Calcul en virgule flottante

Cours ENPC - Pratique du calcul scientifique

Motivations

Comment expliquer ce résultat ?

0.1 + 0.2 == 0.3 false

Et celui-ci?

10^19 -8446744073709551616

Alors que

1 + 2 == 3 true

Alors que

Un indice

0.1 + 0.2 0.3000000000000004

Effet d'arrondi

round(1.4)

1.0

round(1.4)+round(1.4)

2.0

round(1.4+1.4)

3.0

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

```
\begin{array}{l} n = 1\_000\_000 \\ S_n = sum(1/k \text{ for } k \in 1:n) - log(n) \\ \\ 0.5772161649007153 \\ \\ S'_n = sum(1/k \text{ for } k \in n:-1:1) - log(n) \\ \\ 0.5772161649014986 \\ \\ S_n == S'_n \\ \\ \text{false} \end{array}
```

- Dans le premier cas $1+\frac{1}{2}+\cdots+\frac{1}{999999}+\frac{1}{1000000}\Rightarrow$ on somme les gros d'abord Dans le second cas $\frac{1}{1000000}+\frac{1}{999999}+\cdots+\frac{1}{2}+1\Rightarrow$ on somme les petits d'abord Quel calcul est le plus précis ?
- Si arepsilon est la précision machine 1+arepsilon/2 pprox 1 pour l'ordinateur mais 1+arepsilon>1 alors (1+arepsilon/2)+arepsilon/2 pprox 1+arepsilon/2 pprox 1 tandis que 1+(arepsilon/2+arepsilon/2)=1+arepsilon

Représentation binaire des nombres réels

Définition de la décomposition en base β

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

$$ig|\pm(a_{-n}a_{-n+1}\ldots a_{-1}a_0.\,a_1a_2\ldots)_eta$$

la représentation de x en base β si

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

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

Exemples

$$egin{align} (10)_eta &= 1 imes eta^1 + 0 imes eta^0 = eta \ (FF)_{16} &= 15 imes 16^1 + 15 imes 16^0 = 15 imes 17 = 16^2 - 1 = (255)_{10} \ \end{pmatrix}$$

Représentation périodique

$$(a_0.\,a_1a_2\ldots\overline{a_k\ldots a_{k+p}})_eta=(a_0.\,a_1a_2\ldots\underline{a_k\ldots a_{k+p}}\,\underline{a_k\ldots a_{k+p}}\,\underline{a_k\ldots a_{k+p}}\ldots)_eta$$

Conversion binaire → décimal

Application simple de la définition $x=\pm\sum_{k=-n}^{+\infty}a_k2^{-k}$

Exercice $(0.\overline{10})_2=(0.1010101010\ldots)_2$ 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 $2 = (10)_2$

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

Conversion décimal → binaire

Cas des nombres $0 \leq x < 1$ soit $x = (0.b_1b_2 \dots b_k \dots)_2$

- $b_0 = 0$
- $ullet 2x = (b_1,b_2\dots b_k\dots)_2 \Rightarrow \left\{egin{array}{ll} b_1 = 1 & ext{si } 2x \geq 1 \ b_1 = 0 & ext{sinon} \end{array}
 ight.$
- $x \leftarrow 2x b_1$ et on recommence pour $b_2 \dots$

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

Exercices

- implémenter l'algorithme décimal \Rightarrow binaire en Julia pour des nombres $0 \le x < 1$
- ullet établir l'algorithme décimal ullet 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

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

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

Cet ensemble est décomposé en

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

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

- ullet 1 bit pour le signe (s=0 pour + et s=1 pour -)
- p-1 bits pour la mantisse
- ullet n_E bits pour l'exposant
- Codage : $se_0 \dots e_{n_E-1} b_1 \dots b_{p-1}$ exposant mantisse

- ullet On pose $E_{
 m max}=2^{n_E-1}-1$ et $E_{
 m min}=-2^{n_E-1}+2$ soit un nombre possible d'exposants de $E_{
 m max}-E_{
 m min}+1=2^{n_E}-2$
- Les n_E bits déterminent un entier e tel que $0 \le e \le 2^{n_E} 1$
 - $ullet e=0\Rightarrow E=E_{\min}$ et (nombre dénormalisé) $x=(-1)^s2^{E_{\min}}(0.b_1b_2\dots b_{p-1})_2$ (y compris 0)
 - $1 \leq e \leq 2^{n_E}-2 \Rightarrow E=E_{\min}+e-1$ et (nombre normalisé) $x=(-1)^s 2^E (1.b_1b_2\dots b_{p-1})_2$

$$ullet e=2^{n_E}-1\Rightarrow egin{cases} ext{Inf} & s=0 ext{ et } b_1b_2\dots b_{p-1}=00\dots 0 \ - ext{Inf} & s=1 ext{ et } b_1b_2\dots b_{p-1}=00\dots 0 \ ext{NaN} & ext{sinon} \end{cases}$$

Les formats de réels à virgule flottante

Erreur relative et epsilon machine

- $\mathbf{F}(p, E_{\min}, E_{\max}) = \left\{ (-1)^s 2^E (\mathbf{1}.\ b_1 b_2 \dots b_{p-1})_2 \colon \quad s \in \{0, 1\}, b_i \in \{0, 1\} \text{ et } E_{\min} \leqslant E \leqslant E_{\max} \right\} \quad \cup \quad \left\{ (-1)^s 2^{E_{\min}} (\mathbf{0}.\ b_1 b_2 \dots b_{p-1})_2 \colon s \in \{0, 1\}, b_i \in \{0, 1\} \right\}$
- On définit le epsilon machine relatif à l'ensemble $\mathbf{F}(p, E_{\min}, E_{\max})$ par

$$arepsilon_M=2^{-(p-1)}$$

- Si $|x| \in [2^{E_{\min}}, 2^{E_{\max}}(2-arepsilon_M)]$, alors $\min_{\widehat{x} \in \mathbf{F}(p, E_{\min}, E_{\max})} \frac{|x-\widehat{x}|}{|x|} \leq \frac{1}{2}2^{-(p-1)} = \frac{arepsilon_M}{2}$ i.e. on peut toujours trouver un représentant de x dans $\mathbf{F}(p, E_{\min}, E_{\max})$ à $\frac{arepsilon_M}{2}$ près en relatif.
- ullet On définit alors l'arrondi de x comme le \widehat{x} vérifiant ce minimum et on note
- $ext{fl:} \quad \mathbb{R} o \mathbf{F}(p, E_{\min}, E_{\max}) \; ; \; x \mapsto ext{fl}(x) = rg \min_{\widehat{x} \in \mathbf{F}(p, E_{\min}, E_{\max})} rac{|x \widehat{x}|}{|x|}$

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

	Demi-précision	Simple précision	Double précision
\overline{p}	11	24	53
$\phantom{aaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaaa$	5	8	11
$E_{ m min}$	-14	-126	-1022
$E_{ m max}$	15	127	1023
$arepsilon_M$	$2^{-10} = 0.000977$	$2^{-23} = 1.192092910^{-7}$	$2^{-52} = 2.22044604925031310^{-16}$
type Julia	Float16	Float32	Float64

Sous Julia, typeof(x) renvoie le type de x et bitstring(x) renvoie " $se_0 \dots e_{n_E-1} b_1 \dots b_{p-1}$ " exposant mantisse

Décomposition des réels à virgule flottante

- ullet Soit $x \in [2^{E_{\min}}, 2^{E_{\max}}(2-arepsilon_M)]$ (quitte à travailler avec -x si x < 0)
- ullet $E = \lfloor \log_2(x)
 floor \Rightarrow x = 2^E \, y$ avec $y \in [1, 2]$
- Décomposition de $y-1=(0.b_1b_2\dots b_{p-1})_2$
- $x = 2^E (1.b_1 b_2 \dots b_{p-1})_2$

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

Définition des opérations élémentaires

• Opérations dans ${f F}={f F}(p,E_{\min},E_{\max})$

$$orall \circ \in \{+,-, imes,/\}, \quad \hat{\circ}: \mathbf{F} imes \mathbf{F}
ightarrow \mathbf{F} \; ; \; (x,y) \mapsto \mathrm{fl}(x \circ y)$$

• Extension à \mathbb{R}

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

• Remarque importante : ô n'est pas associative

$$(x + y) + z \neq x + (y + z)$$

Exemples

```
 \begin{array}{c} \varepsilon = \exp ( \text{Float64} ) \\ (1+\varepsilon/2) + \varepsilon/2 \\ \\ 1.0 \\ \\ 1+(\varepsilon/2+\varepsilon/2) \\ \\ 1.0000000000000000 \\ \\ 2 + \varepsilon \\ \\ 2.0 \\ \\ 2 + 1.00001\varepsilon \\ \\ 2.00000000000000000 \\ \end{array}
```

```
Exercice : montrer que 0.1 \widehat{+} 0.2 \neq 0.3 dans Float16
Rappel: (0.1)_{10} = (0.00011)_2, (0.2)_{10} = 2 \times (0.1)_{10} = (0.0011)_2 et (0.3)_{10} = (0.010011)_2
(0.1)_{10} = 2^{-4} (1.10011001100110011 \dots)_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} (1.10011001100110011 \dots)_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}(1.00110011001100110\dots)_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 + 0.2 = 2^{-4} ((1.1001100110)_2 + (11.0011001100)_2)
                                                                                                           1.1001100110
                                                                                                         11.0011001100
(0.3)_{10} = 2^{-4}(100.1100110100)_2
                                                                                                        100.1100110010
```

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

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

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

Exemples

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

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

bitstring(1)

bitstring(-1)

Pas de Inf ou NaN mais comportement cyclique $N_{
m max}+1=2^{p-1} o N_{
m min}$ et $N_{
m min}-1=-2^{p-1}-1 o N_{
m max}$

2^63

-9223372036854775808

-2^63-1 9223372036854775807

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

2^64

Algorithme de sommation de Kahan

Présentation de l'algorithme de sommation de Kahan

function KahanSum(x)

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

c = 0. // variable de compensation

for i = 1 to LENGTH(x) do

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

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

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

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

 $\Sigma = \Sigma' // \text{ met à jour la somme}$

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 $X=[one(T),eps(T).2,\ldots,eps(T)/2]$ 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 Y=sort(Y)
- 6. Comparer les sommes obtenues sur Y et \tilde{Y} avec les différents algorithmes. On pourra notamment se servir de la bibliothèque Xsum. jl comme référence.

▶ Code

```
n = 10 \ 000 \ 000 \ ; \ T = Float64 \ ; \ \epsilon = eps(T)
 X = fill(\epsilon/2, n-1); pushfirst!(X, one(T));
1 + ((n - 1) * \epsilon) / 2 = 1.00000001110223
MySum(view(X, n:-1:1)) = 1.00000001110223
sum(X) = 1.000000011102188
sum(view(X, n:-1:1)) = 1.0000000011102228
KahanSum(X) = 1.000000001110223
KahanSum(view(X, n:-1:1)) = 1.000000001110223
 using Xsum
 Y = rand(T, n) ; \tilde{Y} = sort(Y)
 \Sigma^{\text{ref}} = \text{xsum}(Y);
xsum(\tilde{Y}) - \Sigma^{ref} = 0.0
MvSum(Y) - \Sigma^{ref} = 1.9837170839309692e-7
MySum(\tilde{Y}) - \Sigma^{\text{ref}} = -1.862645149230957e-9
sum(\tilde{Y}) - \Sigma^{ref} = 0.0
KahanSum(Y) - \Sigma^{ref} = 0.0
KahanSum(\tilde{Y}) - \Sigma^{ref} = 0.0
```

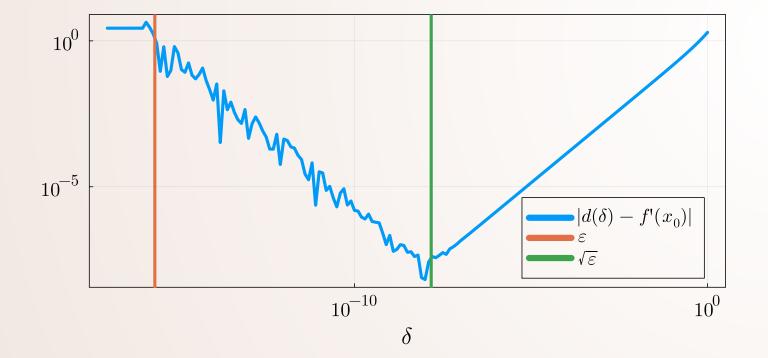
Différentiation numérique

Exercice

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

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 $\delta=\sqrt{\varepsilon_M}$.

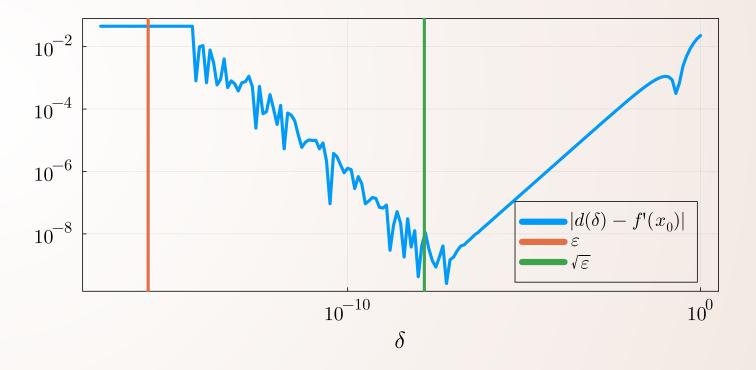
► Code



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.