

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie

Jaroslav Král

Numerické metody a počítače

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 19 (1974), No. 5, 281--289

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/139682>

Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 1974

Institute of Mathematics of the Academy of Sciences of the Czech Republic provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This paper has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://project.dml.cz>

Numerické metody a počítače

Jaroslav Král, Praha

V této poznámce se pokusíme specifikovat problémy vznikající při aplikaci numerických metod při řešení úloh vědeckotechnického typu na samočinném počítači. Níže uvedené poznatky jsou převážně intuitivního rázu a vycházejí z dlouholeté praxe u samočinných počítačů a nepředstavují žádnou ucelenou teorii. Jakkoliv se mnohý z níže uvedených faktů může zdát samozřejmý, praxe ukazuje, že mnozí řešitelé úloh na počítačích si mnohá samozřejmá fakta neuvědomují. Je to pravděpodobně důsledek toho, že práce při aplikaci numerických metod má jisté specifické rysy a problémy, které jsou jen velmi nedostatečně zachyceny v odborné literatuře.

Při aplikaci numerických metod (a při řešení libovolného problému) na počítači se numerické metody používají jako prostředek zpracování informací, neboť úkolem je získat z informací (dat), které jsou k dispozici, soubor informací (výsledků), dávající řešení nějakého problému. Při takové aplikaci numerických metod je možné jen zčásti využívat matematických tvrzení a vět tvořících hlavní náplň numerické matematiky, poněvadž není obvykle možné ověřit platnost předpokladů, za kterých příslušné tvrzení platí a daná numerická metoda konverguje. Platnost předpokladů a použitelnost nějaké metody je proto často nutné ověřovat experimentem, v němž se daný numerický proces provede a nějakým způsobem ověří, že výsledky jsou „rozumné“. Tento postup je nutný i z toho důvodu, že je to jediná cesta, jak ověřit vhodnost matematického modelu popisujícího nějaký reálný problém.

Dalo by se namítnout, že vlastně nelze pro nějaký problém stanovit, že nějaké výsledky jsou „rozumné“, poněvadž buď jsou známy výsledky předem a není třeba nic počítat, anebo lze jen stěží „rozumnost“ výsledků odhadnout. Ve skutečnosti není situace zdaleka tak beznadějná, Často bývají známy hodnoty („výsledek“) pro některé hodnoty vstupních parametrů nebo jsou známy jisté kvalitativní charakteristiky chování modelu atd. Příklady takového odhadu „rozumnosti“ jsou uvedeny níže.

Při řešení nějakého problému na počítači musí řešitel problému vyřešit tyto úkoly:

- (1) Zvolit matematický model problému (např. systém obyčejných diferenciálních rovnic; model však nemusí být vždy formulován v termínech klasické matematiky).
- (2) Zvolit metodu (přibližného) řešení modelu (např. metodu Rungeho-Kuttovu). Zde se často převádí spojitý problém na problém diskrétní, tj. např. problém nalezení funkce $x(t)$ se převádí na problém nalezení přibližných hodnot funkce $x(t)$ v bodech $t, t + h, t + 2h$, (h je tzv. krok diskretizace).
- (3) Stanovit výpočetní postup (metodu algoritmizovat), tj. nalézt posloupnost přesně definovaných výpočetních kroků počítajících řešení problému.
- (4) Výpočetní postup naprogramovat, tj. popsat výpočetní postup v nějakém programovacím jazyce.
- (5) Program (tj. zápis výpočetního postupu – algoritmu v programovacím jazyce) „odladit“, tj. zbavit (formálních) chyb.

- (6) Realizovat výpočet na počítači. Ověřit, zda jsou výsledky „rozumné“, tj. zda v (1) až (5) nedošlo k nějaké chybě.

Poznamenejme, že často jsou k dispozici již hotové programy pro jednotlivé běžnější matematické metody, takže v (3) a (4) a zčásti i v (5) se práce podstatně zkrátí. Někdy jsou k dispozici hotové soubory programů pro nějaký konkrétní problém. V tom případě je nutné dodat pouze vstupní data. Tento případ nebudeme samozřejmě diskutovat.

Zkušenost ukazuje, že nebývá problém získat dostatečnou znalost programovacího jazyka a programování. Obtížnějším problémem je algoritmicizace. Hlavní obtíž bývá při volbě modelu a volbě metody řešení a především při odhadu „rozumnosti“ výsledků, což je jediná cesta, jak zjistit, zda někde nedošlo k chybě. Navíc nejsou obvykle známy postupy, jak odhadnout příčinu chyb.

Chyba může být způsobena chybou ve vstupních datech nebo nedostatečnou přesností vstupních dat, chybou v popisu algoritmu (programu), chybou v modelu, zaokrouhlovacími chybami a (v případě, že je model spojitý) chybou vzniklou převodem spojitého modelu na diskrétní problém ve (2) (chyba diskretizace). Překvapuje, jak často se zapomíná na přesnost a spolehlivost vstupních dat. Zde ovšem jde spíše o opomenutí, poněvadž zejména údaje o přesnosti vstupních dat jsou obvykle snadno odvoditelné (např. při odečítání z grafu nebude přesnost lepší než 1% atd.). Obtížnější je odhad chyby diskretizace a to, zda není příliš velká chyba zaokrouhlení. Nejobtížnější je odhad věrnosti modelu, kde je nutná spolupráce odborníka, který model navrhl.

Vyjděme nejprve z předpokladu, že zvolený matematický model vystihuje problém s dostatečnou přesností a že data mají rovněž dostatečnou přesnost. Matematický (teoretický) model bývá často spojitý, např. je třeba nalézt funkci $U(x, y)$ vyhovující na nějaké oblasti G jisté rovnici a musí být aproximován nějakým diskrétním modelem aproximujícím teoretický model (např. nalézt hodnoty $U_{i,j}$ vyhovující soustavě lineárních algebraických rovnic tak, aby $|U_{i,j} - u(x_i, y_j)| < \epsilon$).

Na této úrovni můžeme diskrétní aproximaci (např. při řešení úlohy) považovat za model problému reprezentovaného teoretickým modelem.

Konečná aritmetika počítače počítající v číselné soustavě o základu r (v pohyblivé řádové čárce, podrobnosti viz např. [9]) je charakterizována dvěma parametry „rozsahem“ q a „počtem cifer, na něž se počítá“ m ; m je takové nejmenší přirozené číslo, pro které platí, že pro každé číslo přesně zobrazitelné v aritmetice je $a = a \star r^{-m}$. Základ číselné soustavy r bývá 2 nebo 10. \star a $\tilde{\star}$ značí operace v konečné aritmetice počítače, $*$ značí násobení.

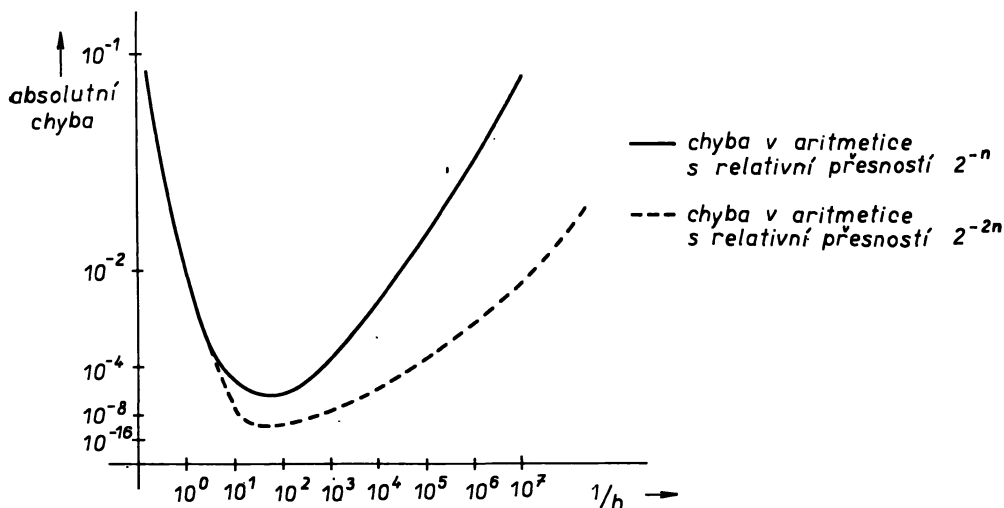
Rozsah q udává interval hodnot čísel zobrazitelných v aritmetice počítače. Počítač může pracovat s čísly x , pro něž platí $|x| < r^q$, přičemž q je nejmenší přirozené číslo, pro něž je tato nerovnost splněna. Aritmetiku reálných čísel můžeme považovat za „konečnou“ aritmetiku s $q = m = \infty$. Je-li a reálné číslo, je \tilde{a} jeho zaokrouhlená hodnota zobrazitelná v aritmetice počítače (např. pro $r = 10$, $a = 1/3$, $q > 0$, $m = 6$ je $\tilde{a} = 0,333333$, pro $b = 0,8623999 \dots$ je $b = 0,862400$). r^{-m} nazýváme přesností počítače. Na některých počítačích je možné realizovat výpočty v aritmetikách s „jednoduchou přesností“ na m cifer a v aritmetice s vícenásobnou přesností na km cifer.

Poznamenejme, že ve vnitřní reprezentaci bývá \bar{a} vyjádřeno ve tvaru $th \cdot r^p$, kde th je tzv. mantisa, $th = 0$ nebo $1/r \leq th < 1$, th je reprezentováno m ciframi. Pro exponent p platí $p < q$. Čísla, pro něž $p < -q$, se zobrazí jako 0.

Jedním z nepříjemných důsledků konečné aritmetiky je fakt, že je-li $|h| < t^* r^{-m}$ (* značí násobení) a počítáme-li posloupnost $t_i = t + ih$ podle vzorce $t_{i+1} = t_i + h$, je $\bar{t}_{i+1} = \bar{t}_{i-1} \mp i^* \bar{h} = \bar{t}_i$, tj. posloupnost $\{\bar{t}_i\}$ obsahuje samé stejné členy. Dokonce i posloupnost $\{\bar{t}_i\}$, kde $\bar{t}_i = \bar{t} \mp i^* \bar{h}$, bude pro $\bar{h} = \bar{t}^* r^{-m-k}$, $k \geq 1$ obsahovat úseky délky nejméně r^k stejných hodnot. Pozorný čtenář na tomto místě jistě postřehne nebezpečí plynoucí z volby příliš malého kroku h při diskretizaci.

V dalším bude pro funkci f $\bar{f}(x)$ značit hodnotu f vypočtenou z \bar{x} v konečné aritmetice počítáče.

Nechť teoretický model je v aritmetice reálných čísel aproximován s přesností $E = Ch^a$, kde C je neznámý koeficient, h parametr diskretizace (např. krok sítě). Při výpočtu v konečné aritmetice se chyba Ch^a sčítá „šumem“ (chybou) zaokrouhlování. Chyba zaokrouhlování je obvykle úměrná počtu operací a obecně roste se zmenšováním h . Průběh (střední hodnoty) celkové chyby je pak konvexní funkcí s grafem tvaru U – viz obrázek:



Poněvadž neznáme ani velikost minima, ani pro jaké h se minima dosahuje, zdálo by se, že průběh velikosti chyby nemá při navrhování postupu řešení větší důležitost. Použijeme-li však následujících kvalitativních úvah (podobné úvahy musíme provádět, chceme-li zhruba otestovat správnost výše uvedených kroků (1) až (6) včetně odhadu věrnosti matematického modelu), můžeme odvodit důležité závěry: (a) Zvolí-li se h malé, aby se zajistila dostatečná přesnost, může to vést k horším výsledkům v oblasti stoupající větve chybové funkce. Už vědomí tohoto téměř samozřejmého faktu může být značnou pomocí. Uveďme zde konkrétní příklad z praxe. Bylo třeba určit hodnotu integrálu $I_n = \int_a^b f(x) g_n(x) dx$, kde $g_n(x)$ byla rychle kmitající funkce. Poněvadž nebyla k dispozici vhodnější metoda, byl integrál aproximován Simpsonovým vzorcem $I_n(h)$ s krokem h a automatickou volbou kroku. Za dostatečné přiblížení I_n se považovala

hodnota Simpsonovy formule $I_n(h)$, splňující podmínku $|I_n(2h) - I_n(h)| < \varepsilon$. Pokud není pro nějaké h tato podmínka splněna, je výpočet zopakován pro $h/2$ místo pro h .

Poněvadž bylo ε malé a $f(x) g_n(x)$ rychle oscilující funkce a pro $x_i = a + ih$ se počítalo $\tilde{\alpha}_i$ vztahem $\tilde{x}_i = \tilde{x}_{i-2} + 2\tilde{h}$, došlo k tomu, že všechna x_i byla od jistého h stejná, takže pak bylo $\tilde{I}_n(h) = \tilde{I}_n(2h)$ (viz výše), aniž $\tilde{I}_n \doteq I_n$. Naštěstí v daném případě bylo známo, že I_n jsou pro n jako parametr hodnotami jisté hladké, pomalu oscilující funkce $F(n)$ s konečnou limitou v nekonečnu. Tento fakt umožnil zjistit chybu ve výpočtu (i když o F nebylo nic jiného známo). Pro větší ε („menší“ přesnost) byly pak získány vyhovující výsledky.

Z uvedeného příkladu plynou důležité závěry.

- (a) Je nanejvýše žádoucí (a často postačuje) mít kvalitativní informace o charakteru chování studovaného problému.
- (b) Výpočty je nutné provádět s pokud možno největším h (s h na klesající větvi chybové funkce).

Tyto závěry jsou samozřejmé, avšak i mnozí absolventi matematicko-fyzikální fakulty je buď neznají, nebo alespoň tyto závěry neovlivňují přístup k řešení problémů. Výše uvedený příklad rovněž ukazuje na potřebu nezávislých kontrol, jež snižují pravděpodobnost získání chybného výsledku.

Položme si nyní otázku, zda je možné pro dosažení vyšší přesnosti zmenšovat krok h , tj. zda jsme na klesající větvi funkce chyby. Odpověď na tuto otázku může dát experiment. Je-li možné daný výpočet zopakovat se zvýšenou přesností (což je dnes obvyklé), lze využít toho, že na klesající větvi funkce chyby se budou výsledky získané výpočtem se zvýšenou přesností lišit od výsledků dříve získaných „málo“, tj. v mezích chyb původní přesnosti (2^{-n}). Získáme-li v aritmetice se zvýšenou přesností výsledek x neodchylující se od původně vypočtené hodnoty o více než $x 2^n$, není s pravděpodobností rovnou praktické jistotě chyba způsobena konečností aritmetiky a lze pro zvýšení přesnosti použít výpočtu v původní aritmetice se zmenšením kroku. Nezmění-li se hodnoty ani po změně kroku více, než je očekávaná přesnost, není chyba způsobena ani velikostí kroku h ani numerickou nestabilitou (chyba je v modelu).

Při zpracování informací je velmi důležité zabránit tomu, aby se nedospělo k nesprávným závěrům. Z tohoto hlediska je pro aplikace důležitější metoda, pro niž neznáme předpoklady konvergence, ale dovedeme rozeznat takové případy, kdy ke konvergenci nedochází, než metoda, jejíž konvergence je sice zaručena, ale za předpokladů, jejichž platnost nelze ověřit.

Odstrašujícím příkladem v tomto směru je tzv. Gräffeho metoda výpočtu kořenů polynomu, pro niž je známo mnoho případů, kdy konverguje; v praxi však nemůžeme nikdy předem rozhodnout, který případ nastává, a proto jen za velmi příznivé konstelace hvězd dospějeme touto metodou k rozumným výsledkům. Přesto však bývá této metodě věnována při výuce numerických metod nezasloužená pozornost, a nebývá uváděna jako typický případ jen obtížně použitelné metody.

Z tohoto hlediska jsou velmi cenné takové teoretické výsledky, které umožňují přímý odhad ztráty přesnosti (chyby) provedením jistého pomocného výpočtu. Je např. známo, že relativní chyba při inverzi regulární matice A Gaussovou metodou je dána převráce-

nou hodnota Bauerova čísla podmíněnosti, tj. je vyjádřena převrácenou hodnotou výrazu

$$\ln \left(\min_{D_1, D_2} \frac{\varrho(D_1 A D_2)}{\varrho^{-1}(D_2^{-1} A^{-1} D_1^{-1})} \right),$$

kde D_1 a D_2 jsou libovolné regulární diagonální matice, $\varrho(B)$ je spektrální poloměr matice B .

Podobným testem může být i použití intervalové aritmetiky ([7]). Intervalová aritmetika a algoritmy ji používající však nebývají vždy k dispozici a mimoto její odhady bývají příliš pesimistické.

Je všeobecně známo, že relativní chyba se výrazně zvětšuje v těch místech, kde dochází k „odečítání blízkých hodnot“. Odtud plyne, že při výpočtu numerické aproximace derivace podle vzorce $f'(x) = (f(x+h) - f(x))/h$ je nutno postupovat opatrně. Je dále zřejmé, že zhruba řečeno vznikne-li „číslo b s malou absolutní hodnotou“ sečtením „čísel $a_1 \dots a_s$ s velkou absolutní hodnotou“, je relativní chyba b pravděpodobně „velká“. Tento intuitivně zřejmý fakt má velice důležitý důsledek. Nechť jsou a_i koeficienty Čebyševova polynomu. Pak je hodnota $T_n(x) \leq 2^{-n}$ pro $-1 < x < 1$ a T_n má koeficienty rovné jedné. Odtud plyne, že v okolí $+1$ a -1 je relativní chyba vypočtené hodnoty $\tilde{T}_n(x)$ v aritmetice s přesností 2^{-n} rovna 1, tj. $\tilde{T}_n(x)$ nemá „žádné platné cifry“. Poněvadž T_n má pouze jednoduché kořeny vcelku dobře separované, lze intuitivně vyvodit, že používá-li nějaká metoda výpočtu kořenů polynomů hodnot polynomu, je velmi pravděpodobné, že pro polynomy stupně n a více může metoda snadno selhat. Tento intuitivně odvozený závěr je potvrzován výpočtovou praxí – výpočet kořenů polynomů je velmi obtížná záležitost a nejlepší výsledky dává metoda RR (viz [2]) převádějící problém výpočtu kořenů na problém vlastních čísel a nepoužívající hodnot polynomu. Navíc se pro daný problém nelze přesvědčit, zda byla hodnota kořene vypočtena správně prostým dosazením, protože pro každé x mezi -1 a $+1$ je $T_n(x) < 2^{-n}$.

Obraťme se nyní k problémům nároků na čas a paměť počítače. Nechť $M(n)$ je počet pracovních míst v paměti počítače a $\tau(n)$ počet operací (vteřin) výpočtového času, n je vhodný parametr, např. počet rovnic.

Pro inverzi obecné matice řádu n je $M(n) = Dn^2$ a $\tau(n) = Cn^3$. Odtud plyne, že v důsledku omezené kapacity paměti počítače lze jen s obtížemi invertovat i na velkých počítačích matice řádů větších než 500. C v $\tau(n)$ není obvykle známo. Pro odhad, jaké matice můžeme v rozumném čase invertovat na daném počítači nám může posloužit hrubý (avšak pro dané účely dostatečný) odhad C z hodnot $\tau(2n)$ a $\tau(n)$. Pro matice obsahující mnoho nul lze někdy použít iterativní metody, např. metodu Jacobiho nebo metodu SOR viz např. [6] a z matice uchovávat jen nenulové prvky (takové matice vznikají např. při řešení parciálních diferenciálních rovnic metodami sítí nebo konečných elementů). Poznamenejme že existují výpočtové procesy, pro které je $\tau(n) = Cn^6$.

Pro ilustraci postupu aplikace numerických metod při řešení konkrétní úlohy uveďme poněkud zjednodušený příklad z praxe. Je třeba pro různé λ z intervalu $(1/10, 10)$ a β z intervalu $(1/2, 1)$ určit hodnotu integrálu

$$I(\lambda, \beta) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1 - \cosh \beta x}{|x|^3} \sin(\lambda(x - \beta)) e^{-x[\sinh \beta x / (1 + \cosh \beta x)] - 1} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} R(x) dx .$$

(1)

Zopakujme hlavní body analýzy úlohy. Předně snadno zjistíme, že je zaručena konvergence v nekonečnu. Je proto nutné vyšetřit průběh integrandu v okolí nuly, neboť všude jinde je integrand spojitá funkce. Stačí vyšetřit chování zlomku (ostatní funkce jsou v nule spojitě). Zlomek a celý integrand se v okolí nuly chová jako funkce c/x . Integrál (1) v obvyklém smyslu tedy neexistuje. Zadavatel pak zpřesnil úlohu v tom smyslu, že jde o výpočet hlavní hodnoty integrálu (což je častý případ chyby v zadání), tj. bylo třeba vypočítat hodnotu:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} R(x) dx .$$

Poněvadž se integrand pro velká x chová přibližně jako $\sin \lambda z/z^3$, nepodařilo se dokázat, že je možno použít reziduovou větu. Navíc bylo obtížné v nezjednodušeném zadání reziduum vypočítat. Jednoduchou substitucí $y = -x$ problém převedeme na výpočet limity $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\varepsilon}^{\infty} (R(x) - R(-x)) dx$. Funkce $R'(x) = R(x) - R(-x)$ je v okolí nuly omezená. Zdálo by se tedy, že integrál můžeme počítat jako $\int_0^{\infty} R'(x) dx$. To však nelze, neboť v okolí nuly vznikají při výpočtu R' „malá čísla“ odečítáním „velkých“. Dochází tam tedy ke ztrátě platných cifer a bližší rozbor ukáže, že takto vzniklá chyba „pokazí“ hodnotu integrálu více, než je přípustné. R' se tedy musí počítat pomocí Taylorova rozvoje pro $R(x) - R(-x)$. Přitom je nutné velmi pečlivě volit bod δ , kde se od výpočtu podle rozvoje přechází na původní vzorec. Volba δ závisí na velikosti R' v okolí nuly, žádané přesnosti a vnitřní přesnosti stroje. Podle hodnoty δ a velikostí R' v okolí nuly se určí počet členů rozvoje. Pro velké hodnoty x jsou hodnoty $\sinh \beta x$ tak velké, že s nimi nelze počítat, neboť překračují rozsah aritmetiky počítače. Naštěstí pro velká x je $\sinh(x)/[1 + \cosh(x)] \doteq 1$. Nahradíme tedy v (1) pro $x < \vartheta$ exponent výrazem $-x - 1$. Z podobných důvodů je třeba nalézt číslo L tak, aby $\int_L^{\infty} R' dx < \varepsilon$. Nakonec se tedy realizoval výpočet takto: $I(\lambda, \beta) = \int_0^{\delta} R_1 dx + \int_{\delta}^{\vartheta} R_1 dx + \int_{\vartheta}^L R_3 dx$. V okolí δ se musí hodnota vypočtená z rozvoje lišit od hodnoty vypočtené podle původního vzorce v mezích zadané přesnosti. To bylo využito jako test správnosti programu.

Je zajímavé, že delší výpočtová praxe dá i dostatek citu pro odhad, zda je matematický model problému rozumně formulován. Je k tomu ovšem třeba nejen praxe a matematické poznatky, ale také jisté porozumění pro řešený problém. Porozumění problému nemusí být nijak hluboké, stačí odhad chování reality pro některé (extrémní) hodnoty parametrů a odhad chování matematického modelu pro stejné hodnoty parametrů.

Příkladem takového přístupu je výše uvedený příklad využití informace o průběhu chyby z obrázku na str. 283, kde je známo poměrně málo fakt. Víme jen, že průběh chyby je funkce určitého typu, že se chyba v aritmetice se zvýšenou přesností liší v jisté oblasti málo od chyby v aritmetice s menší přesností a že chyba na stoupající větvi funkce chyby má víceméně náhodný charakter. Přesto jsme byli schopni z těchto faktů vyvodit řadu důležitých závěrů.

Ve formulaci modelů bývá daleko největší část chyb způsobována hrubými nedopatřeními při matematické formulaci intuitivních představ. Nedopatření bývají způsobena tím, že příslušný odborník má sice vcelku správnou intuitivní představu, není však příliš zvyklý matematizovat nějaký problém do všech detailů. Neadekvátnost modelu často vede na numerické problémy, které lze jen s obtížemi řešit, zatímco u modelů správně sestavených bývá takový případ podstatně méně obvyklý. Již výskyt čísel 10^{30} a 10^{-30} v nějakém výrazu budí (často oprávněně) podezření, že s matematickým modelem je cosi v nepořádku a že by minimálně bylo vhodné zvolit jinak měřítka vstupních dat. Podobná situace nastává tehdy, je-li příslušný proces v principu numericky nestabilní, tj. silně závislý na zaokrouhlovacích chybách nebo silně citlivý na chyby ve vstupních datech. Typickým představitelem problému takového druhu je test, zda nějaká matice, např. $\begin{vmatrix} 1 & \varepsilon \\ \varepsilon & 1 \end{vmatrix}$ má násobné vlastní číslo (uvádíme zjednodušený příklad), nebo požadavek přesného výpočtu vlastních vektorů blízkých násobným, v našem případě požadavek, aby pro $|\varepsilon| < 10^{-20}$ byly vypočteny vektory $(1,1)$ $(1, -1)$, zatímco pro $\varepsilon = 0$ je řešením libovolná ortonormální báze dvourozměrného vektorového prostoru. Důvodem k tomuto tvrzení je fakt, že např. ve fyzice se málo rozštěpené spektrální čáry chovají téměř jako čára „nerozštěpená“, tj. problém se chová „spojitě“, zatímco v matematické formulaci se objevuje „nespojitosť“ ($\varepsilon = 0$ proti $\varepsilon \neq 0$).

Z toho, co jsme uvedli, plyne, že při aplikaci numerických metod na samočinných počítačích je třeba, aby řešitel

1. byl schopen algoritmizovat metody numerické matematiky;
2. znal výpočtové charakteristiky metody (vliv zaokrouhlovacích chyb, paměťovou a časovou náročnost, její výhody a nevýhody), uměl odhadnout, na co je metoda vhodná a na jaké problémy se nehodí;
3. znal programovací jazyk a programování;
4. byl si vědom nebezpečí plynoucích z konečnosti aritmetiky (viz příklady) a vyvaroval se bezmyšlenkovitého použití naprogramovaných algoritmů;
5. uměl odhadnout spolehlivost výsledku a adekvátnost modelu;
6. znal nejen možnosti, ale i meze možností počítačů; tento bod je velmi důležitý – brání přehnaným představám o možnostech počítačů, což zabrání příštímu rozčarování.

Pro nematematiky jsou důležitější praktické pokyny tak, jak jsou uvedeny výše než odvození metody; pro matematiky jsou však praktické pokyny rovněž neobyčejně důležité.

Tyto požadavky by měly být respektovány při výuce numerických metod na vysokých školách. Použití počítačů je spojeno s řadou problémů, které je třeba předávat v plné souvislosti. Je proto nutné např. výuce numerických metod věnovat ucelenou přednášku. Nelze proto souhlasit s tím, že na některých vysokých školách nejsou některé partie matematiky vázány na aplikace samočinných počítačů, že při dosti nedávné přestavbě studia byla dokonce na jisté fakultě zrušena samostatná přednáška z numerické matematiky.

Na závěr několik poznámek k výchově matematiků se zaměřením na samočinné počítače. Výchova matematiků v současné době prodělává bolestivý přerod. Možnosti

uplatnění matematiků v oblasti „čistě matematického“ výzkumu (který je možno provádět prakticky pouze na vysokých školách a v Akademii věd) se značně snížily. Hlavním potenciálním polem uplatnění matematiků jsou dnes samočinné počítače. Podle autorova mínění je v této oblasti potřeba mnoho matematicky erudovaných pracovníků. Uplatnění matematiků v této oblasti však naráží na dvě velké překážky. Prvá tkví v tom, že výchova počítačově zaměřených odborníků všech zaměření zaostala za potřebami. To vedlo k tomu, že při aplikaci počítačů převládá velmi často čistě empirický postup, který na jedné straně vedl k tomu, že efektivnost využití počítačů v integrovaných systémech řízení i mimo ně bývá někdy dosti nízká (je známa řada případů, kdy počítač pouze zdvojuje práci účtárny); na druhé straně se někdy jen obtížně hledá uplatnění pro pracovníky nezabývající se pouze problémy vznikajícími ze dne na den.

Druhá překážka tkví ve výchově matematiků. Výše jsme se pokusili naznačit, jakým způsobem je nutné postupovat při aplikaci numerických metod. Tento postup se dosti liší od běžných matematických postupů, je často nededuktivní a má v tom smyslu řadu společných rysů s empirickými vědami, např. s fyzikou. Takový přístup si jen s obtížemi osvojuje matematik vychovaný výhradně klasickým způsobem (tj. připravený k řešení problémů podle schématu definice – věta – důkaz), zaměřeným spíše na práci v rámci dané teorie, ale nepřipravujícím k interakci s „nematematickým“ okolím (s počítačem či zadavatelem problému), kde úkolem je nalézt řešení nějakého problému (např. algoritmus) bez toho, že by bylo možné předem stanovit všechny výchozí předpoklady. K dobré práci v tomto smyslu je nutná velmi dobrá úroveň matematického vzdělání v klasickém smyslu, nesmí však být zanedbána ani „aplikační“ část připravující matematika na situace, kdy bude spíše v pozici technika nebo fyzika, kdy bude muset spíše konstruovat a experimentovat než deduktivně dokazovat. Získat dostatečné znalosti a schopnosti v tomto druhém nededuktivním směru není právě lehké. Pokud je matematik zaměřen pouze klasickým způsobem podtrženým navíc jistou nechutí k nededuktivním postupům, stojí to mnoho úsilí a trpkosti u matematika i jeho okolí, než se tato překážka překoná. Při tom výše uvedené intuitivní postupy a zkušenosti z „experimentů“ mohou být velmi plodným zdrojem impulsů pro rozvoj matematiky (viz např. [5]). Nelze spoléhat na to, že teoretické znalosti stačí (jak se často děje). Je-li totiž možné použít již hotovou teorii, není zcela snadné rozpoznat možnost její aplikace a najít matematickou formulaci problému. Kromě toho teorie schopná plně řešit jistý problém často ani neexistuje.

Literatura

- [1] J. H. WILKINSON: *Rounding Errors in Numerical Processes*, Butterworths, London 1960.
- [2] J. H. WILKINSON: *The Algebraic Eigenvalue Problem*, Clarendon Press, Oxford, 1965 (ruský překlad Mir., 1969).
- [3] A. RALSTON, H. S. WILF: *Numerical Methods for High-Speed Digital Computers*, Vol. 1, Vol. 2, J. Willey and Sons, New York.
- [4] D. MACCRACKEN, U. DORN: *Numerical Methods and FORTRAN Programming*, John Willey and Sons, New York, 1965 (ruský překlad Mir., 1969).

- [5] I. BABUŠKA, J. PRÁGER, E. VITÁSEK: *Numerické řešení diferenciálních rovnic*, SNTL, Praha, 1964.
- [6] G. E. FORSYTHE, C. B. MOLER: *Computer Solution of Linear Algebraic Systems*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1967 (ruský překlad Mir, 1969).
- [7] R. E. MOORE: *Interval arithmetics*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1966.
- [8] P. HENRICI: *Elements of Numerical Analysis*, MacGraw Hill, New York, 1964.
- [9] D. E. KNUTH: *The Art of Computer Programming* Vol. 2, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1969.

Podíváte-li se na problém přesnosti historicky, poznáte, že přesnost se v matematice objevuje vždy dost opožděně. Euklidovská geometrie je pokládána za jeden z vrcholů matematické přesnosti; z moderního hlediska je však v Euklidově díle plno mezer. ... Je nemožné dokázat z Euklidových axiomů, že kružnice má vnitřek a vnějšek. Samozřejmě je důležité to vědět, na druhé straně, protože důkaz vyžaduje značné úsilí ..., bylo možná štěstím, že si Euklides neuvědomil, že to nemůže dokázat. ... To neznamená, že Jordanova věta o uzavřené křivce nemá v moderní matematice význam. Je velmi důležitá, ale přesto existence tak velké mezery v Euklidově geometrii nesnižuje hodnotu jeho díla.

Dovolte mi přeskočit několik století až k Newtonově práci na diferenciálním a integrálním počtu. Kdyby některý z našich studentů v 1. ročníku postupoval tak ledabyle a neodůvodněně jako Newton, určitě by nesložil zkoušku. Přesto zastávám názor, že celkově byla Newtonova práce velmi cenná.

Dostávám se k jednomu z největších jmen v historii matematiky, k Eulerovi. Euler byl schopen tvořit přesnou matematiku, ale příležitostně dělal věci, ze kterých vstávají vlasy na hlavě; například jeho manipulace s některými nekonečnými řadami byla zcela neoprávněná. Další dvě století vývoje matematiky trvalo zjištění, že prakticky vše, co Euler dělal, mohlo být zdůvodněno Euler měl „prostě štěstí“ s tucty velkých idejí, z nichž téměř každá se ukázala, že je správná. Jeho pozoruhodné matematické intuici se nikdo nevyrovnal.

Následující příběh se vypráví o velmi slavném moderním matematikovi, jednom ze spoluzakladatelů velkého odvětví matematiky. Publikoval jistý článek, ve kterém uvedl nějakou větu bez důkazu, a jeden ruský matematik ho

dopisem požádal o zaslání důkazu. Náš znamení matematik splnil tuto žádost; asi za měsíc dostal odpověď. Ruský matematik mu hluboce děkoval, přesto musel poukázat na to, že zasláný důkaz se týkal zcela jiné věty a byl nesprávný. Našemu osobitému matematikovi se přisuzuje opravdu mnoho nesprávných důkazů, přesto není mezi tvůrčími matematiky nikdo, kdo by ho nepovažoval za jednoho z největších matematiků tohoto století.

Po tomto pracovním historickém úvodu se vás chci zeptat: Mohou-li Euklides, Newton, Euler a mnozí současní matematici vejít do historie jako jedni z velkých, ačkoliv nebyli zdaleka přesní; nemyslíte, že stejný poklesek by se měl odpouštět i středoškolákům ?

*

V době počítačích strojů se musíme zamyslet nad tím, co je praktickým způsobem řešení rovnic a co je nepraktické.

Jednou jsme diskutovali o hledání kořenů algebraické rovnice, o užitečnosti Hornerovy metody. Navrhl jsem, abychom to vyzkoušeli. Jeden z mých kolegů měl stejně jako já k dispozici stolní počítač, oba jsme dostali touž rovnici pátého stupně a měli jsme nalézt některý její kořen s přesností na pět desetinných míst. Kolega měl užít Hornerovy metody a já se chystal užít postupných aproximací. Musím s politováním říci, že tento zvláštní test praktičnosti Hornerovy metody neumožnil žádný závěr, protože jsem našel kořen na pět desetinných míst dříve, než si kolega vzpomněl, jak se pracuje Hornerovou metodou. Byla to velká škoda, protože to bylo poprvé (a nejspíš naposledy) v jeho kariéře profesionálního matematika, kdy mohl užít Hornerovy metody.