Vorlesung

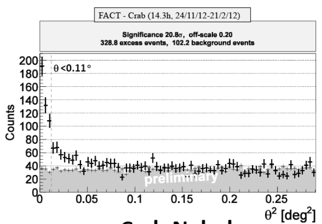
Statistische Methoden der Datenanalyse

Prof. Dr. Dr. Wolfgang Rhode

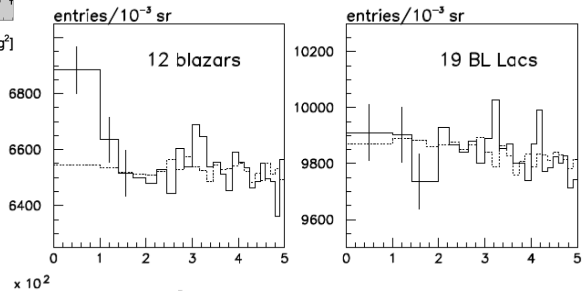
Numerische Grundlagen

Motivation: Beispiele für numerische Artefakte

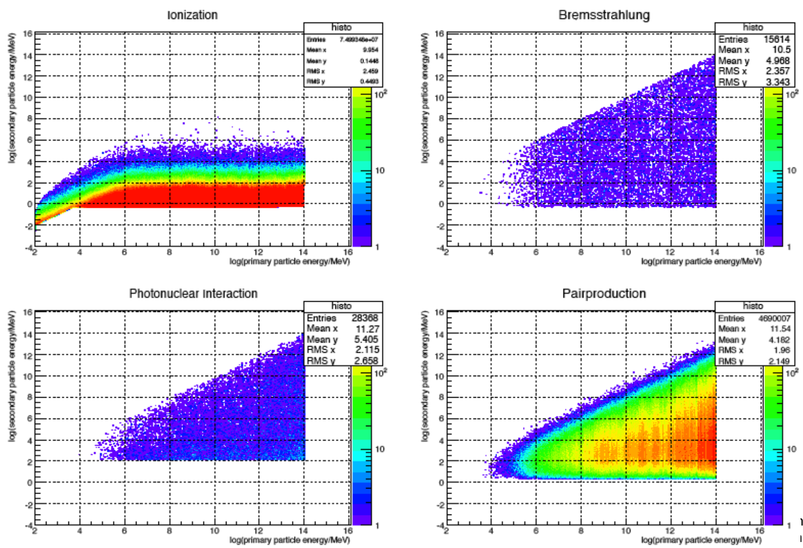
Signalsuche: Rundungen



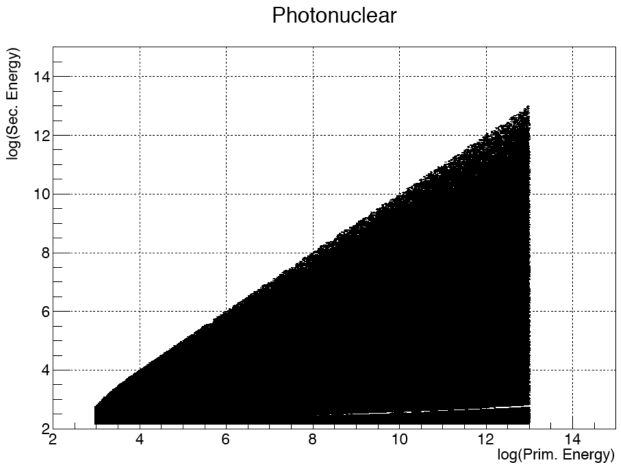
Crab Nebula

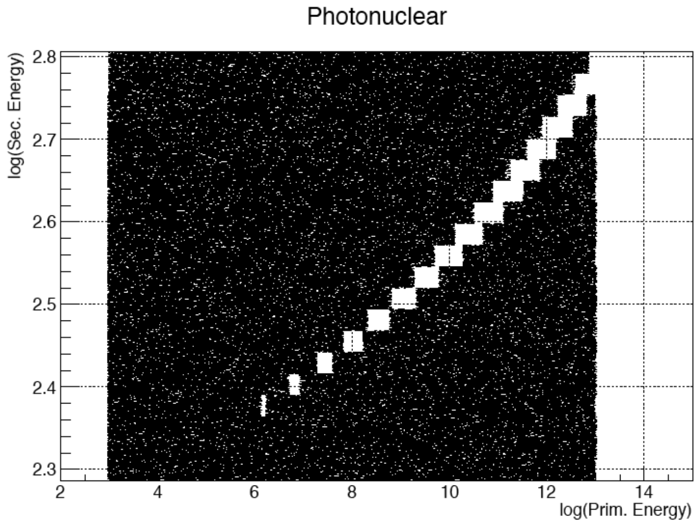


Muon-Monte Carlo: Wechselwirkungen: Testplots

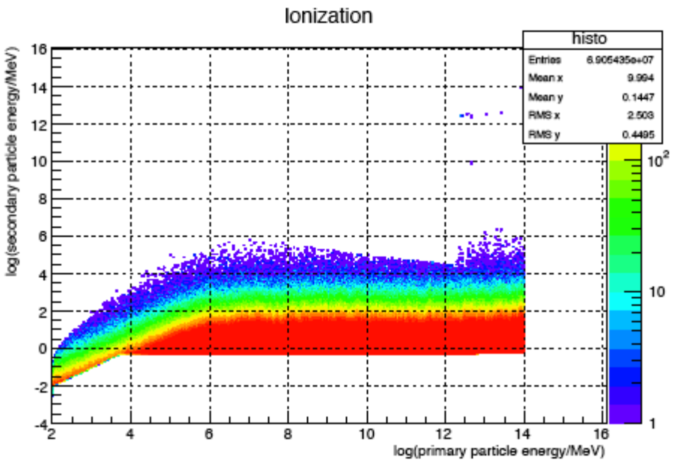


Indexfehler

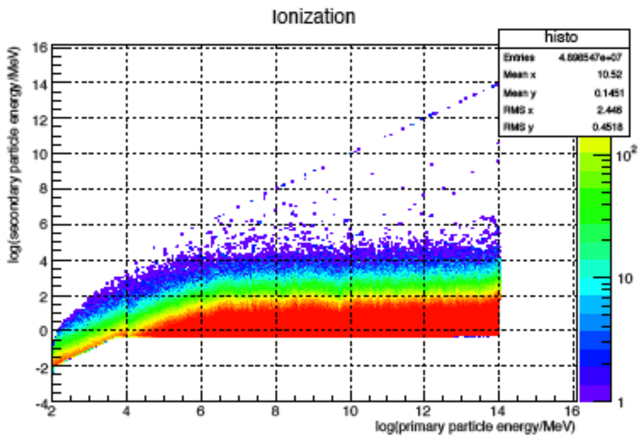


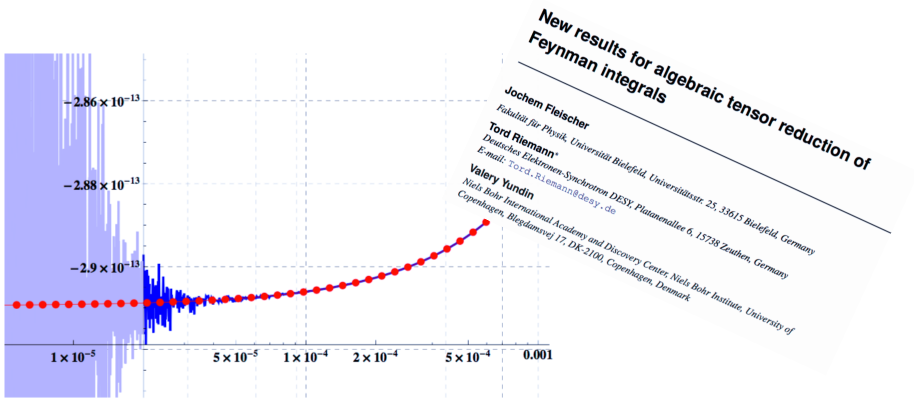


Zu geringe Rechengenauigkeit...



Zu geringe Rechengenauigkeit durch autom. Rundung bei Speicherung/Wiedereinlesen einer Tabelle





Koeffizient ergibt sich durch Lösen eines linearen Gleichungssystems und ist am Rand des Phasenraums instabil, weil man durch eine Determinante teilt, die am Rand des Phasenraums verschwindet.

Überblick

- Arithmetische Ausdrücke
- Darstellung von Zahlen auf dem Computer
- Operationen und Funktionen
- Rundungsfehler und Fehlerfortpflanzung
- Stabilität
- Kondition

Arithmetische Ausdrücke

Beispiele:

$$
\begin{aligned}
|\vec{v}| &= \sqrt{x^2+y^2} && \text{Bahnradius} \\
E &= E_0(1+\varepsilon)^n && \text{Energiegewinn bei stochastischer Beschleunigung} \\
\hat{\sigma} &= \sqrt{\frac{\sum x_i^2 - \left(\sum x_i\right)^2/n}{n}} && \text{Standardabweichung} \\
x_{1,2} &= \frac{-b \pm \sqrt{b^2-4ac}}{2a} && \text{Lösung einer quadratischen Gleichung} \\
h &= \arcsin(\sin\psi\sin\delta + \cos\psi\cos\delta\cos t) && \text{Höhe eines Sterns} \\
\theta &= \frac{1}{2\pi}\int_{-x}^{x} e^{-\frac{t^2}{2}}\,dt && \text{Fläche unter der Normalverteilungskurve}
\end{aligned}
$$

Arithmetische Ausdrücke

- Definitionen:

Variable: $x_1, x_2, ..., x_n \subset \mathcal{R}$.

Zweistellige Operationen: $\mathcal{O} = \{+,-,*,/,**\}$.

Elementare Funktionen: $\mathcal{F} = \{\sin,\cos,\exp,\ln,\mathrm{sqrt},\mathrm{abs},...\}$.

Arithmetische Ausdrücke

Die Menge $\mathcal{A}$=$\mathcal{A}(x_1, x_2, ..., x_n)$ der arithmetische Ausdrücke in $x_1, x_2, ..., x_n$ ist definiert durch

i) $\mathcal{R} \subseteq \mathcal{A}$

ii) $x_l \in \mathcal{A}$, für $l = 1, 2, ..., n$

iii) $g \in \mathcal{A} \Rightarrow (-g) \in \mathcal{A}$

iv) $g, h \in A, \cdot \in \mathcal{O} \;\Rightarrow\; (g \cdot h) \in A$

v) $g \in A, \phi \in \mathcal{F} \Rightarrow \phi(g) \in A$

vi) $A(x_1, x_2, ..., x_n)$ ist minimal unter den Mengen A, die (***i***) – (***v***) erfüllen.

Beispiel: Quadratische Gleichung

$$y = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \in A(a, b, c)$$

Berechnung von Polynomen

- gegeben:

$$f(x) = a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + ... + a_{n-1} x + a_n$$

- Naive Vorgehensweise:
  - Bildung aller Potenzen x^k
  - Multiplikation mit den Koeffizienten a_i
  - Addition
- Horner-Schema

Das Horner-Schema

$$f_i := a_0 x^i + a_1 x^{i-1} + ... + a_{i-1} x + a_i \quad \text{für } i = 1, 2, ..., n$$

$$f_n = f(x)$$

$$\boxed{\text{Horner} - \text{Schema} : \begin{cases} f_0 = & a_0 \;; \\ f_i = & f_{i-1} \cdot x + a_i, \quad i = 1, 2, ..., n; \\ f(x) = & f_n. \end{cases}}$$

- Vorteile:
  - Rekursive Definition möglich
  - Rekursive Ableitung ebenfalls möglich

Erste Ableitung des Horner-Schemas

$$\text{Horner-Ableitung} = \begin{cases} f'(x) & = & f'_n \\ f'_i & = & f'_{i-1} \cdot x + f_{i-1}, \quad i = 1, 2, ..., n \\ f'_0 & = & 0 \end{cases}$$

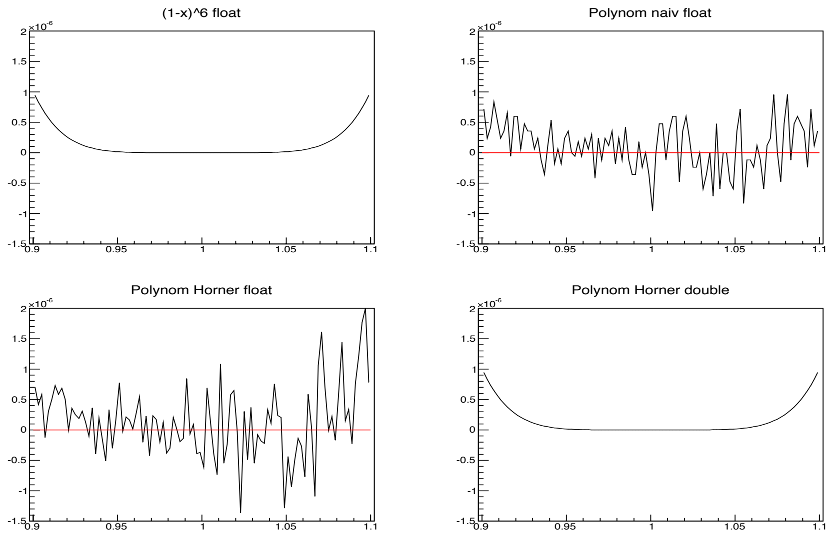
Beispiel: Horner-Schema

$$f(x) = 4x^2 + 2x + 3$$

$$\begin{aligned} f_0 &= 4 & f'_0 &= 0 \\ f_1 &= 4 \cdot x + 2 & f'_1 &= (0 \cdot x) + 4 \\ f_2 &= (4 \cdot x + 2) \cdot x + 3 & f'_2 &= 4 \cdot x + (4 \cdot x + 2) \end{aligned}$$

Beispiel: Numerische Unterschiede

- Berechne $(1-x)^6$
  - Einfach genau
  - Doppelt genau
  - Naiv
  - Horner-Schema



Darstellung von Zahlen im Computer

0	0000	-8	1000
1	0001	-7	1001
2	0010	-6	1010
3	0011	-5	1011
4	0100	-4	1100
5	0101	-3	1101
6	0110	-2	1110
7	0111	-1	1111

technische universität dortmund
Experimentelle Physik Vb
Astroteilchenphysik

Ganze Zahlen

Bits	Zahlenbereich	Bezeichnung des Zahlentyps
8	-128 ... 127	Byte
16	-32768 ... 32767	short integer
32	$-2^{31} ... 2^{31} - 1$	integer
64	$-2^{63} ... 2^{63} - 1$	long integer
8	0 ... 255	unsigned byte
16	0 ... 65535	word

Prof. Dr. Dr. W. Rhode
Numerische Grundlagen
Statistische Methoden der Datenanalyse

technische universität dortmund
Experimentelle Physik Vb
Astroteilchenphysik

Exkurs: Analog-Digital-Converter (ADC)

- Elektronisch registrierte Messdaten werden ganzzahlig im Maschinenformat gespeichert
- ADC misst in einem bestimmten Spannungsintervall und hat *n* Speicherbits zur Verfügung
- Unterteilung des Spannungsintervalls in 2^n Intervalle
- Auflösung von 8 Bit entspricht $1/2^8 = 1/256 \approx 0.39\%$

Prof. Dr. Dr. W. Rhode
Numerische Grundlagen
Statistische Methoden der Datenanalyse

technische universität dortmund
Experimentelle Physik Vb
Astroteilchenphysik

Gleitpunktzahlen

$$\underset{\substack{\uparrow\\ \text{Vor-}\\ \text{zeichen}}}{\pm}\quad \overbrace{\text{xxxxxx}}^{\text{Ziffern}}\quad \underset{\substack{\uparrow\\ \text{Dezimal-}\\ \text{punkt}}}{\cdot}\quad \overbrace{\text{xxxx}}^{\text{Ziffern}}\ 10\quad \underset{\substack{\uparrow\\ \text{Vor-}\\ \text{zeichen}}}{\pm}\quad \underset{\substack{\uparrow\\ \text{Expo-}\\ \text{nent}}}{\text{xxx}}$$

Prof. Dr. Dr. W. Rhode
Numerische Grundlagen
Statistische Methoden der Datenanalyse

Gleitpunktzahlen

- Darstellung:

$$x = s \cdot m \cdot b^e$$

  - s: Vorzeichen
  - m: Mantisse
  - b: Basis
  - e: Exponent

Bits	Vorzeichen	Exponent	Mantisse	Zahlenbereich	Zahlentyp
32	1	8	23	$1.4 \cdot 10^{-45}...3.40... \cdot 10^{38}$	float
64	1	11	52	$4.9 \cdot 10^{-324}...1.79... \cdot 10^{308}$	double

Überlauf und Unterlauf

- Verhalten abhängig von Programmiersprache und Compiler
  - Unterlauf: Null
  - Überlauf: NaN (Not a Number) oder Inf (Infinity)
- Führt oft zu Problemen!
- Möglichst vorher versuchen Problem numerisch zu beheben!

Rundung

Betrachte Maschinenzahlen der Form:

$$z = 0.x_1 \dots x_L B^e$$

mit L als Mantissenlänge, B als Basis und e als Exponent.

Einer solchen Zahl z wird als Wert zugeordnet:

$$z = \sum_{i=1}^{L} x_i B^{e-i} = x_1 B^{e-1} + x_2 B^{e-2} + \dots + x_L B^{e-L}$$

$$= B^{e-L} \left(x_1 B^{L-1} + x_2 B^{L-2} + \dots + x_L \right)$$

Rundung

- Auswertung eines Polynoms an der Stelle *B* notwendig
- Konvertierung zwischen Zahlen zur Basis *B* und Dezimalzahlen notwendig
  - ➢ Horner-Schema!
- Zwischen reellen darstellbaren Maschinenzahlen gibt es nicht-darstellbare reelle Zahlen!
  - ➢ Suche nach einer nahegelegenen Maschinenzahl = Rundung!

Beispiel: Rundungsfehler

- Darstellung der Zahl 0,1

V	E(8 Bit)	M(23 Bit)	
V	$e_1e_2e_3...e_8$	$m_1m_2m_3..............m_{21}m_{22}m_{23}$	
0	0111.1011	1001.1001.1001.1001.1001.100	$= 0,0999999940$
0	0111.1011	1001.1001.1001.1001.1001.101	$= 0,1000000015$

technische universität dortmund
Experimentelle Physik Vb
Astroteilchenphysik

Rundung

- Definition: Eine Rundung heißt korrekt, wenn zwischen einer reellen Zahl x und ihrer gerundeten Zahl $\tilde{x}$ keine Maschinenzahl liegt
- Optimale Rundung: nächstgelegene Maschinenzahl. Sind zwei Zahlen gleich weit entfernt, wird aus statistischen Gründen diejenige mit x_L gerade genommen
- Rundung durch Abschneiden: Die Ziffern nach der *L*-ten Stelle werden weggelassen
- Erfüllen beide die obige Definition!

Prof. Dr. Dr. W. Rhode
Numerische Grundlagen
Statistische Methoden der Datenanalyse

technische universität dortmund
Experimentelle Physik Vb
Astroteilchenphysik

Beispiel: Rundung

Beispiel	Optimal	Abschneiden
x	$\tilde{x}$	$\tilde{x}$
$x_1 = .123456_{10}5$	$.123_{10}5$	$.123_{10}5$
$x_2 = .56789_{10}5$	$.568_{10}5$	$.567_{10}5$
$x_3 = .123500_{10}5$	$.124_{10}5$	$.123_{10}5$
$x_4 = .234500_{10}5$	$.234_{10}5$	$.234_{10}5$

Prof. Dr. Dr. W. Rhode
Numerische Grundlagen
Statistische Methoden der Datenanalyse

technische universität dortmund
Experimentelle Physik Vb
Astroteilchenphysik

Rundung

- Abschätzung des relativen Fehlers:

$$\frac{|x-\tilde{x}|}{|x|} \leq \varepsilon = B^{1-L} \qquad x \neq 0$$

- Rundungsfehler ist beschränkt durch maschinenabhängige Zahl ε

Prof. Dr. Dr. W. Rhode
Numerische Grundlagen
Statistische Methoden der Datenanalyse

Numerische Fehler bei verschiedenen Operationen

Für die zweistelligen Operationen $\circ \in \{+, -, *, /\}$ gilt bei korrekter Rundung:

$$\frac{|x \circ y - \widetilde{x \circ y}|}{|x \circ y|} \leq \varepsilon = B^{1-L} \qquad x \neq 0$$

B sei hier die Basis, L sei die Mantissenlänge, es liege kein Über- oder Unterlauf vor.

Numerische Fehler bei verschiedenen Operationen

Bei Berechnung einer Potenz x^y gilt:
Ist y klein und ganzzahlig (=2, 3, ...) kann der Wert durch Ausmultiplizieren bestimmt werden. Ansonsten wird

$$x^y = \exp(y \cdot \ln(x))$$

berechnet. Der relative Fehler ist i.A. größer als bei zweistelligen Operationen

$$\frac{\Delta f}{f} = c \cdot \varepsilon \quad mit \quad c > 1.$$

Numerische Fehler bei verschiedenen Operationen

- Zur Bestimmung von Funktionswerten anderer elementarer Funktionen werden Approximationsverfahren eingesetzt
- Schema des Approximationsverfahrens:

$$x \rightarrow \text{Argumentreduktion} \rightarrow \text{Approximation} \rightarrow \text{Ergebnisanpassung} \rightarrow f(x)$$

Numerische Fehler bei verschiedenen Operationen

- Argumentreduktion: Zurückführung der Funktionswertberechnung auf kleinen Argumentbereich mithilfe von Hilfsformeln
- Approximation: Mithilfe von verschiedenen Verfahren
  - Kettenbruchdarstellung
  - Polynomapproximation
  - Potenzreihenentwicklung
  - Iterationsverfahren
- Ergebnisanpassung: Rückgängig machen der Argumentreduktion

Beispiel: Approximationsverfahren

- Betrachtung der Wurzelfunktion:

$$\sqrt{x} = \mathrm{sqrt}(x) \text{ für } x = mB^e$$

mit der Basis B, dem Exponenten e und der Mantisse $m \in [1/B, 1]$

- Argumentreduktion und Ergebnisanpassung:

$$\sqrt{x} = \sqrt{x_0} \cdot B^S \text{ mit } \begin{cases} x_0 = m, & S = e/2, \quad \text{für e gerade} \\ x_0 = \frac{m}{B}, & S = (e+1)/2, \quad \text{für e ungerade} \end{cases}$$

Dabei ist

$$x_0 \in [1/B^2, 1]$$

Beispiel: Approximationsverfahren

- Kettenbruchdarstellung mit optimalen Koeffizienten für Intervall [0.01, 1]
- Ansatz:

$$w^*(x) = t_2 x + t_1 + \frac{t_0}{x + s_0}$$

- Bestimmung der Koeffizienten, so dass

$$\sup_{x \in [0.01,1]} |\sqrt{x} - w^*(x)| \stackrel{!}{=} \min.$$

- Ergebnis:

$$t_2 = 0.5881229,\ t_1 = 0.467975327625$$
$$t_0 = -0.0409162391674,\ s_0 = 0.099998$$

- Relativer Fehler: $\forall\ x_0 \in [0.01, 1] :\ w^* < 0.02$

Beispiel: Approximationsverfahren

- Potenzreihenentwicklung, z.B. Potenzreihe um 1 von folgender Funktion:

$$\sqrt{1-z} = 1 - \frac{1}{2}z - \frac{1}{8}z^2 - \frac{1}{16}z^3 - \frac{5}{128}z^4 - \ldots$$

- Konvergenzradius von 1
- Konvergiert nur für $x \approx 1$ ($z \approx 0$) genügend schnell
- Sehr langsam für kleine x
  - Für praktische Zwecke untauglich

Beispiel: Approximationsverfahren

- Iterationsverfahren:

$$\begin{aligned} \text{Anfangsnäherung } w_0 &> 0 \\ \overline{w_i} &= x/w_i \\ w_{i+1} &= (\overline{w_i} + w_i)/2 \end{aligned}$$

- Abbruch bei Erreichen gewünschter Genauigkeit:

$$|w_0 + \overline{w_0}| < 10^{-x}$$

Beispiel: Approximationsverfahren

- Iterationsverfahren auf Taschenrechner mit *B*=10 und *L*=12
- Beispiel: *x*=0.01

i	0	1	2	3	4	...	7
w_i	1	0.505...	0.2624...	0.1502...	0.1084	...	0.1

- Quadratische Konvergenz!

Beispiel: Approximationsverfahren

- Vergleich relativer Fehler
  - Kettenbruchentwicklung: < 0.02
  - Potenzreihenentwicklung mit 14 Rechenoperationen: < 10^{-5}
  - Iterationsverfahren mit 10 Iterationen: < 10^{-5}

Numerische Fehler bei verschiedenen Operationen

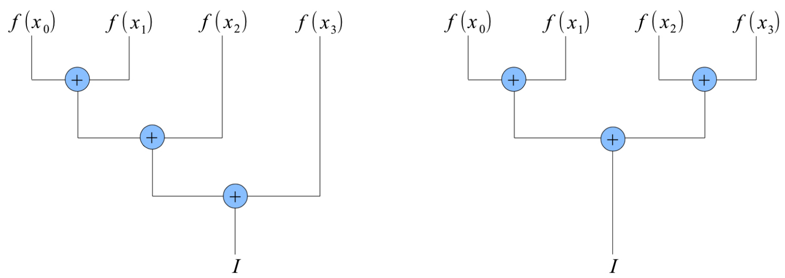
Außer in der Nähe von Nullstellen und Polen gilt für die relative Abweichung:

$$\frac{f(x) - \widetilde{f(x)}}{f(x)} \leq c_f \cdot \varepsilon$$

mit $\varepsilon = B^{1-L}$, c_f hängt von der Approximation und der Argumentreduktion ab.

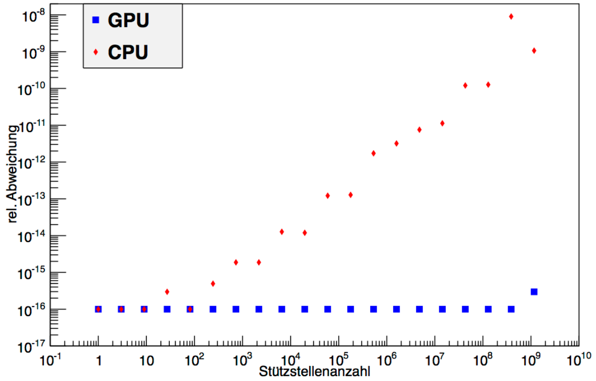
Beispiel: Fortpflanzung numerischer Fehler

- Verschiedene Ausführungen von Summationen möglich
  (z.B. unterschiedlich für numerische Interpolation bei CPUs und GPUs)



Beispiel: Fortpflanzung numerischer Fehler

- Reihenfolge bei Ausführung der Summation ist nicht egal...



Beispiel: Fortpflanzung numerischer Fehler

- Warum?
  - GPU: es werden immer 2 gleich große Zahlen addiert
  - CPU: es werden kleine Zahlen auf eine immer größer werdende Zahl addiert
  - ➢ Rundungsfehler wirken sich unterschiedlich stark aus!
  - ➢ Rechnungen stets überprüfen auf Größenordnungen der auftretenden Zahlen und Zwischenschritte
  - ➢ Sinnvoller Aufbau von Funktionen in Programmen überdenken

Stabilität und Kondition

- **Stabilität:**
  Aussage über Einfluss von Rundungsfehlern bei ungenauer Rechnung

- **Kondition:**
  Fortpflanzung von Anfangsfehlern bei genauer Rechnung

Motivation: Numerische Stabilität

- Betrachte altbekannte Funktion in unterschiedlichen Schreibweisen

$$\textbf{a)}\quad f(x) = (1-x)^6$$

$$\textbf{b)}\quad f(x) = 1 - 6x + 15x^2 - 20x^3 + 15x^4 - 6x^5 + x^6$$

  - Fall a): „eine“ Operation → stabil
  - Fall b): Folge von Operationen→ numerisch instabil

Numerische Stabilität an Beispielen

- Abnahme der Genauigkeit für größer werdendes *x*
  → Abnahme der Genauigkeit bei Differenzbildung großer Zahlen

$$f(x) = (x^3 + \tfrac{1}{3}) - (x^3 - \tfrac{1}{3}), \Rightarrow \forall x: \; f(x) = \tfrac{2}{3}$$

x	$\widetilde{f(x)}$
1	$0,666.666.666...$
10^3	$0,666.666.663...$
10^9	$0,663...$
10^{11}	0

Numerische Stabilität an Beispielen

- Abnahme der Genauigkeit für kleiner werdendes *x*
  → Auslöschung führender Ziffern und Verstärkung der relativen Fehler bei Summen- bzw. Differenzbildung zweier gleich großer Zahlen

$$f(x) = ((3 + \tfrac{x^3}{3}) - (3 - \tfrac{x^3}{3}))/x^3, \Rightarrow \forall x: \; f(x) = \tfrac{2}{3}$$

x	$\widetilde{f(x)}$
10^{-1}	$0,666.666.667...$
10^{-3}	$0,666.67...$
10^{-6}	0

Numerische Stabilität an Beispielen

- Abnahme der Genauigkeit für *x*→0
  → Division durch kleine Zahl aus Subtraktion gleich großer Zahlen

$$f(x) = \frac{\sin^2(x)}{1-\cos^2(x)}, \quad \forall x: f(x) = 1.$$

Numerische Stabilität an Beispielen

- Instabilität in der Nähe des Pols bei 90°

$$f(x) = \frac{\sin(x)}{\sqrt{1-\sin^2(x)}}, \quad \forall x: f(x) = tg(x).$$

Numerische Stabilität an Beispielen

- Abnahme der Genauigkeit für größer werdendes *x*
  → Vergleich mit Anfang der Reihenentwicklung

$$f(x) = e^{\frac{x^2}{3}} - 1.$$

$$(= \frac{x^2}{3} + \frac{x^4}{8} \ldots)$$

Numerische Stabilität an Beispielen

- Programmierung der Formel für die Standardabweichung einer Gaußverteilung und deren Test mit konstanten Messwerten

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

Für $x_i = x =$const. gilt $\sigma_n = 0$.

x	$\widetilde{\sigma}_{10}$	$\widetilde{\sigma}_{20}$
100/3	$1.204 \cdot 10^{-3}$	$1.131 \cdot 10^3$
1000/29	$8.062 \cdot 10^{-4}$	0 ↑ Negative Wurzel wird 0 gesetzt

Was sollte also vermieden werden?

- Subtraktion gleich großer Zahlen
  - Auslöschung führender Ziffern
  - Verstärkung relativer Fehler
- Division durch kleine Zahl
  - Verstärkung absoluter Fehler
- Multiplikation mit großen Zahlen
  - Verstärkung absoluter Fehler

Fehler bei Auslöschung

- Im Allgemeinen fehlerfrei
- Instabilität von Vergrößerung vorher akkumulierter Fehler

B=10, L=7

$$\begin{array}{rrl} & 0.2789014 \cdot 10^3 & \\ & -0.2788876 \cdot 10^3 & \\ \hline \text{Differenz:} & 0.0000138 \cdot 10^3 & \text{keine Rundungsfehler} \\ \text{normalisiert:} & 1.38 \cdot 10^{-2} & \end{array}$$

Fehler bei Auslöschung

- Relativer Fehler rund 25.000 mal so groß wie Eingangsfehler

$B{=}10,\ L{=}6$

		Rel. Fehler
opt. gerundet	$0.278901 \cdot 10^3$	$< 2 \cdot 10^{-6}$
opt. gerundet	$-0.278888 \cdot 10^3$	$< 2 \cdot 10^{-6}$
Differenz:	$0.000013 \cdot 10^3$	
normalisiert:	$1.3 \cdot 10^{-2}$	$> 5 \cdot 10^{-2}$

technische universität dortmund
Experimentelle Physik Vb
Astroteilchenphysik

Division durch kleine Zahl

- Trotz Division gibt es auch stabile Ausdrücke...
  - Stabilität folgt aus Gestalt der Schranken für den relativen Fehler

$$f(x) = \begin{cases} 1, & \text{für } x = 0 \\ \frac{\sin(x)}{x}, & \text{für } x \neq 0 \end{cases} \quad \text{bei } x \to 0$$

und

$$f(x) = \begin{cases} 1, & \text{für } x = 1 \\ \frac{x-1}{\ln(x)}, & \text{für } x \neq 1 \end{cases} \quad \text{bei } x \to 1$$

Prof. Dr. Dr. W. Rhode
Numerische Grundlagen
Statistische Methoden der Datenanalyse

technische universität dortmund
Experimentelle Physik Vb
Astroteilchenphysik

Stabilisierung

- Umformung der Differenz durch Erweitern

$$\text{a)}\ \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Instabil für grosse } x}}{\sqrt{x+1} - \sqrt{x}} = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Stabil für grosse } x.}}{\frac{1}{\sqrt{x+1}+\sqrt{x}}}$$

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

$$\text{b)}\ \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Instabil für } x \to 0}}{1 - \cos(x)} = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Stabil für } x \to 0.}}{\frac{\sin^2(x)}{1+\cos(x)}} = 2\sin(\tfrac{x}{2})$$

Prof. Dr. Dr. W. Rhode
Numerische Grundlagen
Statistische Methoden der Datenanalyse

technische universität dortmund
Experimentelle Physik Vb
Astroteilchenphysik

Stabilisierung von Mittelwert und Standardabweichung

- Unpraktisch: Bei direkter Berechnung müssen alle Messwerte gespeichert werden

$$\bar{x}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i$$

$$\sigma_n = \sqrt{t_n/n} \text{ oder } \sigma_{n-1} = \sqrt{t_n/(n-1)}$$

$$t_n = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x}_n)^2$$

Prof. Dr. Dr. W. Rhode
Numerische Grundlagen
Statistische Methoden der Datenanalyse

Stabilisierung von Mittelwert und Standardabweichung

- Naive Umrechnung:
  - Vorteil: Berechnung ohne Speicherung
  - Nachteil: Instabilität wegen Auslöschung

$$\begin{aligned} t_n &= \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - 2\bar{x}_n \sum_{i=1}^{n} x_i + \bar{x}_n^2 \sum_{i=1}^{n} 1 \\ &= \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}_n^2 \\ &= \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2 \end{aligned}$$

technische universität dortmund
Experimentelle Physik Vb
Astroteilchenphysik

Stabilisierung von Mittelwert und Standardabweichung

- Betrachte Differenzen

$\bar{x}_n - \bar{x}_{n-1}$ und $t_n - t_{n_1}$:

$$\begin{aligned} \bar{x}_n - \bar{x}_{n-1} &= \frac{(n-1)\bar{x}_{n-1} + x_n}{n} - \bar{x}_{n-1} \\ &= \frac{x_n - \bar{x}_{n-1}}{n} = \frac{\delta_n}{n}, \\ \delta_n : &= x_n - \bar{x}_{n-1}, \end{aligned}$$

Prof. Dr. Dr. W. Rhode
Numerische Grundlagen
Statistische Methoden der Datenanalyse

technische universität dortmund
Experimentelle Physik Vb
Astroteilchenphysik

Stabilisierung von Mittelwert und Standardabweichung

$$\begin{aligned} t_n - t_{n-1} &= \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}_n^2\right) - \left(\sum_{i=1}^{n-1} x_i^2 - (n-1)\bar{x}_n^2\right) \\ &= x_n^2 - n\bar{x}_n^2 + (n-1)\bar{x}_{n-1}^2 \\ &= (\delta_n + \bar{x}_{n-1})^2 - n\left(\bar{x}_{n-1} + \frac{\delta_n}{n}\right)^2 + (n-1)\bar{x}_{n-1}^2 \\ &= \delta_n\left(\delta_n + \frac{\delta_n}{n}\right) \\ &= \delta_n\left[(x_n - \bar{x}_{n-1}) - (\bar{x}_n - \bar{x}_{n-1})\right] \\ &= \delta_n(x_n - \bar{x}_n). \end{aligned}$$

Prof. Dr. Dr. W. Rhode
Numerische Grundlagen
Statistische Methoden der Datenanalyse

technische universität dortmund
Experimentelle Physik Vb
Astroteilchenphysik

Stabilisierung von Mittelwert und Standardabweichung

- Erhalte Rekursionsformeln

$$\begin{aligned} \bar{x}_1 &= x_1, \quad t_1 = 0 \\ \delta_i &= x_i - \bar{x}_{i-1}, \; i \geq 2 \\ \bar{x}_i &= \bar{x}_{i-1} + \frac{\delta_i}{i}, \; i \geq 2 \\ t_i &= t_{i-1} + \delta_i(x_i - \bar{x}_i), \; i \geq 2 \end{aligned}$$

mit $\sigma_n = \sqrt{t_n/n}$ bzw. $\sigma_n = \sqrt{t_n/(n-1)}$.

- Differenzen nun harmlos, da mögliche Auslöschung keine große Verstärkung des relativen Fehlers bewirken kann, da Differenz mit kleiner Zahl multipliziert wird und dann zu größerer Zahl addiert wird

Prof. Dr. Dr. W. Rhode
Numerische Grundlagen
Statistische Methoden der Datenanalyse

Stabilisierung der Lösung einer quadratischen Gleichung

- Instabil für $b^2 \gg 4ac$, wenn Wurzel und b das gleiche Vorzeichen haben

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

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

Stabilisierung der Lösung einer quadratischen Gleichung

- Umformung ebenfalls instabil, nun wenn Wurzel und b entgegengesetztes Vorzeichen haben

$$x_{1,2} = \frac{2c}{-b \mp \sqrt{b^2 - 4ac}}.$$

Stabilisierung der Lösung einer quadratischen Gleichung

- Sinnvolle Kombination beider Schreibweisen

$$q := -\left(b \cdot \mathrm{sign}(b)\sqrt{b^2 - 4ac}\right)/2$$

$$x_1 = \frac{q}{a}, \quad x_2 = \frac{c}{q}.$$

Motivation: Kondition

$$f(x) = \frac{1}{1-x} \quad x = 0,999 \;\Rightarrow\; f(x) = 1000$$

Fehleranalyse für $\tilde{x} = 0,999 + \varepsilon$ mit ε klein

$$f(\tilde{x}) = \frac{1000}{1 - 1000\varepsilon} = 1000(1 + 10^3\varepsilon + 10^6\varepsilon^2 + \ldots)$$

Relativer Fehler:

$$\frac{|x - \tilde{x}|}{x} < 1.1\varepsilon \;\text{ und }\; \frac{|f(x) - f(\tilde{x})|}{f(x)} = 10^3\varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

- Problem ist **schlecht konditioniert**!

Konditionszahl K

$\widetilde{x}$ sei Näherung von x mit relativem Fehler

$$\varepsilon = \frac{\widetilde{x} - x}{x} \quad \text{bzw.} \quad \widetilde{x} = x(1+\varepsilon)$$

Entwicklung von $f(\widetilde{x})$ in Taylor-Reihe:

$$\begin{aligned} f(\widetilde{x}) &= f(x+\varepsilon x) = f(x) + \varepsilon x f'(x) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)) \\ &f(x) = \left(1 + x\frac{f'(x)}{f(x)}\varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2)\right) \end{aligned}$$

Relativer Fehler von f:

$$\frac{|f(x) - f(\widetilde{x})|}{|f(x)|} = \left|x\frac{f'(x)}{f(x)}\right| \cdot |\varepsilon| + \mathcal{O}(\varepsilon^2) = K \cdot |\varepsilon| + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

Konditionszahl:

$$K := \left|x\frac{f'(x)}{f(x)}\right|$$

Konditionszahl

Es gilt bei Vernachlässigung der höheren Glieder:

$$\frac{|f(x) - f(\widetilde{x})|}{|f(x)|} = K\frac{|x - \widetilde{x}|}{x},$$

wobei man folgende Fälle für K unterscheidet:

- $K < 1$ Fehlerdämpfung;
- $K > 1$ Fehlerverstärkung;
- $K \gg 1$ Problem schlecht konditioniert.

Eindimensionale Konditionsanalyse

- Es gelten folgende Zusammenhänge:

a) Falls an einer Stelle $f'(x^*) \neq 0$
die Funktion $f(x) \to 0$ für $x \to x^* \neq 0$ geht,
dann strebt $K \to \infty$ für $x \to x*$.
Mit anderen Worten:
f ist in der Nähe von einfachen Nullstellen $\neq 0$
schlecht konditioniert .

Eindimensionale Konditionsanalyse

b) Sei $f(x) = (x - x^*)^m g(x)$ bei $g(x^*) \neq 0$ und $m \neq 0$. Dann ist für $m > 0$ bei x^* eine Nullstelle m-ter Ordnung und für $m < 0$ ein x^* Pol m-ter Ordnung.

Es gilt weiter:

$f'(x) = m(x - x^*)^{m-1}g(x) + (x - x^*)^m g'(x)$, und wir erhalten

$$K = x\frac{|f'(x)|}{|f(x)|} = |x| \cdot \left|\frac{m}{x - x^*} + \frac{g'(x)}{g(x)}\right| = |m| \cdot \left|\frac{x - x^*}{x}\right|^{-1} + \ldots$$

Für $x \to x^*$ ist

$$K = \begin{cases} \infty & \text{falls } x^* \neq 0 \\ |m| & \text{falls } x^* = 0 \end{cases}$$

Eindimensionale Konditionsanalyse

c) Falls $f'(x)$ einen Pol bei x^* hat, ist die Kondition bei x^* ebenfalls schlecht.

Betrachte z.B. $f(x) = 1 + \sqrt{x-1}$. Diese Funktion hat die Konditionszahl

$$K = \left|\frac{x}{2}\left(1 + \frac{1}{\sqrt{x-1}}\right)\right|,$$

und $K \to \infty$ für $x \to 1$.

Zusammenhang Stabilität und Kondition

- Korrelation von Stabilität und Kondition?
- Betrachte:

$$f(x) = \sqrt{\frac{1}{x} - 1} - \sqrt{\frac{1}{x} + 1}$$

$$\text{für } 0 < x < 1$$

Zusammenhang Stabilität und Kondition

- Stabilität:

$$x \to 0 : \text{Auslöschung, die zur Instabilität führt}$$
$$x \to 1 : \text{Stabiles Verhalten des Ausdrucks}$$

Zusammenhang Stabilität und Kondition

- Kondition:

$$f'(x) = \frac{-1/x^2}{2\sqrt{\frac{1}{x}-1}} - \frac{-1/x^2}{2\sqrt{\frac{1}{x}+1}} = \frac{\sqrt{\frac{1}{x}-1}-\sqrt{\frac{1}{x}+1}}{2x^2\sqrt{\frac{1}{x}-1}\sqrt{\frac{1}{x}+1}}$$

$$\text{und } K = x\frac{|f'(x)|}{|f(x)|} = \frac{1}{2\sqrt{1-x^2}}$$

$$x \to 0 : \text{Gut konditioniert, da } K = \tfrac{1}{2}$$
$$x \to 1 : \text{Schlecht konditioniert, da } K = \infty$$

Erinnerung: Die physikalische Fragestellung:

$$g(y) = \int_c^d A(y,x) f(x) dx + b(y),$$

Inverses Problem

i. A. schlecht konditioniert !!!

g = alle gemessenen Zahlen

b = gemessen, andere Ursache

A = Übersetzung: gemessene Zahlen → physikalische Bedeutung

f = gesuchte physikalische Funktion

Kann man schlecht konditionierte Probleme exakt lösen?

Nein !

Aber: Man könnte ja vielleicht zusätzliche Annahmen machen, die eine exakte mathematische Lösung möglich machen.

Dann löst man ein anderes Problem....

Was bedeutet das für die Lösung ?