Validation en calcul scientifique

Cours de recherche master informatique

Nathalie Revol

INRIA, équipe Arénaire

LIP, ENS-Lyon

Nathalie.Revol@ens-lyon.fr

2 octobre 2006

Quelques exemples de ratés

- **bourse de Vancouver :** introduction en 1982 d'un nouvel indice, de valeur de départ 1000.000
  recalculé après chaque transaction et tronqué au 3e chiffre après la virgule ;
  valeur calculée 22 mois plus tard : 524.881, alors que la valeur correcte était 1098.811.
- **système de défense anti-missile :** un missile Patriot échoue à intercepter un Scud (février 1991, Dharan, Arabie Saoudite), bilan : 28 morts ;
  explication : une petite erreur d'arrondi qui finit par être accumulée à d'autres petites erreurs d'arrondi, toutes dans le même sens.

Quelques exemples de ratés

Gestion des exceptions

- Nov. 1998, navire lance-missiles américain USS Yorktown, on a par erreur tapé un «zéro» sur un clavier $\rightarrow$ division par 0. Le programmeur n'avait pas songé que ce problème pourrait arriver $\rightarrow$ cascade d'erreurs $\rightarrow$ arrêt du système de propulsion.
- premier envol...et premier plongeon d'Ariane 5 (7 millions d'euros)

Objectif général : validation en calcul scientifique

- **Besoin en puissance de calcul ?** oui, mais pas uniquement !
- **Besoin d'une assurance sur la qualité des résultats calculés**
  – **Valider un code scientifique, ou les résultats calculés,** revient souvent à savoir encadrer l'erreur commise.
  – **Cette erreur provient** de la méthode utilisée, mais aussi de l'arithmétique utilisée.
  – **L'arithmétique flottante** entraîne une erreur d'arrondi à chaque opération, ou presque.

Arithmétique flottante : cible de ce cours.

Objectif de ce cours : validation en calcul scientifique

Erreur :

- due au programme et à l'arithmétique utilisée,
- analyses directe et inverse de l'erreur,
- conditionnement
- exemples en algorithmique numérique.

Différentes approches qui permettent :

- soit d'encadrer l'erreur d'arrondi,
- soit de contourner les problèmes liés à la précision limitée,
- soit même de calculer exactement le résultat
- soit de calculer un intervalle de résultats valide pour toute une plage de valeurs d'entrée.

Plan du cours

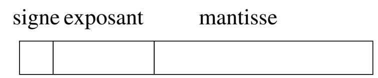
- **arithmétique flottante :** définition, norme IEEE-754, propriétés, erreurs d'arrondi
  qq exemples d'algorithmes numériques (Horner, un peu d'algèbre linéaire) ;
- **arithmétique probabiliste :** principes et limites, exemples ;
- **arithmétique multi-précision :** principe et implantation ;
- **arithmétique par intervalles :** principe, qq algorithmes ;
- **arithmétique exacte :** principe, qq exemples.
- **preuve.**

Fonctionnement du cours

- **arithmétique flottante et un peu d'analyse numérique :** 4 séances
  dont 1 séance d'exposés
- **arithmétique probabiliste :** 1,5 séance dont 1/2 séance d'exposés
- **arithmétique multi-précision :** 1,5 séance
  dont 1/2 séance d'exposés
- **arithmétique par intervalles :** 3 séances
  dont 1 séance d'exposés
- **arithmétique exacte :** 1,5 à 2 séance(s)
  dont 1/2 séance d'exposés
- **preuve** si on a le temps
  pas d'exposé

Arithmétique flottante

- **définition**



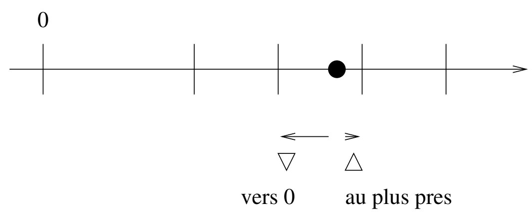
$$x = (-1)^{\text{signe}} \times 1.\text{mantisse} \times 2^{\text{exposant}}$$

- **calculs**

  π : non représentable par un flottant

  produit de 2 nombres flottants : ne rentre pas dans un flottant

- **arrondis**



Arithmétique flottante

Résolution d'un système linéaire par élimination de Gauss

en arithmétique exacte	en arithmétique flottante avec 3 chiffres décimaux
$\begin{pmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$
$\begin{pmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 0 & 1-10^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2-10^4 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 1 & -10^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -10^4 \end{pmatrix}$
$\left\{\begin{array}{lllllll} x_2 & = & \frac{2-10^4}{1-10^4} & = & \frac{9998}{9999} & \simeq & 1 \\ x_1 & = & \frac{1-x_2}{10^{-4}} & = & \frac{10000}{9999} & \simeq & 1 \end{array}\right.$	$\left\{\begin{array}{lllll} x_2 & = & \frac{-10^4}{-10^4} & = & 1 \\ x_1 & = & \frac{1-x_2}{10^{-4}} & = & 0 \end{array}\right.$

Arithmétique par intervalles

Résolution d'un système linéaire par élimination de Gauss

$$\begin{pmatrix} [0.3, 2.7] & [-0.9, -0.1] & [0.2, 1.8] \\ -1 & 2 & -3 \\ 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} [0.3, 2.7] & [-0.9, -0.1] & [0.2, 1.8] \\ 0 & [-0.3, 5.3] & [-7.9, 0.9] \\ 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

Problème de pivot contenant 0.

Arithmétique exacte

Résolution d'un système linéaire par (pseudo-)élimination de Gauss

$$\begin{pmatrix} -85 & -55 & -37 & -35 & 97 \\ 50 & 79 & 56 & 49 & 63 \\ 57 & -59 & 45 & -8 & -93 \\ 92 & 43 & -62 & 77 & 66 \\ 54 & -5 & 99 & -61 & -50 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -85 & -55 & -37 & -35 & 97 \\ 0 & -3965 & -2910 & -2415 & -10205 \\ 0 & 8150 & -1716 & 2675 & 2376 \\ 0 & 1405 & 8674 & -3325 & -14534 \\ 0 & 3395 & -6417 & 7075 & -988 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -85 & -55 & -37 & -35 & 97 \\ 0 & -3965 & -2910 & -2415 & -10205 \\ 0 & 0 & 30520440 & 9075875 & 73749910 \\ 0 & 0 & -30303860 & 16576700 & 71965335 \\ 0 & 0 & 35322855 & -19853450 & 38563395 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -85 & -55 & -37 & -35 & 97 \\ 0 & -3965 & -2910 & -2415 & -10205 \\ 0 & 0 & 30520440 & 9075875 & 73749910 \\ 0 & 0 & 0 & 780962223125500 & 4431320636600000 \\ 0 & 0 & 0 & -926521846141125 & -1428085593899250 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -85 & -55 & -37 & -35 & 97 \\ 0 & -3965 & -2910 & -2415 & -10205 \\ 0 & 0 & 30520440 & 9075875 & 73749910 \\ 0 & 0 & 0 & 780962223125500 & 4431320636600000 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2990434476840839028373069125000 \end{pmatrix}$$

Introduction à l'arithmétique flottante
Besoin d'une norme

- sur certaines machines Cray, on avait

$$\text{parfois, } 1 \times x \Rightarrow \text{ overflow}$$
$$x + y \neq y + x$$
$$0.5 \times x \neq x/2.0$$

- IBM 370, en Fortran, on avait

$$\sqrt{-4} = 2$$
$$\texttt{I = 14.0/7.0} \rightarrow I = 1$$

Introduction à l'arithmétique flottante

- *The PlayStation 3 will feature the much-vaunted Cell processor, which will run at 3.2GHz, giving the whole system 2 teraflops of overall performance.*
- prochaine machine pétaflopique (10^{15}) : *"IBM has announced that they are gearing up to build the world's fastest supercomputer, more than four times faster than the reigning champ, IBM's BlueGene/L. Nicknamed 'Roadrunner,' the new machine will be a hybrid of off-the-shelf CPUs and Cell chips designed for the PS3. [...]According to the BBC : 'The computer will contain 16,000 standard processors working alongside 16,000 Cell processors... each Cell is capable of 256 billion calculations per second.'"*
- arithmétique flottante : arrondi vers 0 ! ! !

Introduction à l'arithmétique flottante

- besoins en dynamique ?

$$\frac{\text{Diamètre estimé de l'Univers}}{\text{Distance de Planck}} \approx 1.4 \times 10^{62}$$

- besoins en précision ? Certaines prédictions de la relativité générale et de la mécanique quantique vérifiées avec une précision relative de $\sim 10^{-14}$
- calculs intermédiaires : besoin de quadruple précision (J. Laskar, Obs. de Paris) pour stabilité à très long terme du système solaire ;
- record actuel : 1241 milliards de chiffres décimaux de π (Kanada, 2002), en utilisant les deux formules

$$\begin{aligned} \pi &= 48 \arctan \tfrac{1}{49} + 128 \arctan \tfrac{1}{57} - 20 \arctan \tfrac{1}{239} + 48 \arctan \tfrac{1}{110443} \\ &= 176 \arctan \tfrac{1}{57} + 28 \arctan \tfrac{1}{239} - 48 \arctan \tfrac{1}{682} + 96 \arctan \tfrac{1}{12943} \end{aligned}$$