PA081: Programování numerických výpočtů

Aleš Křenek

jaro 2019

O čem to bude

- zajímá nás chování skutečného světa
  - problémy přírodovědné, technické, humanitní …
- popisujeme matematickými prostředky
  - zejména pomocí reálných čísel
  - umělý aparát, leckdy zcela neodpovídá skutečnosti
  - za staletí celkem zvládnutý, vyučovaný od základní školy, obecně přijímaný

O čem to bude

- zákonitosti zkoumaných systémů typicky vyjádřeny rovnicemi
- zajímavé systémy → složité rovnice
  - reprezentativní příklad – Schrödingerova rovnice

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) = \hat{H} \Psi(\mathbf{x}, t)$$

  - analyticky řešitelná jen pro triviální případy
    - izolovaná částice, částice v potenciálové jámě, . . . , atom vodíku
  - i tak je řešení dost komplikované
- numerické řešení je jediný realisticky možný přístup

O čem to bude

- numerická matematika
  - řešení matematicky formulovaného problému aritmetickými prostředky
  - zpravidla algoritmický postup – numerická metoda
- disciplina podstatně starší než počítače

O čem to bude

- numerická matematika
  - řešení matematicky formulovaného problému aritmetickými prostředky
  - zpravidla algoritmický postup – numerická metoda
- disciplina podstatně starší než počítače

- metody jsou známé, naprogramujeme je a je hotovo
- ne tak docela

(De)motivační příklad

- uměle zkonstruovaný, ilustruje podstatu problému
- pro dané n vypočítejte integrál

$$E_n = \int_0^1 x^n e^{x-1} dx$$

(De)motivační příklad

- uměle zkonstruovaný, ilustruje podstatu problému
- pro dané n vypočítejte integrál

$$E_n = \int_0^1 x^n e^{x-1} dx$$

- očekávané vlastnosti
  - $E_0 = \left[e^{x-1}\right]_0^1 = 1 - \frac{1}{e}$
  - pro $0 \leq x \leq 1$ platí $x^n \geq 0$ a $0 < e^{x-1} \leq 1$, tedy $E_n > 0$
  - podobně

$$E_n \leq \int_0^1 x^n dx = \frac{1}{n+1} \quad \text{a tedy} \quad \lim_{n \to \infty} E_n = 0$$

(De)motivační příklad

- pro numerický výpočet lze transformovat na rekurentní posloupnost
- integrací per-partes $u = x^n$, $dv = e^{x-1}dx$

$$E_n = \left[x^n e^{x-1}\right]_0^1 - \int_0^1 n x^{n-1} e^{x-1} dx = 1 - nE_{n-1}$$

(De)motivační příklad

- pro numerický výpočet lze transformovat na rekurentní posloupnost
- integrací per-partes $u = x^n$, $dv = e^{x-1}dx$

$$E_n = \left[x^n e^{x-1}\right]_0^1 - \int_0^1 n x^{n-1} e^{x-1} dx = 1 - nE_{n-1}$$

```
float   e = 2.7182818;
float   E[20];
int     n;

E[0] = 1.0-1.0/e;
for (n=1; n<20; n++) {
        E[n] = 1.0 - n * E[n-1];
        printf("%d: %f\n",n,E[n]);
}
```

(De)motivační příklad

```
1: 0.367879
2: 0.264241
3: 0.207277
4: 0.170893
5: 0.145534
6: 0.126796
7: 0.112430
8: 0.100563
9: 0.094933
10: 0.050674
11: 0.442581
12: -4.310974
13: 57.042664
14: -797.597290
15: 11964.958984
16: -191438.343750
17: 3254452.750000
18: -58580148.000000
19: 1113022848.000000
```

(De)motivační příklad

- co je špatně?
- pracujeme s konečnou reprezentací reálného čísla
  - společný problém ručního i strojového zpracování
  - v počítači daleko plíživější podoba (nevidíme mezivýsledky)

(De)motivační příklad

- co je špatně?
- pracujeme s konečnou reprezentací reálného čísla
  - společný problém ručního i strojového zpracování
  - v počítači daleko plíživější podoba (nevidíme mezivýsledky)
- v proměnné `E[n]` není uloženo přesně E_n
  už na začátku zatíženo chybou, `E[0]` $= E_0 + \epsilon$

(De)motivační příklad

- co je špatně?
- pracujeme s konečnou reprezentací reálného čísla
  - společný problém ručního i strojového zpracování
  - v počítači daleko plíživější podoba (nevidíme mezivýsledky)
- v proměnné `E[n]` není uloženo přesně E_n
  už na začátku zatíženo chybou, `E[0]` $= E_0 + \epsilon$
- i při zcela přesném výpočtu:

$$\texttt{E[1]} = 1 - \texttt{E[0]} = 1 - E_0 - \epsilon = E_1 - \epsilon$$
$$\texttt{E[2]} = 1 - 2\texttt{E[1]} = 1 - 2E_1 + 2\epsilon = E_2 + 2\epsilon$$
$$\texttt{E[3]} = 1 - 3\texttt{E[2]} = 1 - 3E_2 - 3(2\epsilon) = E_3 - 3(2\epsilon)$$
$$\vdots$$
$$\texttt{E[n]} = \cdots = E_n + (-1)^n n!\epsilon$$

O čem to tedy bude

- představení numerických metod pro řešení vybraných problémů
  - pragmaticky, bez rozsáhlé teoretické analýzy, okrajových podmínek atd.
- formulace přiměřeně přesného a efektivního algoritmu
  - matematicky korektní metoda nestačí
  - pro různá použití jsou vhodné různé alternativy
- použití na smysluplném příkladu

Čísla v plovoucí řádové čárce

- standard IEEE 754
  - vychází návrhu reprezentace čísel v koprocesoru Intel 8087
- základní formát $\pm 1.\text{mmmmmmmmm} \ldots \times 2^{\pm \text{ee}\ldots}$
  - znaménko mantisy (1 bit)
  - mantisa $1.\text{mmmmmmmmm}$
    - binárně, absolutní hodnota
    - číslo v intervalu $[1, 2)$ v dané přesnosti
    - nekonečná množina pokryta konečným počtem hodnot
    - základní zdroj nepřesnosti
  - exponent
    - binární číslo v rozsahu 1 až např. 254
    - znamená hodnoty exponentu -126 až +127
    - speciální význam hodnot $00 \ldots 00$ a $11 \ldots 11$ – kódování $\pm 0, \pm\infty, \pm\text{NaN}$

Čísla v plovoucí řádové čárce

- nejběžnější typy – velikosti v bitech a rozsah exponentu

typ	exp.	mantisa	celkem	rozsah exp.
Single (float)	8	23	32	127
Double	11	52	64	1023
Quad (long double)	15	112	128	16383

- tj. např. největší číslo typu `float` je $2^{127} \doteq 10^{38}$
- nejmenší nenulové $2^{-126} \doteq 10^{-37}$
- relativní chyba je omezena $2^{-25} \doteq 10^{-8}$
  - tedy počítáme na cca. 8 platných cifer

Problémy konečné reprezentace

Ztráta přesnosti sčítání

- pro zjednodušení v desítkové soustavě a na 3 platné cifry mantisy
- sečtěme 1.23e3 a 1.00e0
  - nutné sjednocení exponentů:
    $1.23e3 + 0.001e3 = 1.231e3 \doteq 1.23e3$
  - v rámci dané přesnosti korektní výsledek

Problémy konečné reprezentace

Ztráta přesnosti sčítání

- pro zjednodušení v desítkové soustavě a na 3 platné cifry mantisy
- sečtěme 1.23e3 a 1.00e0
  - nutné sjednocení exponentů:
    $1.23e3 + 0.001e3 = 1.231e3 \doteq 1.23e3$
  - v rámci dané přesnosti korektní výsledek
- k 1.23e3 desetkrát přičtěme 1.00e0
  - opakované aplikování předchozího postupu dává opět 1.23e3
  - nemusí to být to, co jsme chtěli
  - $1.23e3 + (1.00e0 + \cdots + 1.00e0) = 1.24e3$

Problémy konečné reprezentace

Ztráta přesnosti sčítání

- pro zjednodušení v desítkové soustavě a na 3 platné cifry mantisy
- sečtěme 1.23e3 a 1.00e0
  - nutné sjednocení exponentů:
    $1.23e3 + 0.001e3 = 1.231e3 \doteq 1.23e3$
  - v rámci dané přesnosti korektní výsledek
- k 1.23e3 desetkrát přičtěme 1.00e0
  - opakované aplikování předchozího postupu dává opět 1.23e3
  - nemusí to být to, co jsme chtěli
  - $1.23e3 + (1.00e0 + \cdots + 1.00e0) = 1.24e3$
- operace v plovoucí řádové čárce nejsou asociativní
  - ani tam, kde jsme na to z algebry zvyklí

Problémy konečné reprezentace

Katastrofální zrušení

- odečtení dvou vzájemně blízkých čísel vede k výrazné ztrátě přesnosti

Problémy konečné reprezentace

Katastrofální zrušení

- odečtení dvou vzájemně blízkých čísel vede k výrazné ztrátě přesnosti
- rozdíl dvou měření s přesností na 3 platné cifry:

$$1.23 - 1.22$$

- binární reprezentace: 1.0011101 a 1.0011100
  - zatížena chybami 0.3 % a 0.1 %

Problémy konečné reprezentace

Katastrofální zrušení

- odečtení dvou vzájemně blízkých čísel vede k výrazné ztrátě přesnosti
- rozdíl dvou měření s přesností na 3 platné cifry:

$$1.23 - 1.22$$

- binární reprezentace: 1.0011101 a 1.0011100
  - zatížena chybami 0.3 % a 0.1 %
- odečtením dostaneme binárně 0.0000001, tj. 0.0078125
  - správný výsledek byl 0.01, relativní chyba 22 %
  - navíc působí dojmem falešné přesnosti

Problémy konečné reprezentace

Katastrofální zrušení

- odečtení dvou vzájemně blízkých čísel vede k výrazné ztrátě přesnosti
- rozdíl dvou měření s přesností na 3 platné cifry:

$$1.23 - 1.22$$

- binární reprezentace: 1.0011101 a 1.0011100
  - zatížena chybami 0.3 % a 0.1 %
- odečtením dostaneme binárně 0.0000001, tj. 0.0078125
  - správný výsledek byl 0.01, relativní chyba 22 %
  - navíc působí dojmem falešné přesnosti

Vyhněme se odčítání dvou blízkých čísel. Je-li to i tak nezbytné, počítejme s výsledkem zatíženým potenciálně velkou chybou.

Problémy konečné reprezentace

Robustní aritmetiky

- uvažujme přesnost na 6 cifer
- součet 10000.0 + 3.14159 + 2.71828
  - přesně 10005.85987, zaokrouhleně 10005.9, naivně 10000.3

Problémy konečné reprezentace

Robustní aritmetiky

- uvažujme přesnost na 6 cifer
- součet 10000.0 + 3.14159 + 2.71828
  - přesně 10005.85987, zaokrouhleně 10005.9, naivně 10000.3
- Kahanův algoritmus

```
float input[];
float sum = 0, err = 0;
for (int i = 0; i<size; i++) {
        float y = input[i] - err;
        float tmp = sum + y;
        err = (tmp - sum) - y;
        sum = tmp;
}
```

Problémy konečné reprezentace

Robustní aritmetiky

- součet $1.0 + 10^{100} + 1.0 - 10^{100}$ v `double`
  - přesně 2.0, naivně 0.0, Kahan 0.0

Problémy konečné reprezentace

Robustní aritmetiky

- součet $1.0 + 10^{100} + 1.0 - 10^{100}$ v double
  - přesně 2.0, naivně 0.0, Kahan 0.0
- Neumaierův algoritmus

```
float input[];
float sum = 0, err = 0;
for (int i = 0; i<size; i++) {
        float tmp = sum + input[i];
        if (fabs(sum) >= fabs(input[i]))
            err += (sum - t) + input[i];
        else
            err += (input[i] - t) + sum;
        sum = tmp;
}
sum += err;
```

Problémy konečné reprezentace

Robustní aritmetiky

- není to zadarmo
  - Kahan $4\times$, Neumaier $5\times$ více operací
  - třídění $O(n \log n)$
  - rekurzivní sčítání neeliminuje chybu zcela
- pozor na kompilátor: `-funsafe-math-optimizations` pro gcc

Problémy konečné reprezentace

Násobení a dělení

- samo o sobě nezanáší významnou chybu
- zachovává existující chybu

Problémy konečné reprezentace

Násobení a dělení

- samo o sobě nezanáší významnou chybu
- zachovává existující chybu
- příklad: $(a + b)^2$ pro $a = 1.23, b = 0.0155$, na 3 cifry
- přesný výsledek je 1.55127025

Problémy konečné reprezentace

Násobení a dělení

- samo o sobě nezanáší významnou chybu
- zachovává existující chybu
- příklad: $(a+b)^2$ pro $a = 1.23, b = 0.0155$, na 3 cifry
- přesný výsledek je 1.55127025
- přímý výpočet na 3 platné cifry:

$$a + b \doteq 1.23 + 0.02 = 1.25$$

- tedy $(a+b)^2 = 1.56$, chyba 0.56 %
  - není to tak zlé, ale může být lepší

Problémy konečné reprezentace

Násobení a dělení

- po transformaci $(a+b)^2 = a^2 + 2ab + b^2$:

$$1.51 + 2 \times 0.0191 + 0.000240 =$$
$$1.51 + 0.0382 + 0.000240 \doteq 1.55$$

- chyba 0.082 %, tedy téměř o řád menší
- za cenu 6 aritmetických operací místo 2
- bude 3× pomalejší

Problémy konečné reprezentace

Násobení a dělení

- po transformaci $(a+b)^2 = a^2 + 2ab + b^2$:

$$1.51 + 2 \times 0.0191 + 0.000240 =$$
$$1.51 + 0.0382 + 0.000240 \doteq 1.55$$

- chyba 0.082 %, tedy téměř o řád menší
- za cenu 6 aritmetických operací místo 2
- bude 3× pomalejší

…uvidíme

Měření rychlosti výpočtu

Naivní přístup

- POSIX volání `gettimeofday()`

```
gettimeofday(&start,NULL);
c = a + b;
c *= c;
gettimeofday(&stop,NULL);
```

- současné CPU 2–4 GHz
- 1 aritmetická operace ~ 1–10 ns
- nemáme tak přesné hodiny

Měření rychlosti výpočtu

Zopakujeme v cyklu

- opakování $10^9\times$ navýší čas na měřitelnou ~ 1 s

```
gettimeofday(&start,NULL);
for (i=0; i<1000000000; i++) {
      c = a + b;
      c *= c;
}
gettimeofday(&stop,NULL);
```

Měření rychlosti výpočtu

Zopakujeme v cyklu

- opakování $10^9\times$ navýší čas na měřitelnou ~ 1 s

```
gettimeofday(&start,NULL);
for (i=0; i<1000000000; i++) {
      c = a + b;
      c *= c;
}
gettimeofday(&stop,NULL);
```

- počítá podstatně rychleji
  - trochu podezřelé

Měření rychlosti výpočtu

Zopakujeme v cyklu

- optimalizující kompilátor `gcc -O3 -funroll-loops`

```
        movss   44(%rsp), %xmm0
        xorl    %eax, %eax
        addss   40(%rsp), %xmm0
        mulss   %xmm0, %xmm0
.L2:
        addl    $8, %eax
        cmpl    $1000000000, %eax
        jne     .L2
        movss   %xmm0, 36(%rsp)
```

- v těle cyklu se nic nepočítá
- optimalizaci obecně chceme
  - použití registrů pro proměnné, max. využití FPU, ...
- eliminace zbytečného opakování je příliš

Měření rychlosti výpočtu

Zopakujeme v cyklu

- brzdící kód
  - uměle vložený do těla cyklu
  - za běhu programu se nevyvolá – nebrzdí doopravdy
  - zabrání příliš agresivní optimalizaci cyklu

```
nikdy = (strlen(argv[0]) == 0);
for (i=0; i<1000000000; i++) {
        c = a + b;
        c *= c;
        if (nikdy) brzda(&nikdy,&a,&b,&c);
}
```

- kompilátor musí předpokládat:
  - proměnná `nikdy` nemusí být 0
  - funkce `brzda()` má vliv na odkazované proměnné

Měření rychlosti výpočtu

Jak to dopadlo

- Intel i7-2600 3.4 GHz

vzorec	čas	Mflop/s	**Mcyklů/s**
$(a+b)^2$	0.61	3278	**1639**
$a^2+2ab+b^2$	0.99	6060	**1010**

- rozvinutý výpočet jen 1.6× pomalejší
  - vnitřní paralelismus procesoru
    - více FPU jednotek
    - pipelining
  - spekulativní výpočet větví programu
  - stále dosahujeme jen 25 % FPU výkonu jednoho jádra CPU

Problémy konečné reprezentace

Násobení a dělení

Snažme se vzorce transformovat tak, aby se nejdříve násobilo/dělilo, pak teprve sčítalo/odčítalo. Je šance na přesnější výsledek, dopad na výkon nemusí být významný.

Problémy konečné reprezentace

Přetečení a podtečení

- násobení dvou velkých čísel může vést k nereprezentovatelnému exponentu

$$1.2\text{e}30 \times 1.2\text{e}30 = 1.44\text{e}61$$

- typ `float` umí exponent $[-37, 38]$
- výsledek operace už je ∞

Problémy konečné reprezentace

Přetečení a podtečení

- násobení dvou velkých čísel může vést k nereprezentovatelnému exponentu

$$1.2e30 \times 1.2e30 = 1.44e61$$

- typ `float` umí exponent $[-37, 38]$
- výsledek operace už je ∞
- podobně násobení dvou malých čísel vede k podtečení
  - podle nastavení aritmetiky je výsledek ± 0 nebo denormalizované číslo

$$0.000000\text{mmm} \times 10^{-37}$$

  - další výpočty nepřesné a navíc citelně pomalejší

Problémy konečné reprezentace

Přetečení a podtečení

Při násobení a dělení více čísel uspořádejme posloupnost operací, abychom nedělili velmi malé číslo velkým, velké malým, a nenásobili vzájemně velká nebo malá čísla.

Problémy konečné reprezentace

Porovnávání

- nevinný výpočet

```
float a=1.505, b1=1.315, b2=1.695,
      c=a+a, d=b1+b2;

printf("%f %f %s\n",c,d,c == d ?
      "jsou stejna" : "jsou ruzna");
```

Problémy konečné reprezentace

Porovnávání

- nevinný výpočet

```
float a=1.505, b1=1.315, b2=1.695,
      c=a+a, d=b1+b2;

printf("%f %f %s\n",c,d,c == d ?
      "jsou stejna" : "jsou ruzna");
```

- má překvapivý výstup

```
3.010000 3.010000 jsou ruzna
```

Problémy konečné reprezentace

Porovnávání

- nevinný výpočet

```
float a=1.505, b1=1.315, b2=1.695,
      c=a+a, d=b1+b2;

printf("%f %f %s\n",c,d,c == d ?
      "jsou stejna" : "jsou ruzna");
```

- má překvapivý výstup

  `3.010000 3.010000 jsou ruzna`

- přesnější formát výpisu `"%15.12f"`:

  `3.009999990463 3.010000228882 jsou ruzna`

Problémy konečné reprezentace

Porovnávání

- operátor `==` na reálných číslech nemá valný smysl
  - téměř vždy je zasažen chybou předchozího výpočtu
- místo něj test na dostatečnou blízkost

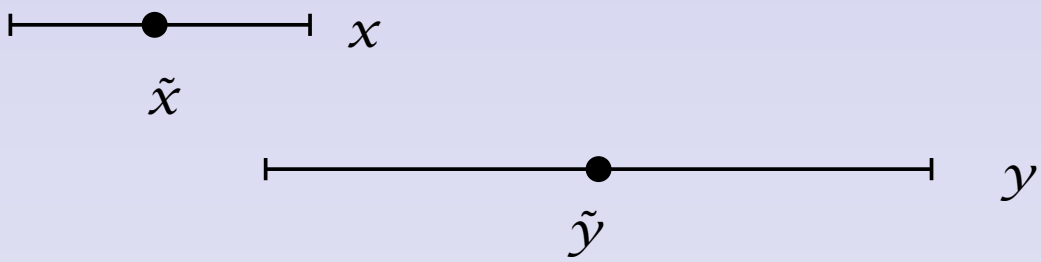
```
fabs(c-d) < EPSILON
```

- stanovení toleranční konstanty zpravidla empiricky
  - různá pro hodnoty 1e-15 a 1e30
  - silně záleží na dané úloze
  - ovlivněna i každým konkrétním výpočtem

Problémy konečné reprezentace

Porovnávání

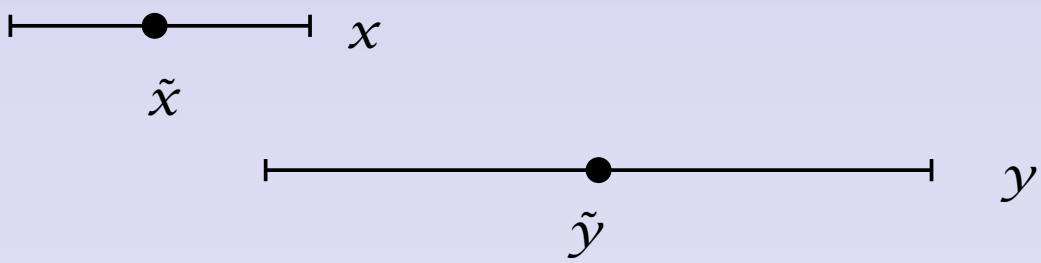
- porovnávání $<$ a $>$ trpí stejným problémem
  - záludnější podoba a komplikovanější řešení
- chci porovnat přesné hodnoty x a y
  - znám jen přibližná (spočtená) $\tilde{x} = x \pm \epsilon_x$, $\tilde{y} = y \pm \epsilon_y$:



Problémy konečné reprezentace

Porovnávání

- porovnávání $<$ a $>$ trpí stejným problémem
  - záludnější podoba a komplikovanější řešení
- chci porovnat přesné hodnoty x a y
  - znám jen přibližná (spočtená) $\tilde{x} = x \pm \epsilon_x$, $\tilde{y} = y \pm \epsilon_y$:

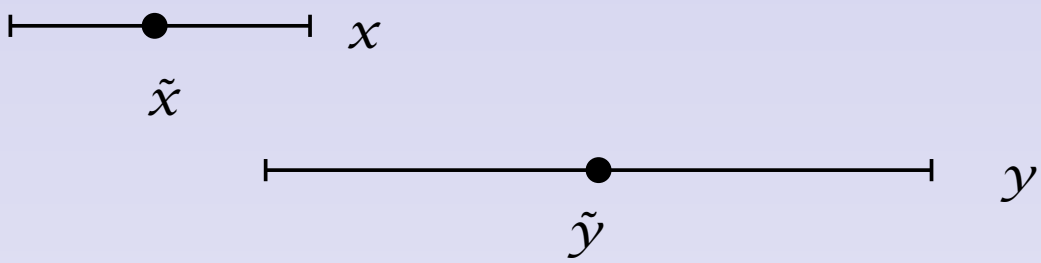


- opatrný („miserly“) přístup
  - intervaly se i částečně překrývají $\Rightarrow$ tvrdíme $x = y$
  - jinak porovnáme $\tilde{x} \lesseqgtr \tilde{y}$

Problémy konečné reprezentace

Porovnávání

- porovnávání $<$ a $>$ trpí stejným problémem
  - záludnější podoba a komplikovanější řešení
- chci porovnat přesné hodnoty x a y
  - znám jen přibližná (spočtená) $\tilde{x} = x \pm \epsilon_x$, $\tilde{y} = y \pm \epsilon_y$:



- opatrný („miserly“) přístup
  - intervaly se i částečně překrývají $\Rightarrow$ tvrdíme $x = y$
  - jinak porovnáme $\tilde{x} \lessgtr \tilde{y}$
- hladový („eager“) přístup
  - chceme vědět, že mohlo nastat $x > y$
  - porovnáváme $\tilde{x} + \epsilon_x > \tilde{y} - \epsilon_y$.

Problémy konečné reprezentace

Porovnávání

Na rovnost porovnávejme vždy s tolerancí.

U porovnání na nerovnost si uvědomme, co chceme vědět.

Příklad

Kvadratická rovnice

- rovnice tvaru

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

- školní vzorec

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

Příklad

Kvadratická rovnice

- rovnice tvaru
$$ax^2 + bx + c = 0$$
- školní vzorec
$$x_{\pm} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$
- je-li $b^2 \gg ac$, počítáme x_+ z rozdílu dvou velmi blízkých čísel
  - problém katastrofálního zrušení
- „$\gg$“ neznamená až příliš velký rozdíl koeficientů
  - typ `float` – přesnost na 7–8 dekadických číslic
  - při $a = 1$ tedy stačí $b \sim 10^3 c$

Příklad

Kvadratické rovnice

- konkrétně pro $b = 2000$, $c = 1$
- „přesné“ hodnoty
  - $\sqrt{D} = 1999.9989999997499998749999218749453\ldots$
  - $x_+ = -.000500000125000062500039062527343 77\ldots$
  - $x_- = -1999.999499999874999937499960937 4\ldots$
- pro `float`
  - $\sqrt{D} = 1999.999$
  - $x_+ = -0.00048828125$, chyba 2.5 %
  - $x_- = -1999.9995$, chyba odpovídá přesnosti typu

Příklad

Kvadratické rovnice

- bezproblémové řešení pro x_+
- vlastnosti kořenů rovnice:

$$ax^2 + bx + c = (x - x_+)(x - x_-) \quad \text{tedy} \quad c = x_+ x_-$$

  a lze počítat $x_+ = c/x_-$;
- pro předchozí příklad dostáváme
  - $x_+ = -0.00050000014$, chyba odpovídá přesnosti typu
- analogicky pro $b < 0$ je nepřesné x_-, vypočte se symetricky

Příklad

Kvadratické rovnice

- bezproblémové řešení pro x_+
- vlastnosti kořenů rovnice:

$$ax^2 + bx + c = (x - x_+)(x - x_-) \quad \text{tedy} \quad c = x_+ x_-$$

  a lze počítat $x_+ = c/x_-$;
- pro předchozí příklad dostáváme
  - $x_+ = -0.00050000014$, chyba odpovídá přesnosti typu
- analogicky pro $b < 0$ je nepřesné x_-, vypočte se symetricky
- i v triviálním výpočtu může vzniknout problém
- řešení může být docela jednoduché

Numerická stabilita

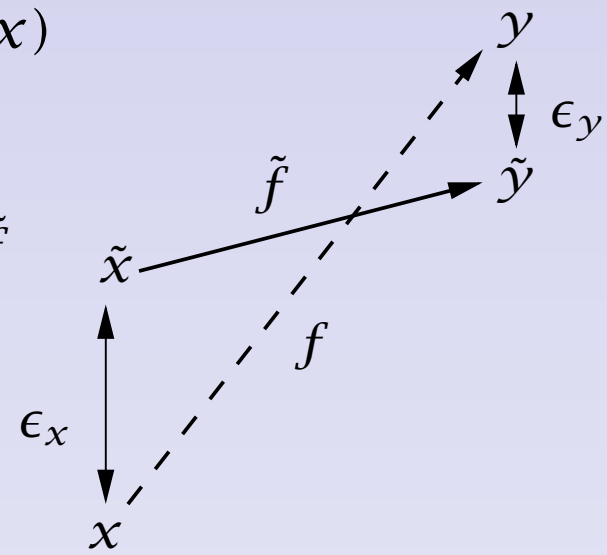
(Pseudo)definice

- „metoda počítá sice špatně, ale jenom trochu špatně“
  - žádoucí a přitom realistická vlastnost všech numerických algoritmů

Numerická stabilita

(Pseudo)definice

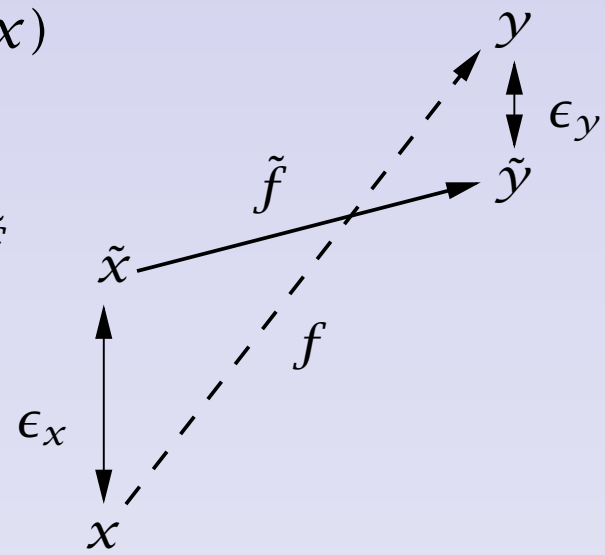
- „metoda počítá sice špatně, ale jenom trochu špatně“
  - žádoucí a přitom realistická vlastnost všech numerických algoritmů
- pro vstup x hledáme řešení $y = f(x)$
- ve skutečnosti
  - na aproximaci vstupu $\tilde{x} = x + \epsilon_x$
  - nepřesnou numerickou metodou $\tilde{f}$
  - dostaneme výsledek $\tilde{y} = y + \epsilon_y$



Numerická stabilita

(Pseudo)definice

- „metoda počítá sice špatně, ale jenom trochu špatně“
  - žádoucí a přitom realistická vlastnost všech numerických algoritmů
- pro vstup x hledáme řešení $y = f(x)$
- ve skutečnosti
  - na aproximaci vstupu $\tilde{x} = x + \epsilon_x$
  - nepřesnou numerickou metodou $\tilde{f}$
  - dostaneme výsledek $\tilde{y} = y + \epsilon_y$

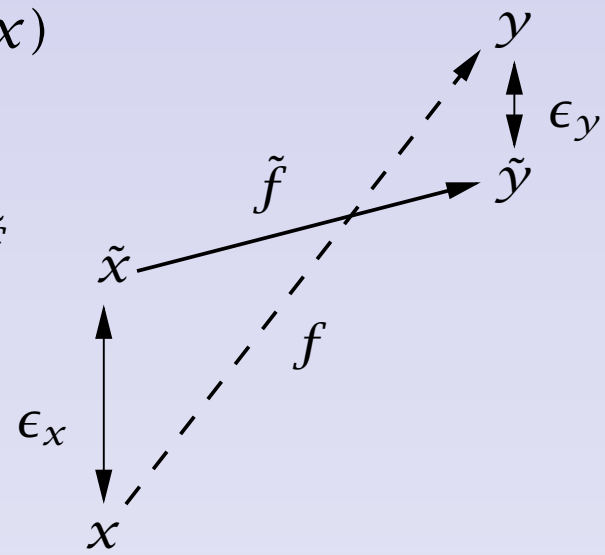


- algoritmus je stabilní,
  existuje-li pro každé x malé ϵ_x
  tak, že ϵ_y je malé
  - „malé ϵ“ znamená zpravidla $|\epsilon| \leq |\delta x|$

Numerická stabilita

(Pseudo)definice

- „metoda počítá sice špatně, ale jenom trochu špatně“
  - žádoucí a přitom realistická vlastnost všech numerických algoritmů
- pro vstup x hledáme řešení $y = f(x)$
- ve skutečnosti
  - na aproximaci vstupu $\tilde{x} = x + \epsilon_x$
  - nepřesnou numerickou metodou $\tilde{f}$
  - dostaneme výsledek $\tilde{y} = y + \epsilon_y$

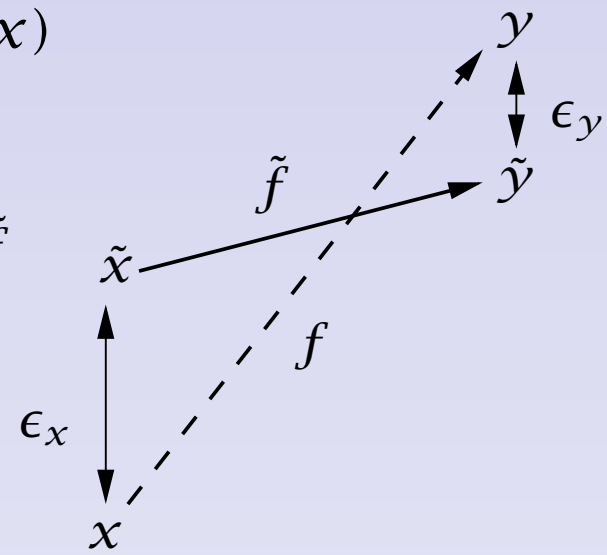


- algoritmus je stabilní, existuje-li pro každé x malé ϵ_x tak, že ϵ_y je malé
  - „malé ϵ“ znamená zpravidla $|\epsilon| \leq |\delta x|$
- silnější definice zpětné stability – $\epsilon_y = 0$

Numerická stabilita

(Pseudo)definice

- „metoda počítá sice špatně, ale jenom trochu špatně“
  - žádoucí a přitom realistická vlastnost všech numerických algoritmů
- pro vstup x hledáme řešení $y = f(x)$
- ve skutečnosti
  - na aproximaci vstupu $\tilde{x} = x + \epsilon_x$
  - nepřesnou numerickou metodou $\tilde{f}$
  - dostaneme výsledek $\tilde{y} = y + \epsilon_y$



- algoritmus je stabilní,
  existuje-li pro každé x malé ϵ_x
  tak, že ϵ_y je malé
  - „malé ϵ“ znamená zpravidla $|\epsilon| \leq |\delta x|$
- silnější definice zpětné stability – $\epsilon_y = 0$
- pro speciální druhy problémů jiné definice stability
  - např. numerické integrování – „systém nevybuchne“

Numerická stabilita

Příklady

- `addss` je numericky stabilní implementace sčítání $y = x_1 + x_2$
  - zvolíme $\delta = 2^{-22}$
  - pro daná x_1, y_1 označme chybu jejich reprezentace $\delta_{1,2}$
  - ve `float` platí $|\delta_{1,2}| \leq 2^{-25}$
  - relativní chyba tohoto konkrétního sčítání je $|\delta_a| \leq 2^{-25}$

$$\tilde{y} = \texttt{adds}(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2) = (\tilde{x}_1 + \tilde{x}_2)(1 + \delta_a) =$$
$$x_1(1 + \delta_1)(1 + \delta_a) + x_2(1 + \delta_2)(1 + \delta_a) =$$
$$(x_1 + x_2) + x_1(\delta_1 + \delta_a + \delta_1\delta_a) + x_2(\delta_2 + \delta_a + \delta_2\delta_a)$$

- i v nejhorším případě $|\delta_{1,2} + \delta_a + \delta_{1,2}\delta_a| \leq 3 \times 2^{-25}$
- pro nejhorší případ $x_1 = x_2$ nastane

$$|\tilde{y} - y| = |2x_1(\delta_1 + \delta_a + \delta_1\delta_a)| \leq |\delta y|$$

Numerická stabilita

Příklady

- sčítání řady čísel $1230 + 1 + 1 + 1 + \ldots$ je nestabilní
  - stabilní alternativa – setřídit a začít od nejmenšího

Numerická stabilita

Příklady

- sčítání řady čísel $1230 + 1 + 1 + 1 + \ldots$ je nestabilní
  - stabilní alternativa – setřídit a začít od nejmenšího
- úvodní příklad $E_n = 1 - nE_{n-1}$
  - pro dostatečně velké N položíme $E_N = 0$
  - počítáme
$$E_{n-1} = \frac{1 - E_n}{n}$$
  - v každém kroku je chyba redukována faktorem $1/n$

Zaokrouhlování

- žádoucí chování implementace aritmetických operací $+, -, *, /, \sqrt{}$:

  $\mathrm{op}(x, y) = (x\ op\ y)(1+\delta)$ pro $|\delta| \leq u$(strojová přesnost)

- výsledek je stejně dobrý jako zaokrouhlený výsledek přesného výpočtu

Zaokrouhlování

- žádoucí chování implementace aritmetických operací $+, -, *, /, \sqrt{}$:

  $\mathrm{op}(x, y) = (x\ op\ y)(1+\delta)$ pro $|\delta| \leq u$(strojová přesnost)

- výsledek je stejně dobrý jako zaokrouhlený výsledek přesného výpočtu
- stačí výpočet v dané přesnosti?

Zaokrouhlování

- žádoucí chování implementace aritmetických operací $+, -, *, /, \sqrt{}$:

  $\mathrm{op}(x, y) = (x \; op \; y)(1+\delta)$ pro $|\delta| \leq u$(strojová přesnost)

- výsledek je stejně dobrý jako zaokrouhlený výsledek přesného výpočtu
- stačí výpočet v dané přesnosti?
  - např. $0.100 \times 2^1 - 0.111 \times 2^0$ (dvojkově, 3 cifry přesnosti)
  - po zarovnání řádu: $(0.100 - 0.011) \times 2^1 = 0.001 \times 2^1$
  - správný výsledek byl 0.0001×2^1, chyba je $\delta = 1 > 0.001 = u$
- potřebujeme počítat s vyšší přesností
  - $(0.1000 - 0.0111) \times 2^1 = 0.0001 \times 2^1$
  - tzv. guard digit, pro $+, -$ stačí jedna

Zaokrouhlování

- základní zaokrouhlení – k nejbližšímu reprezentovatelnému číslu

$$1.24 \doteq 1.2 \qquad 1.26 \doteq 1.3$$

- při nejednoznačnosti:
  - vždy nahoru
  - vždy dolů
  - k sudému: $1.25 \doteq 1.2$, ale $1.35 \doteq 1.4$
- asymetrické zaokrouhlení vnáší nežádoucí systematickou chybu
  - např. průměr velkého souboru čísel vyšší/nižší

Elementární funkce

- goniometrické, hyperbolické, exponenciální, logaritmické, odmocniny, ...

Elementární funkce

- goniometrické, hyperbolické, exponenciální, logaritmické, odmocniny, ...
- pohled matematika
  - zaběhaný intuitivní aparát
  - příjemné analytické vlastnosti (spojitost, derivace, ...)
  - většina matematických modelů se bez nich neobejde

Elementární funkce

- goniometrické, hyperbolické, exponenciální, logaritmické, odmocniny, ...
- pohled matematika
  - zaběhaný intuitivní aparát
  - příjemné analytické vlastnosti (spojitost, derivace, ...)
  - většina matematických modelů se bez nich neobejde
- pohled programátora
  - samy o sobě numericky stabilní
  - optimalizované implementace v knihovnách
  - problematické chování v okrajových případech vede na numerickou nestabilitu
  - netriviální výpočetní náročnost

Elementární funkce

Co je špatně?

- celý aparát vede na iracionální čísla ($\pi, e, \sqrt{2}, \ldots$)
  - ve většině případů zdroj nepřesnosti
- e^x
  - tendence k přetečení – $e^{88} = 1.65 \times 10^{38}$
- $\tan x$
  - přetečení pro $x \to \frac{\pi}{2}$ (a perioda) roste nade všechny meze
- $\sin x$ a $\cos x$
  - pro $x \to \frac{\pi}{2}$ resp. $x \to 0$ vedou na *špatně podmíněné* rovnice
  - malá změna vstupu vede k velké změně výstupu
  - např. $\sin x = t$ pro $t \to 1$

Dilema tvůrce tabulek

- počítáme např. e^x na 3 místa, vychází (po n iteracích) $0.23450000\ldots$
  - je to zaokrouhlením přesného výsledku 0.2344999999, správné zaokrouhlení 0.234
  - nebo jen nepočítám dostatečně přesně 0.23450001, správné zaokrouhlení 0.235

Dilema tvůrce tabulek

- počítáme např. e^x na 3 místa, vychází (po n iteracích) $0.23450000\ldots$
  - je to zaokrouhlením přesného výsledku 0.2344999999, správné zaokrouhlení 0.234
  - nebo jen nepočítám dostatečně přesně 0.23450001, správné zaokrouhlení 0.235
- lze ukázat, že e^x nemůže být strojově reprezentovatelné pro strojově reprezentovatelné x
  - tedy k rozhodnutí stačí konečný počet kroků
  - pro různé funkce různě, zpravidla cca. dvojnásobná přesnost

Co s tím?

- uvědomit si možné problematické chování
- potřebuji skutečně tyto funkce pro svůj výpočet?
  - mnoho problémů má i jiné řešení
- provést transformace, kterými se vyhneme numerické nestabilitě
  - čistě algebraické úpravy
  - podobné $(a+b)^2 = a^2 + 2ab + b^2$
- podle kontextu zvolit vhodnou implementaci
  - knihovní funkce
  - vlastní (Taylorův rozvoj) uzpůsobené specifickým podmínkám

Algebraické úpravy

- výraz $\sqrt{1+x} - \sqrt{1-x}$
- pro malá x odčítání velmi blízkých čísel
- transformace

$$\begin{aligned}\sqrt{1+x} - \sqrt{1-x} &= \\ &= \frac{(\sqrt{1+x} - \sqrt{1-x})(\sqrt{1+x} + \sqrt{1-x})}{\sqrt{1+x} + \sqrt{1-x}} \\ &= \frac{(1+x) - (1-x)}{\sqrt{1+x} + \sqrt{1-x}} \\ &= \frac{2x}{\sqrt{1+x} + \sqrt{1-x}}\end{aligned}$$

- sčítání velmi blízkých čísel – dostatečně přesné

Algebraické úpravy

- výraz $\ln\sqrt{x+1} - \ln\sqrt{x}$
- pro velká x rozdíl blízkých čísel
- transformace

$$\ln\sqrt{x+1} - \ln\sqrt{x} =$$
$$= \ln(x+1)^{\frac{1}{2}} - \ln x^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(\ln(x+1) - \ln x)$$
$$= \frac{1}{2}\ln\frac{x+1}{x} = \frac{1}{2}\ln(1+\frac{1}{x})$$

- možná ztráta přesnosti, ale i tak lepší

Mocninné řady

Taylorův rozvoj

- jedna ze základních vět matematické analýzy

$$f(b) = f(a) + f'(a)\frac{b-a}{1!} + \\ + f''(a)\frac{(b-a)^2}{2!} + \cdots + f^{(n)}\frac{(b-a)^n}{n!} + \\ + \xi$$

kde ξ je dostatečně malé

Mocninné řady

Taylorův rozvoj

- jedna ze základních vět matematické analýzy

$$f(b) = f(a) + f'(a)\frac{b-a}{1!} + \\ + f''(a)\frac{(b-a)^2}{2!} + \cdots + f^{(n)}\frac{(b-a)^n}{n!} + \\ + \xi$$

  kde ξ je dostatečně malé
- základ implementací většiny knihovních funkcí
- v extrémních případech potřebujeme „rozepsat“ a provést algebraické úpravy

Mocninné řady

Taylorův rozvoj základních funkcí

$$e^x = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \dots$$

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \dots$$

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \dots$$

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \dots$$

$$\sqrt{1+x} = 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{2 \cdot 4} + \frac{3x^3}{2 \cdot 4 \cdot 6} - \dots$$

$$\frac{1}{\sqrt{1+x}} = 1 - \frac{x}{2} + \frac{3x^2}{2 \cdot 4} - \frac{3 \cdot 5x^3}{2 \cdot 4 \cdot 6} + \dots$$

Mocninné řady

Demonstrační příklad

- výraz

$$\frac{1-\cos x}{x^2}$$

  se pro $x \to 0$ blíží $\frac{1}{2}$
- pro malá x odečtení dvou blízkých čísel
- konkrétně pro $x = 0.0005$ ve `float`:

$$\begin{aligned} \cos x &= 0.99999988 \\ 1-\cos x &= 1.1920928 \times 10^{-7} \quad \text{(falešná přesnost)} \\ \frac{1-\cos x}{x^2} &= 0.47683709 \end{aligned}$$

- správný výsledek je 0.49999999 (na 8 míst)

Mocninné řady

Demonstrační příklad

- náhrada $\cos x$ Taylorovým rozvojem

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots$$

- pro výpočet na 8 cifer stačí do řádu x^4

$$\frac{1 - \cos x}{x^2} = \frac{1 - 1 + \frac{x^2}{2} - \frac{x^4}{24}}{x^2} = \frac{1}{2} - \frac{x^2}{24}$$

- výsledek výpočtu pro $x = 0.0005$ je 0.49999997
- podstatně lepší přesnost
- řádově méně aritmetických operací

Mocninné řady

Nedostatky

- rychlá konvergence pro malá x, pomalá pro větší
  - přímý důsledek Taylorovy věty
- vyplatí se použít vlastní vzorec pro malé x
  - resp. blízko problematického bodu numerické stability
- v ostatních případech zůstat u knihovní funkce
- jak poznáme, co je „malé x“?

Mocninné řady

Kdy použít

- známe požadovanou přesnost
  - bezpečné je použít přesnost daného typu
  - pro `float` a výsledky ~ 1 je to 10^{-7}
  - při méně přesných vstupních datech méně striktní
- hledáme c aby pro $x < c$ byl největší zanedbaný člen řady menší než požadovaná přesnost

Mocninné řady

Kdy použít

- známe požadovanou přesnost
  - bezpečné je použít přesnost daného typu
  - pro `float` a výsledky ~ 1 je to 10^{-7}
  - při méně přesných vstupních datech méně striktní
- hledáme c aby pro $x < c$ byl největší zanedbaný člen řady menší než požadovaná přesnost
- konkrétně v předchozím příkladu

$$\frac{x^4}{6!} < 10^{-7} \quad \text{tedy} \quad x < 0.09211$$

- zkontrolujeme chování výpočtu v c (v double):

$$\begin{aligned}
\cos c &\doteq 0.995760\,87237414645243 \\
(1-\cos c)/c^2 &\doteq 0.499646\,58945642923198 \\
1/2 - c^2/24 &\doteq 0.499646\,48949583333334 \\
c^4/6! &\doteq 0.000000\,09997574124493
\end{aligned}$$

Mocninné řady

Kdy použít

- výsledný kód pro

$$\frac{1-\cos x}{x^2}$$

```
float x,y;
...
if (x < 0.09211)
      y = 0.5 + x*x/24.0;
else
      y = (1-cos(x))/(x*x);
```

Odmocnina

- ve většině používána k normalizaci vektorů
- silové působení, např. dva bodové náboje **a** a **b**
  - velikost síly

$$F = k_c \frac{q_a q_b}{r^2}$$

    kde $r = \|\mathbf{a} - \mathbf{b}\|$
  - silový vektor

$$\mathbf{F} = F \cdot \frac{\mathbf{a} - \mathbf{b}}{r}$$

- snadný výpočet

$$r^2 = \sum (a_i - b_i)^2$$

- r už vyžaduje odmocninu

Odmocnina

Masivní použití

- počítačová grafika – osvětlení plochy
  - zpravidla interpolací počítáme normály k zakřivené ploše
  - vektory mají správný směr ale nejsou jednotkové
  - pro správný výpočet osvětlení potřebná normalizace
- ke všem těmto výpočtům nepotřebujeme striktně $\sqrt{x}$
- $\frac{1}{\sqrt{x}}$ se hodí mnohem více
  - násobení je lepší než dělení
- navíc zpravidla stačí velmi hrubá aproximace
  - citlivý je hlavně směr vektoru, ten zůstává
- přímo Taylorův rozvoj $\frac{1}{\sqrt{1+x}}$
- iterační metody (Newtonova atd.)

Odmocnina

Fast inverse square root

- hra Quake III na konci 90. let
- převratně realistická grafika
- vděčila velmi rychlému výpočtu $\frac{1}{\sqrt{x}}$
- kód zřejmě pochází z grafických knihoven SGI

Odmocnina

Fast inverse square root

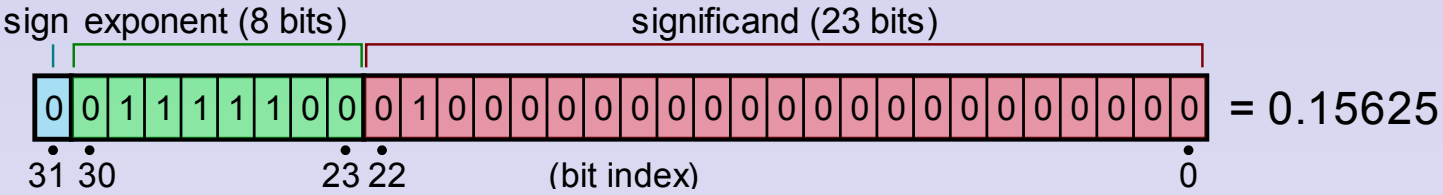
- hra Quake III na konci 90. let
- převratně realistická grafika
- vděčila velmi rychlému výpočtu $\frac{1}{\sqrt{x}}$
- kód zřejmě pochází z grafických knihoven SGI

```
float invSqrt(float x) {
        float xhalf = 0.5f*x,y;
        union {
                float x;
                int i;
        } u;
        u.x = x;
        u.i = 0x5f3759df - (u.i >> 1);
        y = u.x * (1.5f - xhalf * u.x * u.x);
        return y;
}
```

Odmocnina

Fast inverse square root

- funguje na základě IEEE reprezentace čísla
  $x = (1 + m_x) \times 2^{e_x}$



- přitom $m_x = M_x/2^{23}$ a $e_x = E_x - 127$
- základ výpočtu

$$y = \frac{1}{\sqrt{x}}$$

$$\log_2 y = -\frac{1}{2}\log_2 x$$

$$\log_2(1 + m_y) + e_y = -\frac{1}{2}\log_2(1 + m_x) - \frac{1}{2}e_x$$

Odmocnina

Fast inverse square root

- pro $m \in [0, 1)$ si lze dovolit aproximaci

$$\log_2(1 + m) = m + \sigma$$

- dosazením a úpravami dostaneme

$$E_y \times 2^{23} + M_y = R - \frac{1}{2}(E_x \times 2^{23} + M_x)$$

  tj. červený řádek v kódu s empiricky stanovenou konstantou R
- více viz `http://en.wikipedia.org/wiki/Fast_inverse_square_root`

Odmocnina

Fast inverse square root

- poslední krok je jedna iterace Newtonovy metody
- pro vstup x hledáme takové y aby $y = \frac{1}{\sqrt{x}}$
- tj. hledáme kořen funkce $f(y) = \frac{1}{y^2} - x$
- Newtonovou metodou

$$y_{n+1} = y_n - \frac{f(y_n)}{f'(y_n)} = y_n - \frac{\frac{1}{y_n^2} - x}{\frac{-2}{y_n^3}} = y_n + \frac{y_n(1 - x y_n^2)}{2}$$

což už odpovídá poslednímu výrazu v kódu

Odmocnina

Fast inverse square root

- aproximace je překvapivě přesná
  - v Quake III je zakomentována další Newtonova iterace
  - nebyla potřeba
- cca. 4× rychlejší než dělení
- dnes překonána instrukcí `rsqrtss`

Odmocnina

Fast inverse square root

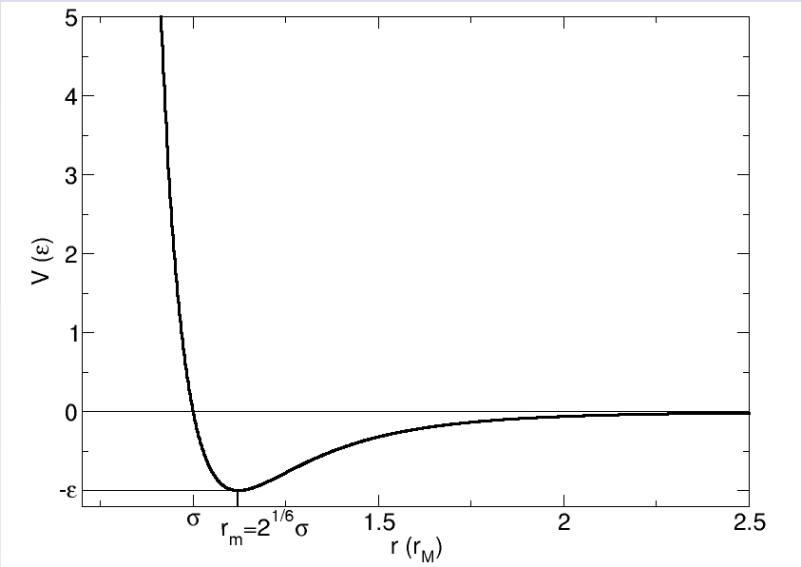
- aproximace je překvapivě přesná
  - v Quake III je zakomentována další Newtonova iterace
  - nebyla potřeba
- cca. 4× rychlejší než dělení
- dnes překonána instrukcí `rsqrtss`
- přesné pochopení konkrétního účelu výpočtu
  - včetně zhodnocení „má smysl tvrdě optimalizovat“
- volba adekvátní metody
  - přispěla k velkému komerčnímu úspěchu
  - pro jiné účely by byla zcela nevhodná

Odmocnina

Lze se jí i vyhnout

- Lenard-Jonesuv potenciál
  - nevazebná interakce dvou atomů
  - významná pro modelování biochemických dějů
- vzorec pro *energii* (potenciál)

$$E_{LJ} = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6} \quad \text{kde } r \text{ je vzdálenost atomů}$$



Odmocnina

Lze se jí i vyhnout

- výpočet velikosti síly

$$F = \frac{dE}{dr} = -\frac{12A}{r^{13}} + \frac{6B}{r^{7}}$$

- liché exponenty ⇒ bude potřeba odmocnina

Odmocnina

Lze se jí i vyhnout

- výpočet velikosti síly

$$F = \frac{dE}{dr} = -\frac{12A}{r^{13}} + \frac{6B}{r^7}$$

- liché exponenty ⇒ bude potřeba odmocnina
- zajímá mě většinou silový vektor

$$\mathbf{F} = F\frac{\mathbf{a}-\mathbf{b}}{r} = (\mathbf{a}-\mathbf{b})\left(\frac{6B}{r^8} - \frac{12A}{r^{14}}\right)$$

- tedy vystačím s r^2

Odmocnina

Lze se jí i vyhnout

- implementace

```
float n,r2,r4,r8,r14,F[3];
int i;
for (n=0,i=0; i<3; i++) {
    F[i] = a[i] - b[i];
    n += F[i]*F[i];
}
r2 = 1.0/n;
r4 = r2*r2; r8 = r4*r4;
r14 = r8*r4*r2;

n = 12*A*r14 - 6*B*r8;
for (i=0; i<3; i++) F[i] *= n;
```

Odmocnina

Lze se jí i vyhnout

- implementace

```
float n,r2,r4,r8,r14,F[4];
int i;
for (n=0,i=0; i<4; i++) {
    F[i] = a[i] - b[i];
    n += F[i]*F[i];
}
r2 = 1.0/n;
r4 = r2*r2; r8 = r4*r4;
r14 = r8*r4*r2;

n = 12*A*r14 - 6*B*r8;
for (i=0; i<4; i++) F[i] *= n;
```

- kvůli vektorizaci může mít smysl `F[4]`

Parametrizace rotace

Aneb jak se vyhnout goniometrickým funkcím

- ve 2D jeden úhel ϕ
- složení součtem, inverze $-\phi$
- aplikace násobením maticí

$$R = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix}$$

Parametrizace rotace

Aneb jak se vyhnout goniometrickým funkcím

- ve 2D jeden úhel ϕ
- složení součtem, inverze $-\phi$
- aplikace násobením maticí

$$R = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix}$$

- goniometrickým funkcím se můžeme vyhnout

$$\sin\phi = \frac{2t}{1+t^2} \qquad \cos\phi = \frac{1-t^2}{1+t^2}$$

- numericky příjemné, nevyjádříme $\phi = \pm\frac{\pi}{2}$
- nelineární vztah ϕ a t

Parametrizace rotace

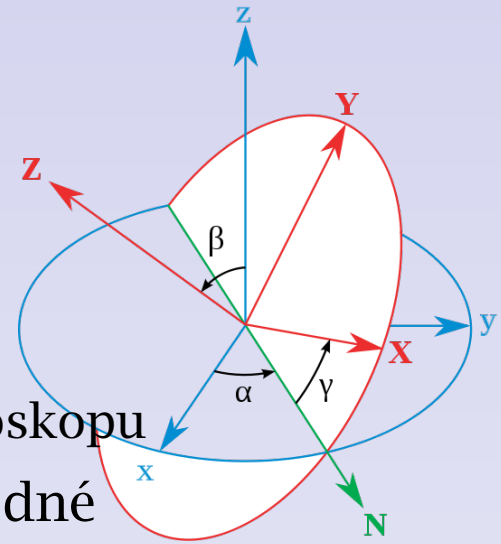
Eulerovy úhly

- 2 stupně volnosti
  - teodolit, sledování bodu ve 3D
  - vykazuje singularity

Parametrizace rotace

Eulerovy úhly

- 2 stupně volnosti
  - teodolit, sledování bodu ve 3D
  - vykazuje singularity
- 3 stupně volnosti – Eulerovy úhly
  - na první pohled intuitivní
  - nekonzistentní konvence
  - častější singularity – zaseknutí gyroskopu
- numericky a programátorsky nevýhodné
  - značně nepřehledné
  - záleží na pořadí
  - singularity – numerické problémy



Parametrizace rotace

Matice

- maticové vyjádření
  - složení 3 rotací podél osy

$$R_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\beta & -\sin\beta \\ 0 & \sin\beta & \cos\beta \end{pmatrix}$$

- aplikovatelná stejná substituce
  - vede na komplikované polynomy

Parametrizace rotace

Matice

- přímo maticí 3×3
- numericky samo o sobě stabilní, pokrývá všechny případy
- příliš mnoho „parametrů navíc“
- musí být ortogonální
- snadno degeneruje
  - nepřesností výpočtu ztrácí ortogonalitu
  - korekce není jednoduchá
- zabere více paměti

Parametrizace rotace

Představa prostoru rotací

- rotace v rovině
  - skalár $x \in [-1, 1]$, kde $t = \sin \frac{\phi}{2}$

Parametrizace rotace

Představa prostoru rotací

- rotace v rovině
  - skalár $x \in [-1, 1]$, kde $t = \sin \frac{\phi}{2}$
- rotace s dvěma stupni volnosti (teodolit)
  - 2D vektor $\mathbf{v}$, $|\mathbf{v}| \in [0, 1]$
  - směr určuje osu, velikost úhel $|\mathbf{v}| = \sin \frac{\phi}{2}$
  - všechny rotace reprezentovány kruhem

Parametrizace rotace

Představa prostoru rotací

- rotace v rovině
  - skalár $x \in [-1, 1]$, kde $t = \sin \frac{\phi}{2}$
- rotace s dvěma stupni volnosti (teodolit)
  - 2D vektor $\mathbf{v}$, $|\mathbf{v}| \in [0, 1]$
  - směr určuje osu, velikost úhel $|\mathbf{v}| = \sin \frac{\phi}{2}$
  - všechny rotace reprezentovány kruhem
- pokrytí (2:1) jednotkovou koulí
  - projekce $\mathbf{v}$ do roviny určuje osu, $z = \cos \frac{\phi}{2}$
  - $\mathbf{v}$ a $-\mathbf{v}$ představují tutéž rotaci

Parametrizace rotace

Představa prostoru rotací

- rotace v rovině
  - skalár $x \in [-1, 1]$, kde $t = \sin \frac{\phi}{2}$
- rotace s dvěma stupni volnosti (teodolit)
  - 2D vektor $\mathbf{v}$, $|\mathbf{v}| \in [0, 1]$
  - směr určuje osu, velikost úhel $|\mathbf{v}| = \sin \frac{\phi}{2}$
  - všechny rotace reprezentovány kruhem
- pokrytí (2:1) jednotkovou koulí
  - projekce $\mathbf{v}$ do roviny určuje osu, $z = \cos \frac{\phi}{2}$
  - $\mathbf{v}$ a $-\mathbf{v}$ představují tutéž rotaci
- parametrizace x, y, z s omezením $x^2 + y^2 + z^2 = 1$
  - netrpí singularitami
  - lze snadno interpolovat (včetně normalizace) apod.

Parametrizace rotace

Představa prostoru rotací

- analogická konstrukce pro obecné rotace ve 3D
- 3D vektor velikosti $[0, 1]$
- všechny rotace jsou reprezentovány plnou koulí
- pokrytí (2:1) jednotkovou hyperkoulí ve 4D
- parametrizace x, y, z, w s omezením $x^2 + y^2 + z^2 + w^2 = 1$
- stejné numericky výhodné vlastnosti

Kvaterniony

- algebraický aparát na vektory ve 4D
- více ekvivalentních definic
- nejjednodušší $\mathbb{H} = \mathbb{R}^4$ s kanonickou bází $(1, i, j, k)$ a násobením

$$i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -1$$

Kvaterniony

- algebraický aparát na vektory ve 4D
- více ekvivalentních definic
- nejjednodušší $\mathbb{H} = \mathbb{R}^4$ s kanonickou bází $(1, i, j, k)$ a násobením
$$i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -1$$
- chápeme $\mathbb{R}^3 \subset \mathbb{H}$ jako ryze imaginární kvaterniony
- potom pro $|q| = 1$ je zobrazení $x \mapsto qx\bar{q}$ rotace ve 3D

Kvaterniony

- algebraický aparát na vektory ve 4D
- více ekvivalentních definic
- nejjednodušší $\mathbb{H} = \mathbb{R}^4$ s kanonickou bází $(1, i, j, k)$ a násobením
$$i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -1$$
- chápeme $\mathbb{R}^3 \subset \mathbb{H}$ jako ryze imaginární kvaterniony
- potom pro $|q| = 1$ je zobrazení $x \mapsto qx\bar{q}$ rotace ve 3D
- nakrytí 2:1 (q a $-q$ reprezentují stejnou transformaci)
- skládání rotací je násobení
- inverze je $\bar{q}$
- korekce degenerace normalizací

Kvaterniony

- součást mnoha knihoven
  - libquat, Boost, Ogre, DirectX, ...
  - optimalizované implementace
- typické funkce
  - norma/normalizace
  - komplement
  - násobení
  - transformace vektoru/vektorů
  - převod z/na Eulerovy úhly
  - převod z/na matice 3×3
- v praxi zpravidla použijeme příhodnou knihovnu
  - tyto operace už před námi někdo naprogramoval lépe
  - musíme chápat principy, na kterých stojí

Interpolace rotací

- použití pro animace ve 3D
- lineární interpolace

$$lerp(q_0, q_1, t) = \frac{(1-t)q_0 + tq_1}{\|(1-t)q_0 + tq_1\|}$$

- nevhodné vlastnosti
  - nelineární vztah t a úhlu rotace
  - špatná kontrola úhlové rychlosti

Interpolace rotací

- sférická lineární interpolace (SLERP)

$$slerp(q_0, q_1, t) = \frac{\sin(1-t)\Omega}{\sin\Omega} q_0 + \frac{\sin t\Omega}{\sin\Omega} q_1$$

kde $\cos\Omega = q_0 \cdot q_1$

Interpolace rotací

- sférická lineární interpolace (SLERP)

$$slerp(q_0, q_1, t) = \frac{\sin(1-t)\Omega}{\sin\Omega} q_0 + \frac{\sin t\Omega}{\sin\Omega} q_1$$

  kde $\cos\Omega = q_0 \cdot q_1$
- v kvaternionech lze vyjádřit

$$slerp(q_0, q_1, t) = q_0(q_0^{-1}q_1)^t$$

- velmi efektivní implementace s použitím SSE, AVX

Interpolace rotací

- sférická lineární interpolace (SLERP)

$$slerp(q_0, q_1, t) = \frac{\sin(1-t)\Omega}{\sin\Omega} q_0 + \frac{\sin t\Omega}{\sin\Omega} q_1$$

  kde $\cos\Omega = q_0 \cdot q_1$
- v kvaternionech lze vyjádřit

$$slerp(q_0, q_1, t) = q_0 (q_0^{-1} q_1)^t$$

- velmi efektivní implementace s použitím SSE, AVX
- pro většinu operací s rotacemi jsou kvaterniony nejlepší volba
  - přítel Google ochotně poradí

Shrnutí

- matematické modely reality
- použití idealizovaného aparátu reálných čísel
- konečná reprezentace čísel je zdrojem problémů
  - různé projevy pro různé operace
  - i v triviálním výpočtu může dojít k numerickému problému
  - míra závadnosti formalizována pojmem numerické stability
- elementární funkce
  - samotná implementace numericky stabilní
  - použití ve výrazech může vést na numerické problémy
  - explicitní Taylorův rozvoj pro okrajové případy
- rychlost kritické části výpočtu
  - kompromis rychlost vs. přesnost
  - změření nemusí být triviální