Programování vědeckotechnických výpočtů aneb počítače dovedou i počítat

J. Kozánek, Ústav termomechaniky AV ČR, v.v.i.

e-mail: kozanek@it.cas.cz

Internet, komunikace, facebook, informace, hry, fotky, videa, kartotéky a textové editory. Prostředek pro počítání.
Algoritmická řešení. Programovací jazyky. Počítače. Historie.
*MATLAB - maticové výpočty (**Mat**rix **Lab**oratory).*
Dělení nulou, řešení kvadratické rovnice, podmíněnost numerických úloh, člověk a počítač, faktoriály mohou být numerickým problémem.

Zkušenost a praxe

Studium

Univerzálnost, modelování,
teorie a matematika

Počítač (computer) , Informatika

analogový, číslicový

Běžný číslicový počítač:

počítačová skříň, základní deska, procesor, operační paměť, sběrnice, grafická karta, zvuková karta, síťová karta, pevný disk, elektrický zdroj, monitor, klávesnice, myš, vstupní a výstupní zařízení (tiskárna, scanner, přenosná paměť, ...)

hardware, software (programové vybavení)

Vědeckotechnické výpočty, algoritmus, programovací jazyk a program

Charakteristika počítače
(vědeckotechnické výpočty)

1. Rychlost a přesnost počítání (procesor, matematický koprocesor)

FLOPS - *počet operací v plovoucí řádové čárce za sekundu*
(**FL**oating-point **OP**erations per **S**econd)

Stolní kalkulačka má výkon pouze několik jednotek FLOPS

2. Operační paměť (až 64 GB)

přenosová rychlost

Předpony

10^{15}	peta	P	biliarda	1 000 000 000 000 000	„pět“	PJ – petajoule
10^{12}	tera	T	bilion	1 000 000 000 000	„netvor“	TW – terawatt
10^{9}	giga	G	miliarda	1 000 000 000	„obrovský“	GHz – gigahertz
10^{6}	mega	M	milion	1 000 000	„velký“	MeV–megaelenktronvolt
10^{3}	kilo	k	tisíc	1 000	„tisíc“	kg – kilogram
10^{2}	hekto	h	sto	100	„sto“	hPa – hektopascal
10^{1}	deka	da	deset	10	„deset“	dag – dekagram

Rekordy

1938 Zuse Z1, 1 OPS, Konrad Zuse, Berlin, Germany
1946 Colossus 2 (Parallell Processor), 50 kOPS, Post Office Research, UK
1946 ENIAC, 5 kOPS, Maryland, USA
1954 IBM NORC, 67 kOPS, epatment of Defense, Virginia, USA
1961 IBM 7030, 1.2 MFLOPS, Los Alamos National Laboratory, New Mexico, USA
1974 CDC STAR-100, 100 MFLOPS, Livermore National Laboratory, California, USA
1976 Cray-1, 25 MFLOPS, Los Alamos National Laboratory, New Mexico, USA
1983 Cray X-MP, 941 MFLOPS, Los Alamos National Laboratory, New Mexico, USA
1984 M-13, 2.4 GFLOPS, Scientific Research Institute, Moscow, USSR
1985 Cray-2, 4 GFLOPS, Livermore National Laboratory, California, USA
1990 NEC SX, 23 GFLOPS, NEC Fuchu Plant, Fuchu, Tokyo, Japan
1996 Hitachi, 368 GFLOPS, Center for Computational Physics, Tsukuba, Japan
1999 Intel, 2.3796 TFLOPS, Sandia National Laboratory, New Mexico, USA
2007 IBM Blue GENE, 478 TFLOPS, Livermore National Laboratory, California, USA
2009 Cray JAguar, 2.3 PFLOPS Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, USA

Československo - Prof. Dr. ing. Antonín Svoboda

Počítače SAPO (1955, releový, v 10-kové soustavě)
a EPOS (1960, elektronkový, multiprocesorový, 35 kOPS)

Processory (CPU – Central Processing Unit)

Intel, Motorola, AMD, SUN, DEC Alpha

(4 – 64 bitové)

PC XT 8086, 8088, 80186),PC AT (80286, 80386, 80486, PENTIUM, INTEL Core..)

Frekvence procesoru (až 3 GHz)

vyrovnávací paměť (cache) uvnitř procesoru (až 12 MB)

Paralelní procesory (až 65000)

Počet platných cifer při zápisu čísla s plovoucí desetinnou čárkou (floating point)

significant digits × *base*^{exponent}

počet platných cifer x (základ číselne soustavy) exponent

IEEE 754 binary formats

(optimální zaokrouhlování, násobení a dělení, komplexní čísla)

Přirozená čísla („počet“ – „nejmenší nekonečno ∞“ $\aleph 0$ (Alef 0)

Prvočísla

2, 3, 5, 7, 11, 13, 17, 19, 23, 29, 31, 37, 41, 43, 47, 53, 59, 61, 67, 71, 73, 79, 83, 89, 97, 101, 103, 107, 109, 113, 127, 131, 137, 139, 149, 151, 157, 163, 167, 173, 179, 181, 191, 193, 197, 199, 211, 223, 227, 229, 233, 239, 241, 251, 257, 263, 269, 271, 277, 281, 283, 293, 307, 311, 313, 317, 331, 337, 347, 349, 353, 359, 367, 373, 379, 383, 389, 397, 401, 409, 419, 421, 431, 433, 439, 443, 449, 457, 461, 463, 467, 479, 487, 491, 499, 503, 509, 521, 523, 541

Reálná čísla („počet“ – „nekonečno“ ($\aleph 1$ = Alef 1)

Komplexní čísla

Čísla: přirozená, celá, racionální $\left(\dfrac{p}{q}\right)$, iracionální $\left(\sqrt{2}\right)$, algebraická,

transcendentní (Ludolfovo číslo π, Eulerovo číslo e)

$$\pi = 3{,}14159265358979323846264338327950288841971\ldots$$

"pizza theorem“

Poznámka k počtu platných cifer:

a) Změna na 7. místě za desetinnou čárkou způsobí chybu kolem 1 metru kružnic s menším poloměrem než je poloměr zeměkoule (6500km)
b) Úloha: Když kružnici o délce hlavní zemské rovnoběžky prodloužíme o 1m, o kolik vzroste poloměr?

Eulerovo číslo *(***Napierova konstanta*** *)* *(základ přirozených logaritmů)*

$e = 2{,}71828\ 18284\ 59045\ 23536\ 02874\ 71352\ldots$

$$\boxed{e = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{6} + \frac{1}{24} + \frac{1}{120} + \frac{1}{720} + \ldots}$$

$$\boxed{e = \lim_{n \to \infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^{n}}$$

Eulerova (Eulerova – Mascheroniho) **konstanta**
(racionální ?, iracionální ?)

$$\gamma = 0.57721\,56649\,01532\,86060\,65120\,90082\,40243\,10421\,59335\,93992$$

$$\boxed{\gamma = \lim_{n\to\infty}\left(\sum_{k=1}^{n}\frac{1}{k} - \ln n\right)}$$

$$\boxed{\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k} = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{4} + \frac{1}{5} + \frac{1}{6} + \ldots \quad = \ +\infty}$$

Programovací jazyky

Strojní kód
Assembler

ALGOL, FORTRAN
BASIC
C, C++
COBOL
PASCAL
ADA
JAVA
AutoCAD

MATLAB

MATHEMATICA, MAPLE, REDUCE

Program ve strojovém kódu - procesor Intel, instrukce, data

```
00 00 00 00 00 90 BE 07 - D8 07 F2 07 F2 07 F2 07
F2 07 F2 07 F2 07 F2 07 - 0C 08 00 00 00 00 C0 00
D5 01 2E 8F 06 3C 08 0E - 2E FF 36 3C 08 2E FF 36
3E 08 2E FF 36 40 08 55 - CB FA FC 2B F6 8E DE 2E
89 2E 2C 07 2E 8C 16 2E - 07 8E D6 BC 00 07 2E 89
16 28 07 2E 89 16 2A 07 - 1E 2E 8E 1E AA 07 89 3E
42 0F A3 4E 0F 89 1E 50 - 0F 0E 1F C7 06 08 00 00
10 EB 13 AC 84 C0 74 0D - 3C 24 74 09 B4 0E BB 07
00 CD 10 EB EE C3 9C 53 - 33 DB 33 C0 50 9D 9C 58
```

Assembler (MS-DOS)

```
A SEGMENT
ASSUME CS:A,DS:A
ORG 100H
START:
MOV AH,9
MOV DX,OFFSET TEXT
INT 21H
MOV DL,'$'
MOV AH,2
INT 21H
INT 20H
TEXT DB 'TENHLE PROGRAM',13,10,'UMI NAPSAT I $'
A ENDS
END START
```

Pascal:

```
begin
writeln('TENHLE PROGRAM');
writeln('UMI NAPSAT I $');
end
```

Matlab:

´TENHLE PROGRAM UMI NAPSAT I´

´100 řádků ve FORTRANu ----- 10 řádků v MATLABu´

Příklad programu – proložení bodů přímkou (Basic):

```
10  REM PROLOZENI BODU PRIMKOU Y=A+BX
20  REM METODOU NEJMENSICH CTVERCU
30  PRINT "KOLIK BODU BUDE ZADANO (3-100)?"
40     INPUT N
41     45 IF N<3 THEN 30
42     46 IF N>100 THEN 30
50     REM POC. STAV PROMENNYCH
51     52 LET P1=0
52     54 LET P2=0
53     56 LET P3=0
58  LET P4=0
60  REM CTENI SOURADNIC A SUMACE
70  FOR I=1 TO N
80  PRINT I;". DVOJICE X,Y: ";
90  INPUT X,Y
100 LET P1=P1+X
110 LET P2=P2+Y
120 LET P3=P3+X*Y
130 LET P4=P4+X^2
140 NEXT I
150 REM VYPOCET REGRESNICH KOEFICIENTU A, B
160 LET B=(P3-P1*P2/N)/(P4-P1^2/N)
170 LET A=(P2-P1*B)/N
180 IF(B<0 THEN 186
182 LET Z$="-"
184 GOTO 190
186 LET Z$="+"
190 PRINT
200 PRINT "ROVNICE PRIMKY JE Y="A;Z$;ABS(B);"X"
210 PRINT
```

MATLAB

```
function [a,b]=regrese(x,y)
%
% Regrese primky y = a + b*x
%
% Vstup:  vektory x, y dimenze N
% Vystup: regresni koeficienty a, b
%
N=length(x);
z=[ones(N,1), x]\y
a=z(1); b=z(2);
```

MATLAB (přátelské programovací prostředí a optimální – spolehlivé a rychlé numerické programy)

1980 (FORTRAN), 1985 (C++)

PC XT (8086, 8088, 80186)
PC AT (80286, 80386, 80486, PENTIUM, …)
Pracovní stanice
WINDOWS (1993), UNIX, LINUX

MATLAB + TOOLBOX

Optimalizace, řízení, zpracování signálů, statistika, identifikace, fuzzy programování, zpracování obrazů, metody konečných prvků, symbolické programování (MAPLE), neuronové sítě,
SIMULINK (simulace experimentů)

Čísla v MATLABu

Největší přirozené číslo = miliarda = 10^9

Nejmenší celé číslo = -10^9

Největší reálné číslo = 10^{308}

Nejmenší kladné reálné číslo = $10^{-323} = \frac{1}{10^{323}}$

´Relativní přesnost výpočtu´, počet platných cifer (dvojitá přesnost)

eps = $\boxed{2.22 \cdot 10^{-16}}$

$$1 + eps > 1$$

$$\boxed{1 + \frac{eps}{2} = 1}$$

Lineární rovnice

$$\boxed{2 \cdot x = 6}$$

$$a \cdot x = b, \quad a \neq 0 \quad \Rightarrow \quad x = a^{-1} \cdot b = \frac{b}{a}$$

$$\boxed{x = 2^{-1} \cdot 6 = \frac{1}{2} \cdot 6 = 3}$$

$$0 \cdot x = b \qquad b \neq 0$$

$$0 \cdot x = 0 \qquad b = 0$$

2 lineární rovnice o 2 neznámých

$$\boxed{\begin{aligned}1\cdot x+2\cdot y&=5\\1\cdot x+1\cdot y&=3\end{aligned}}$$

$$\boxed{x=1,\ \ y=2}$$

$$\boxed{\begin{aligned}1\cdot x+2\cdot y&=5\\1\cdot x+2\cdot y&=5\end{aligned}}$$

$x=1,\ \ y=2$ $\quad$ $x=0,\ \ y=2.5$

$x=5,\ \ y=0$ $\quad$ $x=-1,\ \ y=3$

$$\boxed{\begin{aligned}1\cdot x+2\cdot y&=5\\1\cdot x+2\cdot y&=3\end{aligned}}$$

řešení neexistuje

$$\boxed{\begin{aligned}1\cdot x+2\cdot y&=0\\1\cdot x+2\cdot y&=0\end{aligned}}$$

$x=0,\ y=0$

$x=2,\ y=-1$

$x=-1,\ y=0.5$

Vektory a matice

$$1 \cdot x + 2 \cdot y = 5$$
$$1 \cdot x + 1 \cdot y = 3$$

$$\boxed{\mathbf{A} \cdot \mathbf{z} = \mathbf{c}}$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{z} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}, \quad \mathbf{c} = \begin{bmatrix} 5 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{z} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{c} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} 5 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 2 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 5 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

„Maticová nula“

$$1 \cdot x + 2 \cdot y = 5$$

$$1 \cdot x + 2 \cdot y = 5$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Numerická nestabilita
při řešení kvadratické rovnice a její odstranění

$$\boxed{a\,x^2 + b\,x + c = 0} \qquad 0 \neq a, b, c \in R \qquad b^2 > 4ac$$

$$\boxed{x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}} \qquad \boxed{x_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}}$$

$$\boxed{z_1 = -\frac{b + \operatorname{sgn}(b)\sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}}$$

$$b > 0:\ \operatorname{sgn}(b) = 1$$

$$b < 0:\ \operatorname{sgn}(b) = -1$$

$$\boxed{z_2 = \frac{c}{a\,z_1}}$$

Počítač, který pracuje s deseti platnými ciframi

$$\boxed{a = c = 1,\ b = -10^5}$$

„přesně“

$$\boxed{\begin{aligned} x_1 &= 99999.99999 90 \\ x_2 &= 0.00001000000000 1 \end{aligned}}$$

Klasické řešení

$$\boxed{\begin{aligned} x_1 &= 100000 \\ x_2 &= 0 \end{aligned}}$$

$$a x^2 + b x + c = 0 \qquad \Rightarrow c = 0$$

Upravené řešení

$$\boxed{\begin{aligned} x_1 &= 100000 \\ x_2 &= 0.00001 \end{aligned}}$$

„Komerční analýza“ řešení kvadratické rovnice

$$\boxed{a x^2 + b x + c = 0} \qquad 0 \neq a, b, c \in R \qquad b^2 > 4ac$$

$$\boxed{x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}} \qquad \boxed{x_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}}$$

Analýza a syntéza v matematickém modelování, Viètovy vzorce

$$x_1 - x_2 = \frac{\sqrt{b^2 - 4ac}}{a}$$

$$\frac{x_1}{x_2} = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}, \qquad x_2 \neq 0$$

$$x_1 + x_2 = -\frac{b}{a}$$

$$x_1 \cdot x_2 = \frac{c}{a}$$

Výkon počítače

Výkon člověka (s jednoduchou kalkulačkou) při počítání.
Pro $n = 10$ je schopen v reálném čase vykonat n^2, n^3 operací.

Počítač: pro $n = 1000$ je schopen vykonat n^2, n^3, n^4 operací.

Mez použitelnosti počítačů n^n $\boxed{n!}$

Permutace $n! = n \cdot (n-1) \cdot (n-2) \cdot (n-3) \cdots 2 \cdot 1$

Otázka:
Jak velké musí být číslo n abych nemohl na svém počítači provést $n!$ matematických operací?

Můj notebook (INTEL Pentium 1,7 GHz, 500 MB RAM)
provede za 1 sec $3 \cdot 10^7$ operací

minuta = 60 sec
hodina = 60 minut
den = 24 hodin
rok = 365 dní

století = $3 \cdot 10^9$ sec = 10^{17} matematických operací

$$\boxed{20! > 10^{18}}$$

CRAY Jaguar = 2,3 PFLOPS = $2{,}3 \cdot 10^{15}$ operací/sec

za století = $7 \cdot 10^{24}$ operací

$$\boxed{25! \approx 10^{25}}$$