Linjära system, del 2

- Denna föreläsning:
  - Noggrannhet m a p avrundningsfel: residual, konditionstal
  - Normer
  - Varför `A\b` är effektivare än `inv(A)*b`, d v s gausselimination är effektivare än att utföra operationen $x = A^{-1}b$
- Dessa anteckningar bygger på material av Stefan Pålsson, Avdelningen för teknisk databehandling, Uppsala Universitet

Noggrannhet

$$Ax = b$$

- Exakt lösning x (vanligen inte känd)
- Avrundningsfel i algoritmen ger beräknad lösning $\tilde{x}$
- Hur noggrann är den beräknade lösningen?
- "Naturlig" test: kolla om ekvationerna är uppfyllda!
- **residualen**

$$b - A\tilde{x}$$

borde bli nästan noll

Residual och noggrannhet: exempel

$$A = \begin{pmatrix} 1.2969 & 0.8648 \\ 0.2161 & 0.1441 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 0.8642 \\ 0.1440 \end{pmatrix}$$

```
>> xe = single(A)\single(b)
xe =
    1.3332
   -1.0000
>> xd = A\b
xd =
    2.0000
   -2.0000
```

`xe` beräknad med A och b i enkel precision

`xd` beräknad med A och b i "vanlig", dubbel precision

Residual och noggrannhet: exempel

```
>> res = b - A*xe
res =
   1.0e-06 *
   -0.1152
   -0.0087
```

Residualen liten: "exakt upp till avrundningsfel", d v s i storleksordningen ϵ_M i enkel precision

```
>> xd - xe
ans =
    0.6668
   -1.0000
```

Men felet är stort!

```
>> cond(A)
ans =
   2.4973e+08
```

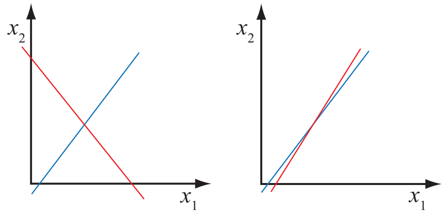
Obs att det s k **konditionstalet** är högt!

Konditionstal och residual

- Slutsats: residualen är **inte** ett tillförlitligt mått på noggrannheten!
- Varför?
- Problemet i exemplet är **illakonditionerat** (=störningskänsligt)
- Behöver ett bättre sätt att uppskatta felet än att kolla residualen!

Konditionstal och residual

- Väl- resp illakonditionerade problem kan åskådliggöras grafiskt för två obekanta:



- De två linjerna visar vilka x_1- och x_2-värden som uppfyller de två ekvationerna
- Lösningen till ekvationssystemet finns i skärningspunkten mellan linjerna
- Om ekvationerna nästan beskriver samma linje, är linjerna nära varandra även långt från skärningspunkten, d v s residualen är liten även långt från lösningen

Norm

- För att mäta fel behöver kunna mäta “storlek” av vektorer och matriser på ett sätt som motsvarar absolutbelopp för reella tal
- Görs med **normer**: $\|x\|$ är normen av vektorn x, t ex
- Finns både **vektornorm** och **matrisnorm**

Norm

De vanliga vektornormer för $x = (x_1, \dots, x_n)^T$:

- 2-norm, euklidisk norm:
$$\|x\|_2 = \sqrt{|x_1|^2 + |x_2|^2 + \cdots + |x_n|^2}$$
- 1-norm
$$\|x\|_1 = |x_1| + |x_2| + \cdots + |x_n|$$
- ∞-norm, maxnorm
$$\|x\|_\infty = \max(|x_1|, |x_2|, \dots, |x_n|)$$

Norm

- Varför olika normer?
- Ibland "passar" en särskild norm bättre:
  - 2-normen ger "fågelvägen"
  - 1-normen ger avståndet för kortaste vägen längs gatorna

Norm

Matrisnorm

- Definieras vanligen utgående från en given vektornorm:

$$\|A\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}$$

- Säger hur stor mycket "längre" en vektor maximalt kan bli efter multiplikation med matrisen
- Ur detta följer att för varje $x \neq 0$ gäller

$$\frac{\|Ax\|}{\|x\|} \leq \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} = \|A\| \qquad (1)$$

  d v s

$$\|Ax\| \leq \| A\|\|x\| \qquad \forall x$$

- Enklare formler än själva definitionen kan härledas för 1-, ∞-, och 2-norm

Norm

- Man kan härleda följande:

$$\|A\|_1 = \max_j \left(\sum_i |A_{ij}| \right) \quad \text{(största 1-normen av kolonnvektorerna)}$$

$$\|A\|_\infty = \max_i \left(\sum_j |A_{ij}| \right) \quad \text{(största 1-normen av radvektorerna)}$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\max_i (\lambda_i (A^T A))} \quad \text{(kvadratroten av största egenvärdet till } A^T A\text{)}$$

- 1- eller ∞-normerna mycket enklare och snabbare att beräkna!

Norm

I Matlab:

`norm(x)`	2-normen av rad- eller kolonnvektorn `x`
`norm(A)`	2-normen av matrisen `A`
`norm(A,1)`	1-normen av matrisen `A`
`norm(A,inf)`	∞-normen av matrisen `A`

Norm och konditionstal

Antag att vektorn $\tilde{b}$ representerar en störning av b (t ex genom avrundningsfel) och x, $\tilde{x}$ motsvarande lösning av det linjära ekvationssystemet

$$
\begin{aligned}
&Ax = b, \quad A\tilde{x} = \tilde{b} &&\Rightarrow A(x-\tilde{x}) = b - \tilde{b} \quad \Leftrightarrow \\
&x - \tilde{x} = A^{-1}(b-\tilde{b}) &&\Rightarrow \|x-\tilde{x}\| = \|A^{-1}(b-\tilde{b})\| \leq \| A^{-1}\| \|b-\tilde{b}\|
\end{aligned}
$$

Egenskapen (1) har använts i sista olikheten. Dividerar vi med $\|x\|$ får vi

$$\frac{\|x-\tilde{x}\|}{\|x\|} \leq \frac{\|A^{-1}\|}{\|x\|}\|b-\tilde{b}\| \tag{2}$$

Eftersom $\|b\| = \|Ax\| \leq \| A\|\|x\|$ (igen används (1)), gäller att

$$\frac{1}{\|x\|} \leq \frac{\|A\|}{\|b\|} \tag{3}$$

Substitueras (3) in i (2), får vi följande feluppskattning:

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

Norm och konditionstal

- Vi har alltså bevisat följande uppskattning av det relativa felet:

$$\frac{\|x-\tilde{x}\|}{\|x\|} \leq \kappa(A)\frac{\|b-\tilde{b}\|}{\|b\|}$$

  där $\kappa(A) = \|A^{-1}\|\|A\|$ kallas **matrisens konditionstal**
- Tolkning: relativa felet i x begränsas av konditionstalet gånger relativa felet i högerledet
- Fel i indata b kan alltsp förstärkas med en faktor $\kappa(A)$ i lösningsprocessen

Norm och konditionstal

- Obs att beräkningen av konditionstal beror på vilken norm som används
- För vårt gamla exempel

$$A = \begin{pmatrix} 1.2969 & 0.8648 \\ 0.2161 & 0.1441 \end{pmatrix} \qquad \begin{aligned} \kappa_2(A) &= 2.5 \times 10^8 \\ \kappa_1(A) &= 3.3 \times 10^8 \\ \kappa_\infty(A) &= 3.3 \times 10^8 \end{aligned}$$

- Relativa felet i b är i bästa fall avrundningsfelet, dvs ca 10^{-16} (i enkelprecision ca 10^{-8})
- I enkelprecision kan all noggrannhet förstöras (relativa felet 1, d v s 100 %), i dubbel precision “halva” noggranheten

Konditionstal

- Högt konditionstal (illakonditionerat problem) tyder på att matrisen “nästan” är singulär
- Matematiskt är en matris antingen singulär eller icke-singulär. För beräkningsändamål relevant att också tala om “nästan” singulära matriser
- Högt konditionstal är en egenskap hos det underliggande problemet!
- Högt konditionstal kan bero på olämplig problemformulering, men kan även indikera att den underliggande fysikaliska verkligheten är störningskänslig
- Konditionstalet och därmed den potentiella känsligheten för störningar kan **inte** ändras genom val av lösningsalgoritm för det linjära systemet!

Konditionstal

- Konditionstal fungerar som en varning: felet **kan** bli stort
- Konditionstal betraktar värsta fallet: kan hända att felet inte blir så stort som konditionstalet indikerar
- Det gäller att
$$\kappa(A) = \|A^{-1}\|\|A\| \geq \| A^{-1}A\| = \|I\| = 1$$
- Konditionstalet är alltså i bästa fall 1, vilket medför ingen förstärkning av felet

Att (inte) använda inversen

- Ett alternativ till att lösa $Ax = b$ med LU-faktorisering skulle kunna vara att explicit utföra beräkningen $x = A^{-1}b$

```
>> A = rand(2000,2000);
>> b = rand(2000,1);
>> tic; x = A\b; toc
Elapsed time is 1.389881 seconds.
>> tic; x = inv(A)*b; toc
Elapsed time is 3.504218 seconds.
```

- Att explicit använda sig av inversen tar mer än dubbelt så lång tid. Varför?

Att (inte) använda inversen

- Att beräkna inversen motsvarar att lösa ekvationssystem med n stycken högerled givna av enhetsmatrisen
$$\hat{A} = \left(\begin{array}{c|ccccc} & 1 & 0 & \cdots & & \\ & 0 & 1 & 0 & \cdots & \\ A & \vdots & & \ddots & & \vdots \\ & & \cdots & 0 & 1 & 0 \\ & & & \cdots & 0 & 1 \end{array}\right)$$
- Inversen kan beräknas med **en** LU-faktorisering, följd av n st framåt- och bakåtsubstitutioner
- Vi bortser från pivotering för enkelhets skull. (Ändrar inte slutsatsen). LU-faktorisering: $A = LU$. Låt $e^{(i)}$ vara kolonn i i enhetsmatrisen. För $i = 1, \ldots, n$, lös ekvationerna
$$Ld^{(i)} = e^{(i)}$$
$$Ux^{(i)} = d^{(i)}$$
Då är $x^{(i)}$ kolonn i i inversen A^{-1}.

Att (inte) använda inversen

- Komplexitet?
- LU-faktorisering: $\frac{2}{3}n^3 + O(n^2)$
- Framåt- och bakåtsubstitution $\frac{1}{2}n^2 + \frac{1}{2}n^2 + O(n) = n^2 + O(n)$ operationer
  - Framåtsubstitutionen kan minskas till $\frac{1}{6}n^2$ om man ser till att utnyttja den speciella högersidan (se s 224 i boken)
- Totalt: $\frac{2}{3}n^3 + n(n^2) + O(n^2) = \frac{5}{3}n^3 + O(n^2)$

Att (inte) använda inversen

- Alltså:
  - Antal operationer för `x=inv(A)*b`: $\frac{5}{3}n^3 + O(n^2)$
  - Antal operationer för `x=A\b`: $\frac{2}{3}n^3 + O(n^2)$
- Slutsats: Använd backslash, inte inversen!

Konditionstal i Matlab

- Hur beräknar man $\kappa(A) = \|A^{-1}\|\|A\|$? Beräkningskrävande om man genomför det exakt.
- Vanligen använder man **uppskattningar**. I Matlabs backslash uppskattas $1/\kappa(A)$ (RCOND).
- Exempel:

```
>> A\b
Warning: Matrix is close to singular or badly scaled.
         Results may be inaccurate. RCOND = 8.113755e-020.
```

ger uppskattningen $\kappa(A) \approx 10^{19}$