Informatik II
Numerische Robustheit

EPSILON is NOT 0.00001!

G. Zachmann
Clausthal University, Germany
cg.in.tu-clausthal.de

Historische Randnotiz: der "Floating-Point-Zoo" vor IEEE 754

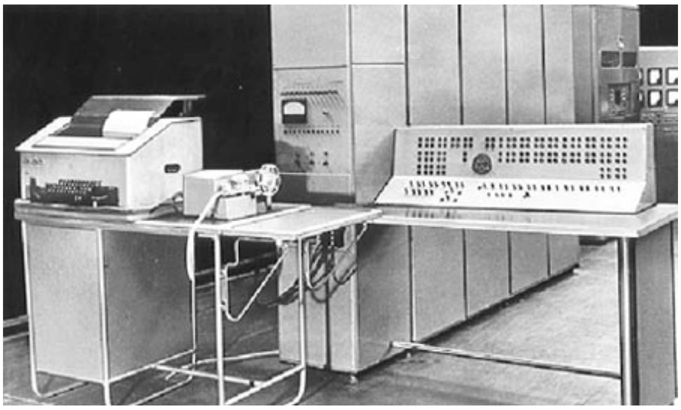
Système	β	p	E_{min}	E_{max}	+ grand représ.
DEC VAX	2	24	-128	126	$1.7 \cdots \times 10^{38}$
(D format)	2	56	-128	126	$1.7 \cdots \times 10^{38}$
HP 28, 48G	10	12	-500	498	$9.9 \cdots \times 10^{498}$
IBM 370	16	6 (24 bits)	-65	62	$7.2 \cdots \times 10^{75}$
et 3090	16	14 (56 bits)	-65	62	$7.2 \cdots \times 10^{75}$

↑ Basis der Zahlen-darstellung

↑ Präzision = Anzahl Stellen

↑ ↑ Min. bzw. max. Exponent

↑ Größte darstellbare Zahl



Der "Setun" (Сетунь), Moskau 1958, besaß ternäre Logik, d.h.,
basierte auf den Ziffern -1, 0, +1.
Davon wurden 50 Stück gebaut.

Zur Erinnerung: das IEEE-754-Format

- **Der** Standard zur Darstellung von Floating-Point-Zahlen
- Das Format für single precision Floats:

Sign	Exponent *e*	Mantisse *m*
1 Bit	8 Bit	23 Bit → 24 Bit Mantisse 1.*m* , wobei die führende "1" das sog. "hidden Bit" ist. (Daher nennt man die 23 Bits (*m*) oft auch Signifikand.)

- Der Wert ist definiert als:

$$v = (-1)^s \cdot (1.m) \cdot 2^{e-127}$$

Alle darstellbaren Werte in single precision (`float`)

Exponent	Mantissa	Sign	Value
1...254	any	0|1	$v = (-1)^s \cdot (1.m) \cdot 2^{e-127}$
0	≠0	0|1	$v = (-1)^s \cdot (0.m) \cdot 2^{-126}$
0	0	0	$v = 0$
0	0	1	$v = -0$
255	0	0	$v \equiv +\infty$
255	0	1	$v \equiv -\infty$
255	≠0	0|1	$v \equiv NaN$

- Beispiel: $0.1_{10} = 0.000110011001100110011001100110011..._2$

$$= 1.100110011001100110011001100110011..._2 \times 2^{-4}$$

$$\approx \underbrace{1.10011001100110011001101_2}_{\text{23 Bit}} \times 2^{-4}$$

$$= 0.10000000149..._{10}$$

- Wertebereich für Floats ≈ $[10^{-38} .. 10^{38}]$
  - Bekommt man in C:

```
#include <float.h>
x = FLT_MAX;
```

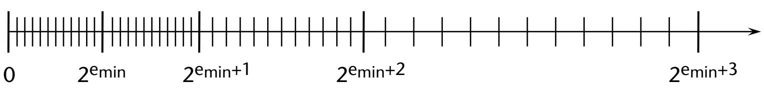
  - Und in C++ mittels:

```
#include <numeric_limits>
x = numeric_limits<float>::min();
```

  - In Python:

```
import sys
sys.float_info.max
```

- Der **`float`**-Zahlenstrahl:



- Bezeichnungen:
  $\mathbb{R}$ = Menge aller reellen Zahlen
  $\mathbb{F}$ = Menge aller Float-Zahlen (mit fester Präzision,
  also immer **`float`** oder immer **`double`**)

Der relative Fehler und ULPs

- Definition relativer Fehler (*relative error*):
  Seien x = das exakte Ergebnis einer Rechnung und
  $\hat{x}$ = das Ergebnis derselben Rechnung mittels Float-Zahlen.
  Dann ist der relative Fehler

$$\frac{|x - \hat{x}|}{|x|}$$

- Definition ULP:
  ULP = "unit in the last place"
  1 ULP = $0.\underbrace{00 \ldots 01}_{\text{Anzahl Stellen der gewählten Darstellung}}$
  Achtung: der Wert eines ULP hängt von der Anzahl Stellen und der Basis ab! (d.h., von der Zahlendarstellung!)

Exkurs: Zugang zur internen Repräsentation

- Wie erhält man das Bit-Muster einer Float-Zahl, die im Speicher steht, mittels Programm?
- Der Standard-Trick ist hier: den Speicherbereich mit zwei Variablen verschiedenen Typs überlagern!
- Im Programm:

```
typedef union
{
    float f;
    unsigned char c[4];
} FloatAndBytes;
...
```

```
...
int main()
{
    FloatAndBytes x;
    x.f = 0.1;
    for (int i = 0; i < 4; i ++ )
        printf( "%02X ", x.c[i] );
    putchar('\n');
    return 0;
}
```


Exkurs: "Infinity Arithmetic"

- Manche propagieren das Rechnen mit **`Inf`** und **`NaN`**
- Beispiel:
  - Die quadratischen Gleichung: $ax^2 + bx + c = 0$
  - Lösungen:

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

  - Als Programm:

```
def solveQuadratic( a, b, c ):
    d = b*b - 4*a*c
    if d < 0.0:
        # Flag "no real solution"
        return (float('nan'), float('nan'))
    s = sqrt( d )
    x1 = (-b + s) / (2*a)
    x1 = (-b - s) / (2*a)
    return (x1, x2)
```

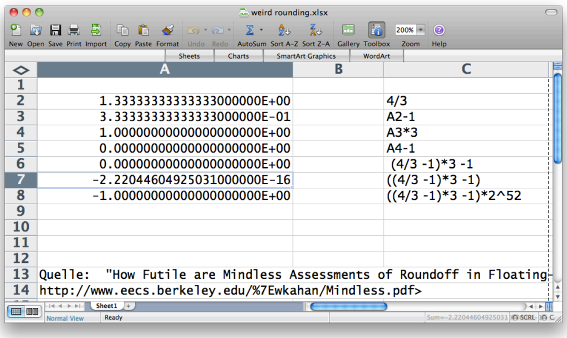
- Branches kosten sehr viel Zeit (die komplette CPU-Pipeline muß geleert werden ("*flush*"))
- Falls solveQuadratic() sehr oft aufgerufen wird (1 Mio mal), kann es sinnvoll sein, die NaN's von der FPU erzeugen zu lassen:

```
def solveQuadratic( a, b, c ):
    s = sqrt( b*b - 4*a*c ) # = evtl. NaN!
    x1 = (-b + s) / (2*a)
    x1 = (-b - s) / (2*a)
    return (x1, x2)
```

- Aber:
  - Früher oder später muß man *doch* auf NaN testen ...
  - Ich will in Ihrem Code sehen, daß Sie sich des Falls d<0 bewußt sind!
  - Mein Rat: verwenden Sie diese Art von "NaN/Inf-Arithmetik" erst, wenn der Profiler hier einen echten Hotspot zeigt!

Beispiele für "Float-Katastrophen"

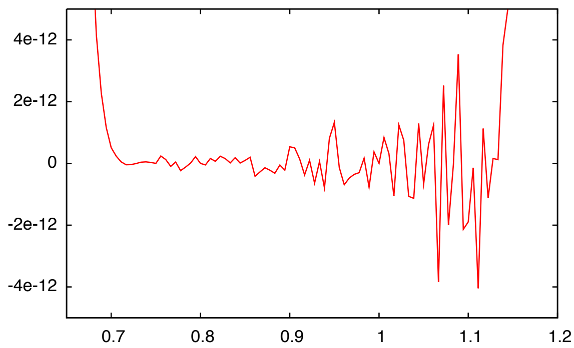
- Der Pentium-1-Division-Bug (der sog. "FDIV bug"):
  8391667/12582905 ergab 0.666869... statt 0.666910... !
- Maple version 7.0:
  Eingabe von $\frac{5001!}{5000!}$ ergab 1 statt 5001 !
- Excel:



weird rounding.xlsx

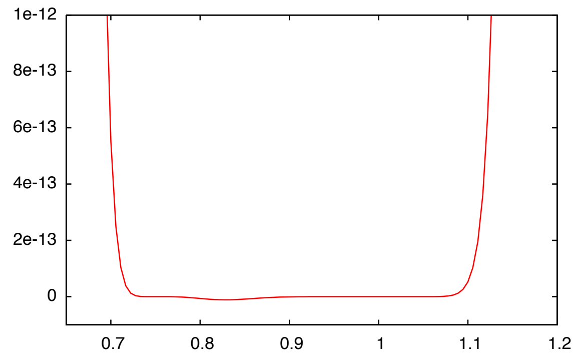
	A	B	C
1			
2	1.33333333333333000000E+00		4/3
3	3.33333333333333000000E-01		A2-1
4	1.00000000000000000000E+00		A3*3
5	0.00000000000000000000E+00		A4-1
6	0.00000000000000000000E+00		(4/3 -1)*3 -1
7	-2.22044604925031000000E-16		((4/3 -1)*3 -1)
8	-1.00000000000000000000E+00		((4/3 -1)*3 -1)*2^52
9			
10			
11			
12			
13	Quelle: "How Futile are Mindless Assessments of Roundoff in Floating-		
14	http://www.eecs.berkeley.edu/%7Ewkahan/Mindless.pdf>		

- Gnuplot (version 4.2.5, Mar 2009):



$$p(x) = x^{16} - 14.75\,x^{15} + 101.875\,x^{14} - 437.34375\,x^{13} + 1306.11328125\,x^{12} - 2877.2958984375\,x^{11} + 4836.4658203125\,x^{10} - 6327.5244140625\,x^{9} + 6511.5380859375\,x^{8} - 5288.271484375\,x^{7} + 3378.095703125\,x^{6} - 1679.423828125\,x^{5} + 637.001953125\,x^{4} - 178.1982421875\,x^{3} + 34.6728515625\,x^{2} - 4.1923828125\,x + 0.2373046875$$

- Der richtige Plot desselben Polynoms, nur in anderer Darstellung:
  - Erzeugt mit derselben Version von Gnuplot
  - Beachte die feinere Y-Skala



$$p(x) = (\frac{3}{4} - x)^5 \cdot (1 - x)^{11}$$

Fehlerquellen beim Rechnen mit Floats

- Rundungsfehler (*roundoff error*):
  - Konstanten und Zwischenergebnisse können meistens nicht exakt dargestellt werden (selbst wenn sie im 10er-System exakt dargestellt werden könnten!)
  - Der Default-Rundungsmodus ist "*round towards nearest*"
- Andere Rundungsmodi:
  "round towards $+\infty$" , "round towards $-\infty$" , "round towards 0"
- Rundungsfehler bei Multiplikation:
  - Ergebnis von a*b sollte 2x24 Bits Mantisse haben
  - Wird aber wieder auf 24 Bits gerundet

- Entstehung des Rundungsfehlers bei Addition:
  - Algorithmus zur Addition zweier Floats a, b :

```
if exponent(a) = exponent(b):
    addiere Mantissen von a und b
    ....
else:
    sei oBdA a die kleinere Zahl
    shifte Mantisse von a nach rechts (≡ Shift des
       Binär-Kommas nach links ≡ Div durch 2)
       und erhöhe Exponent um 1
    bis Exponenten von a und b gleich sind
    weiter wie oben ...
```

  - Allermeistens gehen dabei Bits verloren!

- Konsequenz: die Addition auf Floats ist nicht assoziativ!

$$(a+b)+c \neq a+(b+c)$$

- Beispiel:

$$-10^{20} + (10^{20} + 1) = 0$$
$$(-10^{20} + 10^{20}) + 1 = 1$$

- Auch das Distributivgesetz gilt nicht!
- Zum Glück gilt aber Kommutativität

Das Maschinen-Epsilon

- Definition Maschinen-Epsilon:
  ε_m ist die kleinste Zahl, so daß

$$1.0 + \varepsilon_m \neq 1.0$$

- Wenn $x \in \mathbb{R}$ und $\tilde{x} \in \mathbb{F}$ durch Rundung aus x hervorgeht, dann gilt also

$$|x|(1.0 - \varepsilon_m) \leq |\tilde{x}| \leq |x|(1.0 + \varepsilon_m)$$

- Das Maschinen-Epsilon kann man in den meisten Sprachen abfragen:
  - In C: **`FLT_ESILON`** in **`float.h`**
  - In C++: **`numeric_limits<float>::epsilon()`**
  - In Python: **`sys.float_info.epsilon`**

- Die Darstellungsgenauigkeit von Floats:

Decimal x	Hex	Next representable number
10.0	0x41200000	x + 0.000001
100.0	0x42C80000	x + 0.000008
1,000.0	0x447A0000	x + 0.000061
10,000.0	0x461C4000	x + 0.000977
100,000.0	0x47C35000	x + 0.007813
1,000,000.0	0x49742400	x + 0.0625
10,000,000.0	0x4B189680	x + 1.0

- Fazit: es macht überhaupt keinen Sinn, Floats mit mehr als 8 Stellen auszugeben!

Akkumulation von Rundungsfehlern

- Sei ein Algorithmus mit *N* Rechenoperationen gegeben
- Wenn Rundungsfehler sowohl nach oben als auch nach unten zufällig und gleichverteilt sind, dann ist der Rundungsfehler am Ende des Algorithmus

$$\sqrt{N}\,\varepsilon_m$$

- In der Praxis ist es sehr häufig so, daß die Rundungsfehler nicht gleichverteilt sind! Dann gilt als Gesamtrundungsfehler eher

$$N\varepsilon_m$$

Beispiel: Berechnung der Standardabweichung

- Bezeichne mit
  σ = Standardabweichung
  μ = Mittelwert
- Seien n Datenwerte $x_1, \ldots, x_n$ gegeben
- Die Standardabweichung ist definiert als

$$\sigma_n^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \mu_n)^2$$

wobei

$$\mu_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i$$

- Der naive Algorithmus:

```
mu = 0
for x in data:
   mu += x
mu /= len(data)
sigma2 = 0
for x in data:
   sigma2 += (x - mu) * (x - mu)
sigma2 /= len(data)
```

Nachteile des naiven Algorithmus

- Benötigt 2 Durchläufe
  - Kann unpraktikabel oder unmöglich sein, z.B., wenn die Daten über viele Monate von einem Sensor kommen (z.B. in einem Satelliten)
  - Kann langsam sein, da man 2x durch den Speicher muß, und Zugriff auf den Speicher kostet viel Zeit
- Ergibt große Rechenfehler bei großen Datensätzen!
  - Grund: nach einer Weile werden Zahlen sehr verschiedener Größenordnung addiert

```
  1.xxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxx              ← aktuelles sigma2
+           1.yyyyyyyyyyyyyyyyyyyyyyy     ← aktuelles (x-mu)^2
-------------------------------------
 zz.zzzzzzzzzzzzzzzzzzzzzz
```


- Definiere der Einfachheit halber

$$S_n = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \mu_n)^2$$

- Gesucht ist also eine Methode, um S_n inkrementell zu berechnen, wobei in den Formeln nur Zahlen vorkommen sollten, die ungefähr in einer ähnlichen Größenordnung sind
  - D.h.: $S_n = f(S_{n-1}, x_n)$

- Dazu brauchen wir eine Rekurrenzrelation für μ_n und S_n
- Für μ_n gilt:

$$\mu_n = \frac{(n-1)\mu_{n-1} + x_n}{n} \qquad (1)$$

$$\mu_n = \mu_{n-1} + \frac{1}{n}(x_n - \mu_{n-1}) \qquad (2)$$

- Weiter gilt:

$$\begin{aligned} x_n - \mu_n &= x_n - \mu_{n-1} - \frac{1}{n}(x_n - \mu_{n-1}) && \text{[2 eingesetzt]} \\ &= \frac{n-1}{n}(x_n - \mu_{n-1}) && (3) \end{aligned}$$

- Nun noch S_n umformen:

$$\begin{aligned} S_n &= \sum_{i=1}^{n}(x_i - \mu_n)^2 \\ &= (x_n - \mu_n)^2 + \sum_{i=1}^{n-1}\left(x_i - \mu_{n-1} - \frac{1}{n}(x_n - \mu_{n-1})\right)^2 && \text{[2 eingesetzt]} \\ &= \left(\frac{n-1}{n}\right)^2 (x_n - \mu_{n-1})^2 + \sum_{i=1}^{n-1}(x_i - \mu_{n-1})^2 && \text{[ausmultipliziert und für den ersten Term (3) eingesetzt]} \\ &\quad - \sum_{i=1}^{n-1}\frac{2}{n}(x_i - \mu_{n-1})(x_n - \mu_{n-1}) + \sum_{i=1}^{n-1}\frac{1}{n^2}(x_n - \mu_{n-1})^2 \end{aligned}$$

- Zwischenrechnung:

$$\sum_{i=1}^{n-1} \frac{2}{n}(x_i - \mu_{n-1})(x_n - \mu_{n-1}) =$$

$$\frac{2}{n}(x_n - \mu_{n-1}) \left(\underbrace{\sum_{i=1}^{n-1} x_i}_{(n-1)\mu_{n-1}} - \underbrace{\sum_{i=1}^{n-1} \mu_{n-1}}_{(n-1)\mu_{n-1}} \right) = 0$$

- Damit wird

$$S_n = (\frac{n-1}{n})^2 (x_n - \mu_{n-1})^2 + \sum_{i=1}^{n-1} (x_i - \mu_{n-1})^2 + \frac{n-1}{n^2}(x_n - \mu_{n-1})^2$$

$$= S_{n-1} + \frac{n-1}{n}(x_n - \mu_{n-1})^2$$

- Der neue Algorithmus lautet also:

```
initialisiere S = 0,  und mu = 0
for x in data:
   berechne neues S aus altem S, altem mu, und x
   berechne neues mu als altem mu und x
```

Error-Free Transformations (EFT)

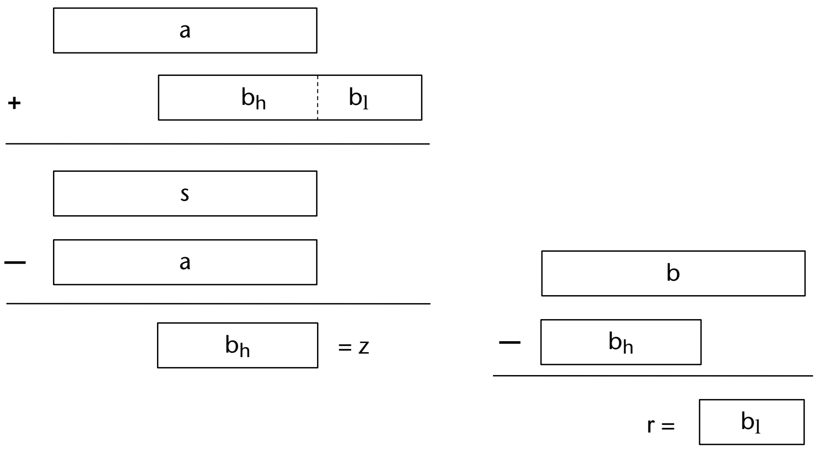
- Achtung: $\mathbb{F}$ ist nicht abgeschlossen bzgl. einer der Grundrechenarten!
- Bezeichnungen:
  Seien $a, b \in \mathbb{F}$.
  Dann bezeichnet $a \oplus b$ die Addition bzgl. der Regeln des IEEE-754-Standards, wobei das Ergebnis wieder zur nähesten FP-Zahl gerundet wird (gemäß dem Rundungsmodus "*round to nearest*", den IEEE-754 definiert). Analog für $\ominus, \otimes, \oslash$.

- Satz:
  Seien $a, b \in \mathbb{F}$, mit $|a| \geq |b|$.
  Dann gibt es Zahlen $s, r \in \mathbb{F}$, so daß
  1. $s + r = a + b$ exakt gilt; und
  2. s die FP-Zahl ist, die am nähesten an $a + b$ liegt.

  Solch eine Äquivalenz heißt *error-free transformation* (EFT).
- Der Algorithmus zur Konstruktion der Zahlen s und r (d.h., die Transformation von a, b in s, r) nach Dekker:

```
TwoSum(a, b ) → s, r:
if |a| < |b|:
   swap( a, b )
s = a + b
z = s − a
r = b − z
```

- Erklärung (kein formaler Beweis):



- Der Algorithmus von Møller-Knuth:
  - Das **`if`** ist sehr kostspielig, vor allem, wenn dieser Algorithmus sehr oft aufgerufen wird (als Ersatz für das eingebaute "+").
  - Die Idee: führe einfach vorigen Algorithmus "in beide Richtungen" aus, d.h., unter der Annahme, daß $|a| \geq |b|$, als auch unter der Annahme, daß $|a| \leq |b|$
  - Damit erhalten wir die folgende EFT [Møller-Knuth]:

```
TwoSum(a, b ) → s, r:
s  = a + b
a' = s - b
b' = s - a
δa = a - a'
δb = b - b'
r  = δa + δb
```

6 FP-Operationen
sind schneller als
3 FLOPS und ein **`if`**