Normák, kondíciószám

A fizika numerikus módszerei I.
mf1n1a06- mf1n2a06
Csabai István

Lineáris egyenletrendszerek

- Nagyon sok probléma közvetlenül lineáris egyenletrendszer megoldásával kezelhető
- Sok numerikus probléma (függvényillesztés, interpoláció, parciális differenciálegyenletek, stb.) lineáris egyenletrendszer megoldáshoz vezet
- A lineáris egyenletrendszerek megoldása során nagyon sok műveletet kell elvégezni, tipikusan N^3, egy N ismeretlenes rendszernél
- Már az adatbevitel során se tudjuk a számokat pontosan ábrázolni a lebegőpontos számokkal, és minden művelet során kerekítési hibát vét a gép, ezek halmozódnak
- Vajon mennyire pontos a megoldás?

A probléma megfogalmazása

- Az egzakt lineáris egyenletrendszer: $Ax = b$
- ha a jobb oldala hibás, jelöljük ezt így: $b + \delta b$

$$A(x + \delta x) = b + \delta b$$

- ha a mátrix elemeinek pontatlanságát vesszük figyelembe, az egyenlet így módosul:

$$(A + \delta A)(x + \delta x) = b$$

- Kérdés: hogyan függ az ismeretlenek hibája a jobb oldal illetve a mátrix elemek hibájától?

Norma

- Valahogy az eltérést kellene mérni egy számmal, tehát hogy δx mennyire nem 0.
- Skalár számok esetében erre használható az abszolút érték
- Vektorok esetében a vektor hossza:

$$\| x \| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}$$

- Ezek általánosítva tetszőleges vektorra: norma

A *norma* tulajdonságai

1. soha nem negatív: $\| x \| \geq 0$ minden x-re
2. csak nullvektor esetén 0: $\| x \| = 0 \Leftrightarrow x = 0$
3. skalárral szorozva a skalár abszolút értéke kiemelhet: $\| \alpha x \| = |\alpha| \; \| x \|$
4. háromszög egyenlőtlenség: $\| x + y \| \leq \| x \| + \| y \|$

- Házi feladat: 3 dimenziós vektoroknál leellenőrizni/bizonyítani

A *p-normák*

- A vektor elemeiből többféle kombinációval készíthető olyan norma (függvény) amely a definíciót kielégíti
- Pl. $$\| x \| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2} = \left(\sum_{i=1}^{3} |x_i|^2 \right)^{1/2}$$
- Ezt a kifejezést általánosítva, több dimenzióra

$$\| x \|_p := \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p \right)^{1/p}$$

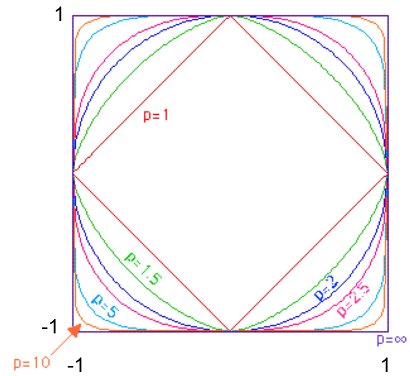
- Belátható róla, hogy teljesíti a norma minden feltételét, ha p>=1

Példák:

$$\| x \|_p := \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p \right)^{1/p}$$

- p=1: abszolút értékek összege: oktaéder norma
- p=2: „szokásos” távolság: euklideszi norma
- p=∞: határértékként a „maximum normát” kapjuk

$$\| x \|_\infty := max_i(|x_i|)$$



p-normák egységköre, n=2:

$$\|x\|_p = 1$$

Mátrixnorma

- A vektorokra definiált normát kiterjeszthetjük mátrixokra is

$$\| A \| := \max \left(\frac{\| Ax \|}{\| x \|} \right) \quad minden \quad x \neq 0$$

- Belátható róla, hogy teljesíti a norma minden feltételét és ezen kívül igaz, hogy:

$$\| Ax \| \leq \| A \| \| x \|$$

és

$$\| A \cdot B \| \leq \| A \| \| B \|$$

Példák mátrixnormára

- Ha kiszámoljuk a vektoroknál bevezetett p=1,2, ∞ normákhoz tartozó mátrixnormát a következőt kapjuk:

$$\| A \|_1 = max_j \left(\sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| \right)$$ „leghosszabb" oszlopvektor

$$\| A \|_\infty = max_i \left(\sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \right)$$ „leghosszabb" sorvektor

$$\| A \|_2 = \sqrt{\lambda_{max}(A^T A)}$$

szimmetrikus mátrixra: $\| A \|_2 = |\lambda_{max}(A)|$

ahol $\lambda_{max}(A)$ az A mátrix legnagyobb sajátértéke

Lineáris egyenletrendszer megoldásának hibabecslése

- Tekintsük a hibával terhelt jobb oldalú egyenletet

$$A(x + \delta x) = b + \delta b$$

kivonva a pontos egyenletet belőle:

$$A\delta x = \delta b$$

- Feltéve, hogy matematikailag létezik megoldás, vagyis a mátrix invertálható, kifejezzük a megoldást és alkalmazzuk a normát mindkét oldalra :

$$\| \delta x \| = \| A^{-1} \delta b \| \leq \| A^{-1} \| \| \delta b \|$$

- Felhasználva hogy: $0 < \| b \| = \| Ax \| \leq \| A \| \| x \|$ azt kapjuk:

$$\frac{\| \delta x \|}{\| x \|} \leq \frac{\| A^{-1} \| \| \delta b \|}{\| x \|} \leq \frac{\| A^{-1} \| \| \delta b \|}{\| b \| / \| A \|} = \| A^{-1} \| \| A \| \frac{\| \delta b \|}{\| b \|}$$

- vagyis a megoldás relatív hibája így függ a jobb oldal relatív hibájától:

$$\frac{\| \delta x \|}{\| x \|} \leq \| A^{-1} \| \| A \| \frac{\| \delta b \|}{\| b \|}$$

Kondíciószám

- A hiba kifejezésében

$$\frac{\| \delta x \|}{\| x \|} \leq \| A^{-1} \| \| A \| \frac{\| \delta b \|}{\| b \|}$$

- megjelenő tagot, kondíciószámnak nevezzük

$$\mathrm{cond}(A) := \| A^{-1} \| \| A \|$$

- Nem könnyű kiszámolni de következő kifejezés segíthet amikor a legnagyobb és legkisebb sajátérték becsülhető:

$$\mathrm{cond}(A) \geq \left| \frac{\lambda_{max}(A)}{\lambda_{min}(A)} \right|$$

Kondíciószám

$$\frac{\| \delta x \|}{\| x \|} \leq \mathrm{cond}(A) \frac{\| \delta b \|}{\| b \|}$$

- Mekkora lehet? Akár csökkentheti a hibát?

$$\| I \| = \max_x \frac{\| Ix \|}{\| x \|} = 1$$

$$1 = \| I \| = \| AA^{-1} \| \leq \| A \| \| A^{-1} \| = \mathrm{cond}(A)$$

- Vagyis, a relatív hiba csak nőhet:

$$\boxed{\mathrm{cond}(A) \geq 1}$$

A megoldás hibája

$$\frac{\| \delta x \|}{\| x \|} \leq \mathrm{cond}(A) \frac{\| \delta b \|}{\| b \|}$$

- Tehát, ha a kondíció szám nagy, azaz rosszul kondicionált a mátrix, akkor nagyon nagy lehet a hiba
- A jobb oldal hibáját a gépi számábrázolás pontossága határozza meg, tipikus értéke $\epsilon_m = 10^{-7}$ dupla pontos ábrázolással is csak $\epsilon_m = 10^{-16}$
  így ha $\mathrm{cond}(A) \simeq 1/\epsilon_m$ akkor a megoldás hibája 1 nagyságrendű lehet, vagyis egy számjegy pontossággal se helyes.
- Nagyon nagy mátrixoknál ez tipikus, bizonyos esetekben sokkal kisebb mátrixoknál is teljesülhet

Példa

$$A(t) := \begin{pmatrix} 1 & t \\ t & 1+t^2 \end{pmatrix} \qquad A^{-1}(t) = \begin{pmatrix} 1+t^2 & -t \\ -t & 1 \end{pmatrix}$$

- Ekkor, t-től függetlenül $\det(A) = 1$
  vagyis matematikai értelemben megoldható az egyenletrendszer, viszont $\mathrm{cond}(A)_\infty = (1 + |t| + t^2)^2$
  így pl. t=100-nál már 10^8-nál nagyobb kondíció számot kapunk, azaz ez az egyszerű kis egyenletrendszer már nem oldható meg egyszeres pontosságú aritmetikával.
- Egy másik rosszul kondicionált mátrix, a Hilbert-féle mátrix

$$H_n = \left(\frac{1}{i+j-1} \right)_{i,j=1}^{n}$$

Ez már n=10 esetében is 10^{13}-nál nagyobb kondíciószámot ad

$$A(10) = \begin{pmatrix} 1 & 100 \\ 100 & 10001 \end{pmatrix}$$

$$H_5 = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 & 1/4 & 1/5 \\ 1/2 & 1/3 & 1/4 & 1/5 & 1/6 \\ 1/3 & 1/4 & 1/5 & 1/6 & 1/7 \\ 1/4 & 1/5 & 1/6 & 1/7 & 1/8 \\ 1/5 & 1/6 & 1/7 & 1/8 & 1/9 \end{pmatrix}$$

Hiba a mátrixelemekben

$$(A + \delta A)(x + \delta x) = b$$

- Ekkor is a kondíciószámmal fejezhető ki a hiba:

$$\frac{\| \delta x \|}{\| x \|} \leq \frac{\kappa}{1 - \kappa} \quad ahol\ \kappa := \mathrm{cond}(A) \frac{\| \delta A \|}{\| A \|}$$

Fontos megjegyzendő

Analitikusan a megoldás feltétele, hogy a determináns nem 0. Viszont kis determináns érték nem jelenti azt, hogy numerikusan nehéz kezelni. Pl. az előbb A(t) determinánsa a kondíciószámtól független volt, vagy konstanssal szorzás a determinánst változtatja, a kondíciószámot nem.

Numerikus szempontból nem a determináns, hanem a kondíciószám határozza meg, hogy megoldható-e egy lineáris egyenletrendszer.

Olvasnivaló (levezetések)

- Stoyan G.: Numerikus matematika (Typotex, 2007) 21-40.oldal.