 + (x/y)^2} & \text{, if } |y| > |x| \text{ .} \end{cases}$$

➢ no overflow!

Cancellation

- **Cancellation or Loss of significance** occurs in numerical calculations when too many significant digits cancel.

- ส่วนมากเกิดขึ้นเมื่อเรานำตัวเลขสองตัวที่ใกล้เคียงกันมาลบกัน

- สมมุติว่าตัวเลขทั้งสองมีความแม่นยำถึงหลักที่ 6 การลบกันของตัวเลขส่งผลให้ หลักที่แม่นยำหักล้างกันไป ส่งผลให้มีหลักที่สำคัญน้อยเข้ามาอยู่ในผลลัพธ์

$$
\begin{array}{rcll}
x & = & 0.123467* & \leftarrow \text{7th digit perturbed} \\
y & = & 0.123456* & \leftarrow \text{7th digit perturbed} \\
\hline
x-y & = & 0.000011* = 0.11*000 \cdot 10^{-4} & \leftarrow \text{3rd digit perturbed}
\end{array}
$$

Cancellation Example

- เราทราบว่าอนุพันธ์ของฟังก์ชัน ณ จุด x มีค่าเท่ากับลิมิต

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \tag{1}$$

- เราจะลองเขียนโปรแกรมเพื่อคำนวณอนุพันธ์ของ e^x ณ จุดที่ $x = 0$ เทียบกับอนุพันธ์ที่ได้จากการคำนวณเชิงสัญลักษณ์แล้วดู error ที่เกิดขึ้น
  - ถ้ายังพอจำได้ อนุพันธ์ของ $\frac{de^x}{dx} = e^x$

- คาดว่าถ้า $h \to 0$ ค่าที่ประมาณได้น่าจะเข้าใกล้คำตอบจริงมากขึ้น

Cancellation Example

โค้ด Julia ที่ใช้ในการทดลอง

```julia
# cancellation errors during derivative approximiation

f(x)  = exp(x)  # the exponential function
df(x) = exp(x)  # its derivative (analytic)

@printf("%3s %16s %16s %16s\n","h","Exact","Approx","Error")
for i=1:16
    h      = 1/(10^i)
    approx = (f(0+h)-f(0))/h  # approx derivative at x=0
    exact  = df(0)             # exact derivative from calculus
    err    = abs(exact-approx)/abs(exact)  # relative error
    @printf("%.1e, %.16f, %.16f, %.16f\n", h, exact, approx, err )
end
```

Cancellation Example

สังเกตว่าเมื่อ h มีค่าน้อยลงเกินกว่า 10^{-8} ค่าที่ได้จากการประมาณกลับทำให้เกิด error ที่มากขึ้น ทั้งนี้เกิดจาก $f(x+h)$ และ $f(x)$ มีค่าใกล้เคียงกันมาก ทำให้เกิด cancellation error ขึ้น

```
  h             Exact              Approx              Error
1.0e-01, 1.0000000000000000, 1.0517091807564771, 0.0517091807564771
1.0e-02, 1.0000000000000000, 1.0050167084167949, 0.0050167084167949
1.0e-03, 1.0000000000000000, 1.0005001667083846, 0.0005001667083846
1.0e-04, 1.0000000000000000, 1.0000500016671410, 0.0000500016671410
1.0e-05, 1.0000000000000000, 1.0000050000069649, 0.0000050000069649
1.0e-06, 1.0000000000000000, 1.0000004999621837, 0.0000004999621837
1.0e-07, 1.0000000000000000, 1.0000000494336803, 0.0000000494336803
1.0e-08, 1.0000000000000000, 0.9999999939225290, 0.0000000060774710
1.0e-09, 1.0000000000000000, 1.0000000827403710, 0.0000000827403710
1.0e-10, 1.0000000000000000, 1.0000000827403710, 0.0000000827403710
1.0e-11, 1.0000000000000000, 1.0000000827403710, 0.0000000827403710
1.0e-12, 1.0000000000000000, 1.0000889005823410, 0.0000889005823410
1.0e-13, 1.0000000000000000, 0.9992007221626409, 0.0007992778373591
1.0e-14, 1.0000000000000000, 0.9992007221626409, 0.0007992778373591
1.0e-15, 1.0000000000000000, 1.1102230246251565, 0.1102230246251565
1.0e-16, 1.0000000000000000, 0.0000000000000000, 1.0000000000000000
```

Real world Numerical Catastrophes

Numerical Catastrophes

Ariane 5 rocket. [June 4, 1996]

- 10 year, $7 billion ESA project exploded after launch.
- 64-bit float converted to 16 bit signed int.
- Unanticipated overflow.

Copyright, Arianespace

Vancouver stock exchange. [November, 1983]

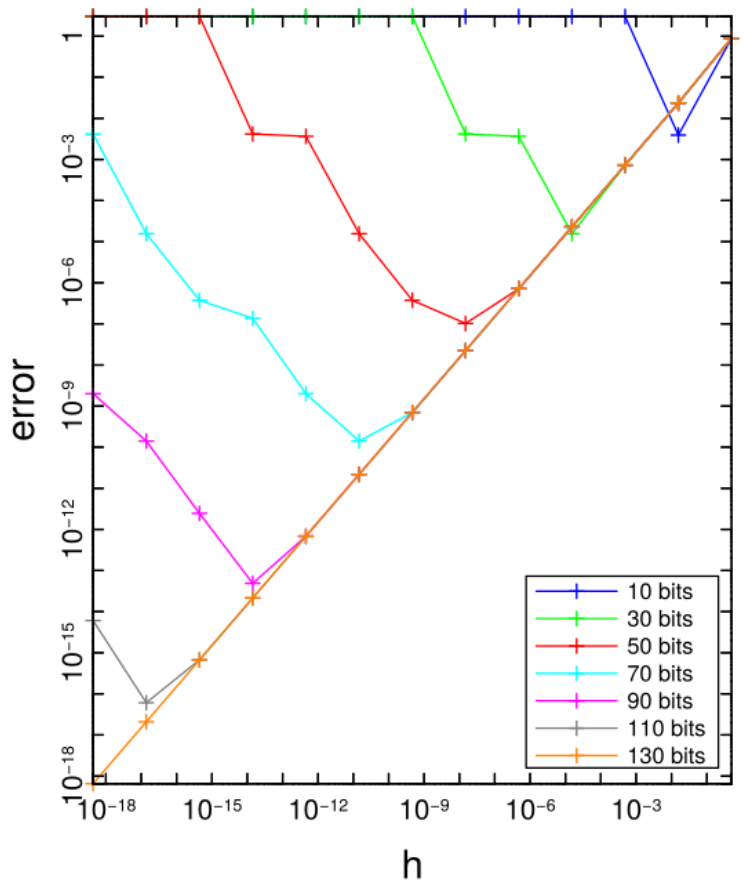
- Index undervalued by 44%.
- Recalculated index after each trade by adding change in price.
- 22 months of accumulated truncation error.

Patriot missile accident. [February 25, 1991]

- Failed to track scud; hit Army barracks, killed 28.
- Inaccuracy in measuring time in 1/20 of a second since using 24 bit binary floating point.

Avoiding cancellation

ขยายจำนวนบิทในการเก็บข้อมูล (impractical)



Avoiding cancellation

- การหลีกเลี่ยงผลกระทบจาก cancellation error สามารถทำได้โดยการเขียน expressions ในรูปแบบใหม่ที่ได้รับผลจาก error น้อยกว่า
- หากเป็นไปได้ ให้พยายามเขียน expression ที่ไม่ต้องทำการลบเลขสองตัวที่มีค่าใกล้เคียงกัน
- ตัวอย่างเช่น
  - แทนที่จะคำนวณ $x^2 - y^2$ ก็เลือกใช้ $(x+y)(x-y)$ แทน
  - แทนที่จะคำนวณ $\int_0^x \sin t dt$ ด้วย $1 - \cos x$ ก็เลือกใช้ $2\sin^2(x/2)$ แทน

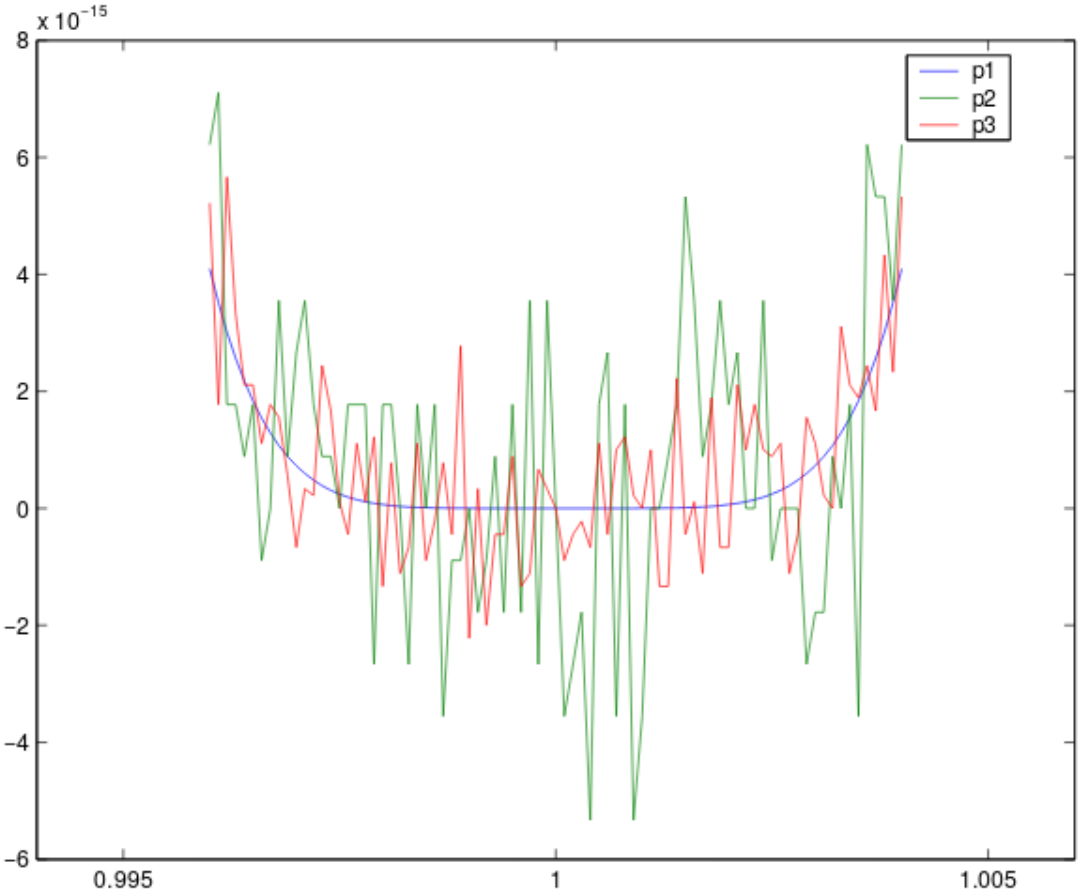
Avoiding cancellation

หรืออีกตัวอย่าง

$$\begin{aligned} p(x) &= (x-1)^6 \\ &= x^6 - 6x^5 + 15x^4 - 20x^3 + 15x^2 - 6x + 1 \\ &= 1 + x(-6 + x(15 + x(-20 + x(15 + x(-6 + x))))) \end{aligned}$$

These 3 forms are equivalent at the theoretical level, but they yield very different results when they are implemented.

Avoiding cancellation



Conditioning of numerical operations

แล้วเราจะทราบได้อย่างไรว่าควรจะใช้ expression ไหน

Condition of mathematical operations

เราสามารถมองการกระทำทางคณิตศาสตร์เป็นฟังก์ชันได้ โดยฟังก์ชันนี้อยู่ในรูปของ $f : X \rightarrow Y$ ในที่นี้ X แทนปริภูมิของข้อมูลขาเข้า และ Y แทนปริภูมิของคำตอบ

- เราสนใจพฤติกรรมของฟังก์ชันเมื่อมีเราใส่ข้อมูลขาเข้า x ให้ไป
- เราจะเรียกฟังก์ชันนั้นว่าเป็น well-conditioned function ถ้าการเปลี่ยนแปลงใน x ส่งผลต่อการเปลี่ยนแปลงของผลลัพธ์ $f(x)$ น้อย
- ฟังก์ชันนั้นว่าเป็น ill-conditioned function ถ้าการเปลี่ยนแปลงใน x ส่งผลต่อการเปลี่ยนแปลงของผลลัพธ์ $f(x)$ มาก

Condition number of a scalar operation

Consider a continuous twice differentiable function $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$

- $x \in \mathbb{R}$ คือตำแหน่งที่เราต้องการหาค่าของ f.
- $\Delta x \in \mathbb{R}$ แทน numerical error (ขนาดเล็ก).
- เราสามารถนิยาม absolute condition number (called kappa) ได้เป็น

$$\kappa = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{||f(x + \Delta x) - f(x)||}{||\Delta x||} = f'(x)$$

Condition number of vector-valued functions

Consider a continuous twice differentiable function $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$

- เรานิยาม J หรือเรียกว่า *Jacobian matrix* คือเมทริกซ์ที่ตำแหน่ง i, j คืออนุพันธ์ (partial derivative) $\frac{\partial f}{\partial x_j}$
- หากเมทริกซ์ J มีขนาดใหญ่มาก (m, n มีค่ามากๆ) การปรินท์ดูผลลัพธ์อาจทำได้ไม่สะดวก
- แทนที่จะใช้เมทริกซ์ J แทน condition number เราจึงใช้ $\kappa = ||J||$ โดยที่ $||\cdot||$ แทนนอร์มของเมทริกซ์ J. (ขนาดของเมทริกซ์)
  - $||\cdot||_\infty := \max_i |x_i|$ สมาชิกที่ค่าสัมบูรณ์มีค่ามากสุด
- If $\kappa \gg 1$, f is ill-conditioned.

ตัวอย่างการหา Jacobian

Consider a continuous twice differentiable function $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$

$$f(x, y) = \begin{bmatrix} x^2 y \\ 5x + \sin y \end{bmatrix}$$

we have $f_1(x, y) = x^2 y$ and $f_2(x, y) = 5x + \sin y$ and the Jacobian of f is

$$J_f(x, y) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2xy & x^2 \\ 5 & \cos y \end{bmatrix}$$

Relative Condition number

ส่วนใหญ่ใน numerical analysis เราจะสนใจการเปลี่ยนแปลงแบบสัมพัทธ์ เราจึงนิยาม relative condition number ที่นำค่าของข้อมูลเข้า และผลลัพธ์มา หารด้วยดังนี้

$$\begin{aligned}\kappa &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{||f(x+\Delta x) - f(x)||/||f(x)||}{||\Delta x||/||x||} \\ &= \frac{||J||}{||f(x)||/||x||}\end{aligned}$$

ตัวอย่าง

ลองคำนวณฟังก์ชันต่อไปนี้ด้วยมือดู

$$f(x) = \sin(10^8 x) \tag{2}$$

ที่ $x = \pi$ เราจะได้ว่า $f(\pi) = 0$

แต่ถ้าใช้คอมพิวเตอร์

```
julia>sin(10^8 pi)
-3.9082928156687315e-8
```

เพราะ absolute condition number $c = 10^8 \cos(10^8 \pi) = 10^8$

ตัวอย่าง

- พิจารณาฟังก์ชัน $f(x) = x/2$, พบว่า Jacobian มีค่าเท่ากับ $J = f' = 1/2$ ดังนั้น relative condition number คือ

$$\kappa = \frac{||J||}{||f(x)||/||x||} = \frac{1/2}{(x/2)/x} = 1 \tag{3}$$

ดังนั้นแล้ว problem ดังกล่าวถือว่าเป็น well-conditioned problem.

- พิจารณาฟังก์ชัน $f(x) = \sqrt{x}$, พบว่า Jacobian มีค่าเท่ากับ $J = f' = 1/(2\sqrt{x})$ ดังนั้น relative condition number คือ

$$\kappa = \frac{||J||}{||f(x)||/||x||} = \frac{1/(2\sqrt{x})}{\sqrt{x}/x} = \frac{1}{2} \tag{4}$$

ดังนั้นแล้ว problem ดังกล่าวถือว่าเป็น well-conditioned problem เช่นกัน.

ตัวอย่าง

- พิจารณาฟังก์ชัน $f(\vec{x}) = x_1 - x_2$, พบว่า Jacobian มีค่าเท่ากับ

$$J = [\frac{\partial f}{\partial x_1} \quad \frac{\partial f}{\partial x_2}] = [1 \quad -1]$$

พบว่า $||J||_\infty = 1$ ดังนั้น relative condition number

$$\kappa = \frac{||J||_\infty}{||f(\vec{x})||_\infty / ||\vec{x}||_\infty} = \frac{1}{|x_1 - x_2| / \max\{|x_1|, |x_2|\}} \tag{5}$$

ดังนั้นแล้ว problem ดังกล่าวจะ ill-conditioned เมื่อ $|x_1 - x_2| \approx 0$ หรือ $x_1 \approx x_2$ ซึ่งตรงกับสิ่งที่เราพบในการทดลองเรื่อง cancellation error.

Summary

- คอมพิวเตอร์ไม่สามารถแสดงค่าจำนวนจริงได้หมด แสดงได้แต่เซทย่อยของจำนวนจริงเท่านั้น
- การดำเนินการทางคณิตศาสตร์อาจได้รับผลกระทบจาก numerical error ได้
- เราสนใจที่จะหาขั้นตอนวิธีในการคำนวณทางคณิตศาสตร์ที่ดี ที่สามารถลด numerical error ได้บ้าง
- เราได้เรียนรู้ไปว่าเราสามารถประเมินลักษณะของปัญหาการคำนวณ ว่าจะเกิด error มากน้อยแค่ไหนโดยอาศัยตัวเลขที่เรียกว่า condition number

Assignments

- Show that the largest possible number in 64-bit IEEE floating point is $2^{1023}(2 - 2^{-52})$
- Write a program to convert IEEE bit string to real number. (LAB)

References

- TF 502: Numerical Analysis by Prof. Boris Houska: http://sist.shanghaitech.edu.cn/faculty/boris/TF502.html

- Numerical Methods for Computational Science and Engineering: Prof. Ralf Hiptmair: https://people.math.ethz.ch/~grsam/HS16/NumCSE/NumCSE16.pdf