Calcul en virgule flottante

Cours ENPC - Pratique du calcul scientifique

Motivations

Comment expliquer ce résultat ?

```
0.1 + 0.2 == 0.3
```

```
false
```

Alors que

```
1 + 2 == 3
```

```
true
```

Un indice

```
0.1 + 0.2
```

```
0.30000000000000004
```

Effet d'arrondi

```
round(1.4)
```

```
1.0
```

```
round(1.4) + round(1.4)
```

```
2.0
```

```
round(1.4 + 1.4)
```

```
3.0
```

Et celui-ci ?

```
10^19
```

```
-8446744073709551616
```

Alors que

```
10^18
```

```
1000000000000000000
```

```
10.0^19
```

```
1.0e19
```

Comment expliquer l'importance de l'ordre de sommation ?

```
n = 1_000_000
Sₙ = sum(1/k for k ∈ 1:n) - log(n)
```

```
0.5772161649007153
```

```
S′ₙ = sum(1/k for k ∈ n:-1:1) - log(n)
```

```
0.5772161649014986
```

```
Sₙ == S′ₙ
```

```
false
```

- Dans le premier cas $1 + \frac{1}{2} + \cdots + \frac{1}{999999} + \frac{1}{1000000}$ ⇒ on somme les gros d'abord

  Dans le second cas $\frac{1}{1000000} + \frac{1}{999999} + \cdots + \frac{1}{2} + 1$ ⇒ on somme les petits d'abord

  Quel calcul est le plus précis ?
- Si ε est la précision machine $1 + \varepsilon/2 \approx 1$ pour l'ordinateur mais $1 + \varepsilon > 1$ alors $(1 + \varepsilon/2) + \varepsilon/2 \approx 1 + \varepsilon/2 \approx 1$ tandis que $1 + (\varepsilon/2 + \varepsilon/2) = 1 + \varepsilon$

Représentation binaire des nombres réels

Définition de la décomposition en base β

Soit $x \in \mathbb{R}$ et $\beta \in \mathbb{N}^*$. On note

$$\boxed{\pm(a_{-n}a_{-n+1}\dots a_{-1}a_0.\, a_1a_2\dots)_\beta}$$

la représentation de x en base β si

$$\boxed{x = \pm \sum_{k=-n}^{+\infty} a_k \beta^{-k}, \quad a_k \in \{0, \dots, \beta - 1\}}$$

- $\beta = 2$ → écriture **binaire**, $a_k \in \{0, 1\}$ est un **bit**
- $\beta = 10$ → écriture **décimale**, $a_k \in \{0, 1 \dots, 9\}$ est un **chiffre** (**digit** en anglais)
- $\beta = 16$ → écriture **hexadécimale**, $a_k \in \{0, 1 \dots, 9\ A, B, \dots, F\}$

Exemples

$(10)_\beta = 1 \times \beta^1 + 0 \times \beta^0 = \beta$

$(FF)_{16} = 15 \times 16^1 + 15 \times 16^0 = 15 \times 17 = 16^2 - 1 = (255)_{10}$

Représentation périodique

$$(a_0.\, a_1a_2\dots\overline{a_k\dots a_{k+p}})_\beta = (a_0.\, a_1a_2\dots\underbrace{a_k\dots a_{k+p}}\,\underbrace{a_k\dots a_{k+p}}\,\underbrace{a_k\dots a_{k+p}}\dots)_\beta$$

Conversion binaire → décimal

Application simple de la définition $x = \pm \sum_{k=-n}^{+\infty} a_k 2^{-k}$

Exercice $(0.\overline{10})_2 = (0.1010101010\dots)_2$ en base 10

$$(0.\overline{10})_2 = \sum_{k=0}^{+\infty} 2^{-2k-1} = \frac{1}{2}\sum_{k=0}^{+\infty} \left(2^{-2}\right)^k = \frac{1}{2}\frac{1}{1-\frac{1}{4}} = \frac{2}{3} = (0.\overline{6})_{10}$$

Arithmétique binaire

- Les réflexes appris au primaire fonctionnent $(1)_2 + (1)_2 = (10)_2$ (retenue)
- La multiplication par 2 est facile car $2 = (10)_2$

  $$2 \times (a_{-n}a_{-n+1}\dots a_{-1}a_0.\, a_1a_2\dots)_2 = (a_{-n}a_{-n+1}\dots a_{-1}a_0a_1.\, a_2\dots)_2$$

Conversion décimal → binaire

Cas des nombres $0 \leq x < 1$ soit $x = (0.b_1 b_2 \dots b_k \dots)_2$

- $b_0 = 0$
- $2x = (b_1 . b_2 \dots b_k \dots)_2 \Rightarrow \begin{cases} b_1 = 1 & \text{si } 2x \geq 1 \\ b_1 = 0 & \text{sinon} \end{cases}$
- $x \leftarrow 2x - b_1$ et on recommence pour $b_2 \dots$

Exercice : décomposer $(0.1)_{10}$, $(0.2)_{10}$ et $(0.3)_{10}$ en binaire

x	i	b_i
0.1	1	0
0.2	2	0
0.4	3	0
0.8	4	1
0.6	5	1
0.2	6	0
0.4	7	0
0.8	8	1
0.6	9	1

$(0.1)_{10} = (0.0\overline{0011})_2$

$(0.2)_{10} = 2 \times (0.1)_{10} = (0.\overline{0011})_2$

x	i	b_i
0.3	1	0
0.6	2	1
0.2	3	0
0.4	4	0
0.8	5	1
0.6	6	1
0.2	7	0
0.4	8	0
0.8	9	1

$(0.3)_{10} = (0.01\overline{0011})_2$

Exercices

- implémenter l'algorithme décimal → binaire en `Julia` pour des nombres $0 \leq x < 1$
- établir l'algorithme décimal → binaire pour des entiers $n \in \mathbb{N}$ et l'implémenter en `Julia`

Les ensembles de réels à virgule flottante

Norme (IEEE-754, 2008)

Ensemble des réels à virgule flottante défini par

$$\mathbf{F}(p, E_{\min}, E_{\max}) = \left\{(-1)^s 2^E (b_0 . b_1 b_2 \dots b_{p-1})_2 : \quad s \in \{0,1\}, b_i \in \{0,1\} \text{ and } E_{\min} \leqslant E \leqslant E_{\max}\right\}$$

où E est l'exposant et $(b_0 . b_1 b_2 \dots b_{p-1})_2$ la mantisse.

Cet ensemble est décomposé en

$$\boxed{\mathbf{F}(p, E_{\min}, E_{\max}) = \left\{(-1)^s 2^E ({\color{red}1}. b_1 b_2 \dots b_{p-1})_2 : \quad s \in \{0,1\}, b_i \in \{0,1\} \text{ et } E_{\min} \leqslant E \leqslant E_{\max}\right\} \quad \cup \quad \underbrace{\left\{(-1)^s 2^{\color{red}E_{\min}} ({\color{red}0}. b_1 b_2 \dots b_{p-1})_2 : s \in \{0,1\}, b_i \in \{0,1\}\right\}}_{\text{nombres dénormalisés}}}$$

Encodage sur n bits avec $n = 1 + (p-1) + n_E$

- 1 bit pour le signe ($s = 0$ pour $+$ et $s = 1$ pour $-$)
- $p - 1$ bits pour la mantisse
- n_E bits pour l'exposant
- Codage : $s\underbrace{e_0 \dots e_{n_E-1}}_{\text{exposant}}\underbrace{b_1 \dots b_{p-1}}_{\text{mantisse}}$

- On pose $E_{\max} = 2^{n_E - 1} - 1$ et $E_{\min} = -2^{n_E - 1} + 2$ soit un nombre possible d'exposants de $E_{\max} - E_{\min} + 1 = 2^{n_E} - 2$
- Les n_E bits déterminent un entier $e := (e_0 \dots e_{n_E-1})_2$ tel que $0 \leq e \leq 2^{n_E} - 1$
  - $e = 0 \Rightarrow E = E_{\min}$ et (nombre dénormalisé) $x = (-1)^s 2^{E_{\min}} (0.b_1 b_2 \dots b_{p-1})_2$ (y compris 0)
  - $1 \leq e \leq 2^{n_E} - 2 \Rightarrow E = E_{\min} + e - 1$ et (nombre normalisé) $x = (-1)^s 2^E (1.b_1 b_2 \dots b_{p-1})_2$
  - $e = 2^{n_E} - 1 \Rightarrow \begin{cases} \texttt{Inf} & \text{si } s = 0 \text{ et } b_1 b_2 \dots b_{p-1} = 00\dots0 \\ \texttt{-Inf} & \text{si } s = 1 \text{ et } b_1 b_2 \dots b_{p-1} = 00\dots0 \\ \texttt{NaN} & \text{sinon} \end{cases}$

Erreur relative et epsilon machine

- Ensemble des nombres représentables :

$$\mathbf{F}(p, E_{\min}, E_{\max}) = \Big\{(-1)^s 2^E (1.\, b_1 b_2 \ldots b_{p-1})_2 \colon \quad s \in \{0,1\}, b_i \in \{0,1\} \text{ et } E_{\min} \leqslant E \leqslant E_{\max}\Big\}$$
$$\cup \quad \Big\{(-1)^s 2^{E_{\min}} (0.\, b_1 b_2 \ldots b_{p-1})_2 \colon s \in \{0,1\}, b_i \in \{0,1\}\Big\}$$

Les plus grand et plus petit nombres positifs du premier ensemble sont $2^{E_{\min}}$ et $2^{E_{\max}}(2 - 2^{-(p-1)})$.

- On définit l'**epsilon machine** relatif à l'ensemble $\mathbf{F}(p, E_{\min}, E_{\max})$ par $\varepsilon_M = 2^{-(p-1)}$
- **Approximation** : si $|x| \in [2^{E_{\min}}, 2^{E_{\max}}(2 - \varepsilon_M)]$, alors

$$\min_{\widehat{x} \in \mathbf{F}(p, E_{\min}, E_{\max})} \frac{|x - \widehat{x}|}{|x|} \leq \frac{1}{2} 2^{-(p-1)} = \frac{\varepsilon_M}{2}$$

i.e. on peut toujours trouver un représentant de x dans $\mathbf{F}(p, E_{\min}, E_{\max})$ à $\frac{\varepsilon_M}{2}$ près en relatif.

- On définit l'arrondi de x comme le $\widehat{x}$ vérifiant ce minimum et on note

$$\mathrm{fl}\colon \quad \mathbb{R} \to \mathbf{F}(p, E_{\min}, E_{\max}) \ ; \ x \mapsto \mathrm{fl}(x) = \underset{\widehat{x} \in \mathbf{F}(p, E_{\min}, E_{\max})}{\arg\min} \frac{|x - \widehat{x}|}{|x|}$$

En cas d'égalité, le nombre avec le bit le moins significatif égal à 0 est retenu.

Formats de réels selon la norme (IEEE-754, 2008)

	Demi-précision	Simple précision	Double précision
p	11	24	53
n_E	5	8	11
$E_{\min}$	-14	-126	-1022
$E_{\max}$	15	127	1023
ε_M	$2^{-10} = 0.000977$	$2^{-23} = 1.192092910^{-7}$	$2^{-52} = 2.220446049250313 10^{-16}$
type `Julia`	`Float16`	`Float32`	`Float64`

Commandes `Julia`

- `typeof(x)` renvoie le type de `x`
- `bitstring(x)` renvoie "$s\underbrace{e_0 \dots e_{n_E-1}}_{\text{exposant}}\underbrace{b_1 \dots b_{p-1}}_{\text{mantisse}}$"
- `exponent(x)` renvoie l'exposant `E` de `x` sous le format `Int64`

Décomposition des réels à virgule flottante

Algorithme

- Soit $x \in [2^{E_{\min}}, 2^{E_{\max}}(2-\varepsilon_M)]$ (quitte à travailler avec $-x$ si $x < 0$)
- $E = \lfloor \log_2(x) \rfloor \Rightarrow x = 2^E\, y$ avec $y \in [1, 2[$
- Décomposition de $y - 1 = (0.b_1 b_2 \dots b_{p-1})_2$
- $x = 2^E\,(1.b_1 b_2 \dots b_{p-1})_2$

Opérations sur $\mathbf{F}(p, E_{\min}, E_{\max})$

Définition des opérations élémentaires

- Opérations dans $\mathbf{F} = \mathbf{F}(p, E_{\min}, E_{\max})$

$$\forall \circ \in \{+, -, \times, /\}, \quad \hat{\circ} : \mathbf{F} \times \mathbf{F} \to \mathbf{F} \; ; \; (x, y) \mapsto \mathrm{fl}(x \circ y)$$

- Extension à $\mathbb{R}$

$$\forall \circ \in \{+, -, \times, /\}, \quad \hat{\circ} : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbf{F} \; ; \; (x, y) \mapsto \mathrm{fl}(\mathrm{fl}(x) \circ \mathrm{fl}(y))$$

- Remarque importante : $\hat{\circ}$ n'est pas associative

$$(x \hat{+} y) \hat{+} z \neq x \hat{+} (y \hat{+} z)$$

Exemples

```
ε = eps(Float64)
(1+ε/2)+ε/2
```

```
1.0
```

```
1 + (ε/2 + ε/2)
```

```
1.0000000000000002
```

```
2 + ε
```

```
2.0
```

```
2 + 1.00001ε
```

```
2.0000000000000004
```

Exercice : montrer que $0.1 \hat{+} 0.2 \neq 0.3$ dans `Float16`

Rappel : $(0.1)_{10} = (0.0\overline{0011})_2$, $(0.2)_{10} = 2 \times (0.1)_{10} = (0.\overline{0011})_2$ et $(0.3)_{10} = (0.01\overline{0011})_2$

$$(0.1)_{10} = 2^{-4}(1.\underbrace{1001100110}_{10 \text{ bits}}0110011\ldots)_2 \Rightarrow \mathrm{fl}_{16}(0.1) = 2^{-4}(1.1001100110)_2$$

```
x = Float16(0.1) ; exponent(x), bitstring(x)[7:end]
```

```
(-4, "1001100110")
```

$$(0.2)_{10} = 2^{-3}(1.\underbrace{1001100110}_{10 \text{ bits}}0110011\ldots)_2 \Rightarrow \mathrm{fl}_{16}(0.1) = 2^{-3}(1.1001100110)_2$$

```
x = Float16(0.2) ; exponent(x), bitstring(x)[7:end]
```

```
(-3, "1001100110")
```

$$(0.3)_{10} = 2^{-2}(1.\underbrace{0011001100}_{10 \text{ bits}}1100110\ldots)_2 \Rightarrow \mathrm{fl}_{16}(0.1) = 2^{-2}(1.0011001101)_2$$

```
x = Float16(0.3) ; exponent(x), bitstring(x)[7:end]
```

```
(-2, "0011001101")
```

$$0.1 \hat{+} 0.2 = 2^{-4}\left((1.1001100110)_2 + (11.0011001100)_2\right)$$

$$(0.3)_{10} = 2^{-4}(100.1100110100)_2$$

$$\begin{array}{rr} & 1.1001100110 \\ + & 11.0011001100 \\ \hline = & 100.\underbrace{1100110010}_{} \\ \neq & 100.\underbrace{1100110100}_{} \end{array}$$

Encodage des entiers signés

- Les types principaux d'entiers sous `Julia` sont `Int16`, `Int32`, `Int64` (`Int64` par défaut)
- Un entier n est codé sous la forme de p bits : $b_{p-1}b_{p-2}\ldots b_0$
- L'algorithme de correspondance sous `Julia` est le **complément à deux**

$$\boxed{n = -b_{p-1}2^{p-1} + \sum_{i=0}^{p-2} b_i 2^i}$$

- Les $p-1$ premiers bits $b_0, \ldots, b_{p-2}$, déterminent de manière unique un entier entre 0 et $N_{\text{max}} = 2^{p-1} - 1$
- Le dernier bit b_{p-1} opère ou non une translation dans les négatifs de -2^{p-1} si bien que $N_{\text{min}} = -2^{p-1}$

Exemples

$1 = -0 \times 2^{p-1} + \sum_{i=1}^{p-2} 0 \times 2^i + 1 \times 2^0$

```
bitstring(1)
```

```
"0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000001"
```

$-1 = -2^{p-1} + 2^{p-1} - 1 = -1 \times 2^{p-1} + \sum_{i=0}^{p-2} 1 \times 2^i$

```
bitstring(-1)
```

```
"1111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111"
```

Pas de `Inf` ou `NaN` mais comportement cyclique $N_{\text{max}} + 1 = 2^{p-1} \to N_{\text{min}}$ et $N_{\text{min}} - 1 = -2^{p-1} - 1 \to N_{\text{max}}$

```
2^63
```

```
-9223372036854775808
```

```
-2^63-1
```

```
9223372036854775807
```

$2(N_{\text{max}} + 1) = 2^p \to N_{\text{min}} + N_{\text{max}} + 1 = 0$

```
2^64
```

```
0
```

Algorithme de sommation de Kahan

Présentation de l'algorithme de sommation de Kahan

function KAHANSUM(x)

  $\Sigma = 0.$ // somme, on veut calculer $\sum_{i=1}^{n} x_i$

  $c = 0.$ // variable de compensation

  for $i = 1$ **to** LENGTH(x) **do**

    $y = x[i] - c$ // incrément compensé de l'erreur précédente

    $\Sigma' = \Sigma + y$ // $\Sigma \hat{+} y \Rightarrow \exists$ erreur pour $|y| \ll |\Sigma|$

    $\delta\Sigma = \Sigma' - \Sigma$ // évalue la part de y correctement intégrée

    $c = \delta\Sigma - y$ // évalue la petite part de y non intégrée

    $\Sigma = \Sigma'$ // met à jour la somme

  end for

  return Σ // retourne la somme

end function

Exercice

1. Implémenter une fonction "naïve" `MySum` faisant la somme des composantes d'un vecteur `X`
2. Implémenter l'algorithme `KahanSum`
3. Choisir un type `T`, un entier `n` et construire le vecteur `X=[one(T),eps(T).2,...,eps(T)/2]` où `eps(T)/2` est répété $n-1$ fois
4. Comparer les sommes obtenues en utilisant les fonctions `MySum`, `sum` et `KahanSum` sur `X` ainsi que sur `view(X,n:-1:1)`
5. Construire un vecteur aléatoire `Y=rand(T,n)` ainsi qu'une version ordonnée `Ỹ=sort(Y)`
6. Comparer les sommes obtenues sur `Y` et `Ỹ` avec les différents algorithmes. On pourra notamment se servir de la bibliothèque `Xsum.jl` comme référence.

▶ Code

```julia
n = 10_000_000 ; T = Float64 ; ε = eps(T)
X = fill(ε/2,n-1) ; pushfirst!(X,one(T)) ;
```

```
1 + ((n - 1) * ε) / 2 = 1.000000001110223
MySum(X) = 1.0
MySum(view(X, n:-1:1)) = 1.000000001110223
sum(X) = 1.0000000011102188
sum(view(X, n:-1:1)) =

1.0000000011102228
KahanSum(X) = 1.000000001110223
KahanSum(view(X, n:-1:1)) = 1.000000001110223
```

```julia
using Xsum
Y = rand(T,n) ; Ỹ = sort(Y)
Σʳᵉᶠ = xsum(Y) ;
```

```
xsum(Ỹ) - Σʳᵉᶠ = 0.0
MySum(Y) - Σʳᵉᶠ = -7.962808012962341e-7
MySum(Ỹ) - Σʳᵉᶠ = 7.152557373046875e-7
sum(Y) - Σʳᵉᶠ = 0.0
sum(Ỹ) - Σʳᵉᶠ = 0.0

KahanSum(Y) - Σʳᵉᶠ = 0.0
KahanSum(Ỹ) - Σʳᵉᶠ = 0.0
```

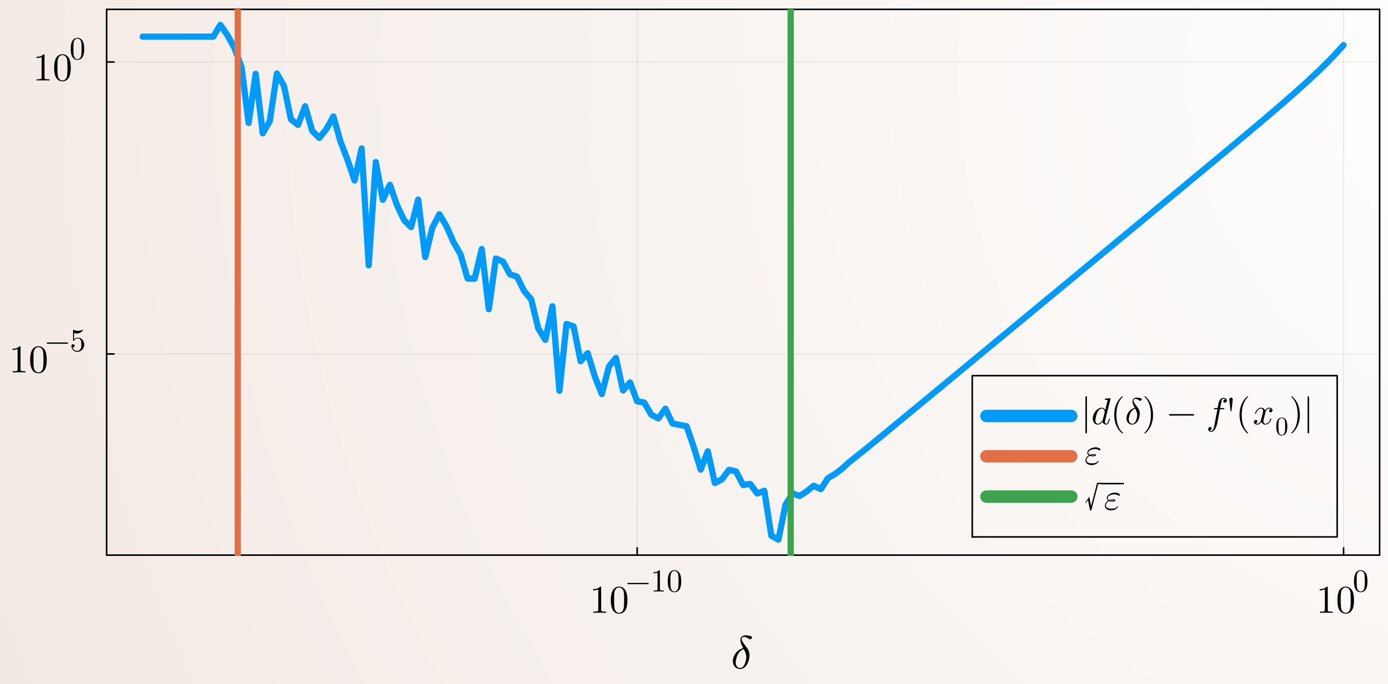
Différentiation numérique

Exercice

On pose $f(x) = \exp x$, $x_0 = 1$ et $d(\delta) = \frac{f(x_0+\delta)-f(x_0)}{\delta}$.

Tracer l'erreur commise entre $d(\delta)$ et $f'(x_0) = \exp x_0$ en fonction de $\delta \in [10^{-17}, 10^0]$ sur un graphe log-log en repérant les droites verticales d'équations $\delta = \varepsilon_M$ et $\delta = \sqrt{\varepsilon_M}$.

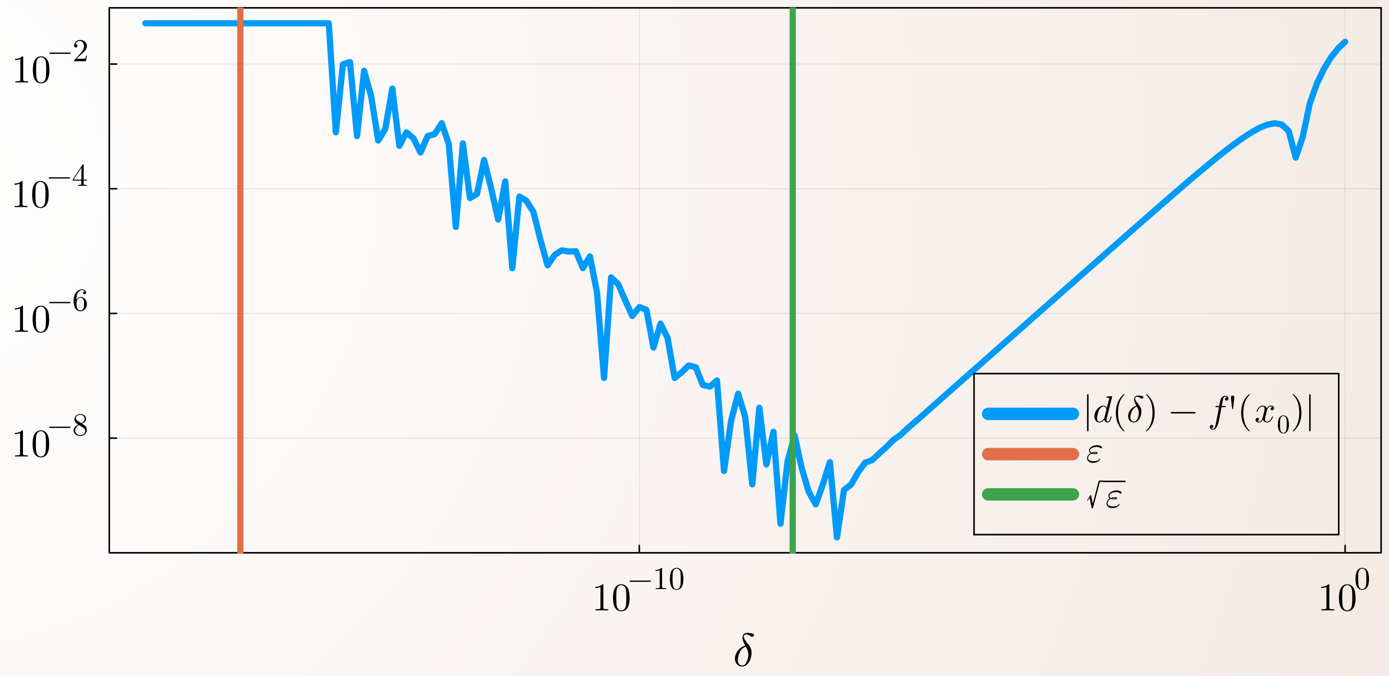
▶ Code



Exercice

Tester avec d'autres fonctions en utilisant la bibliothèque `Zygote.jl` pour la différentiation automatique.

▶ Code



References

IEEE-754, 2008. IEEE Std 754 (Revision of IEEE Std 754-1985), IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic (American {{National Standard}} No. 754-2008). The Institute of Electrical and Electronics Engineers, Inc, 345 East 47th Street, New York, NY 10017, USA.