Sensibilidade de Sistemas Lineares

Efeitos dos Erros de Arredondamento

Errar não é só humano

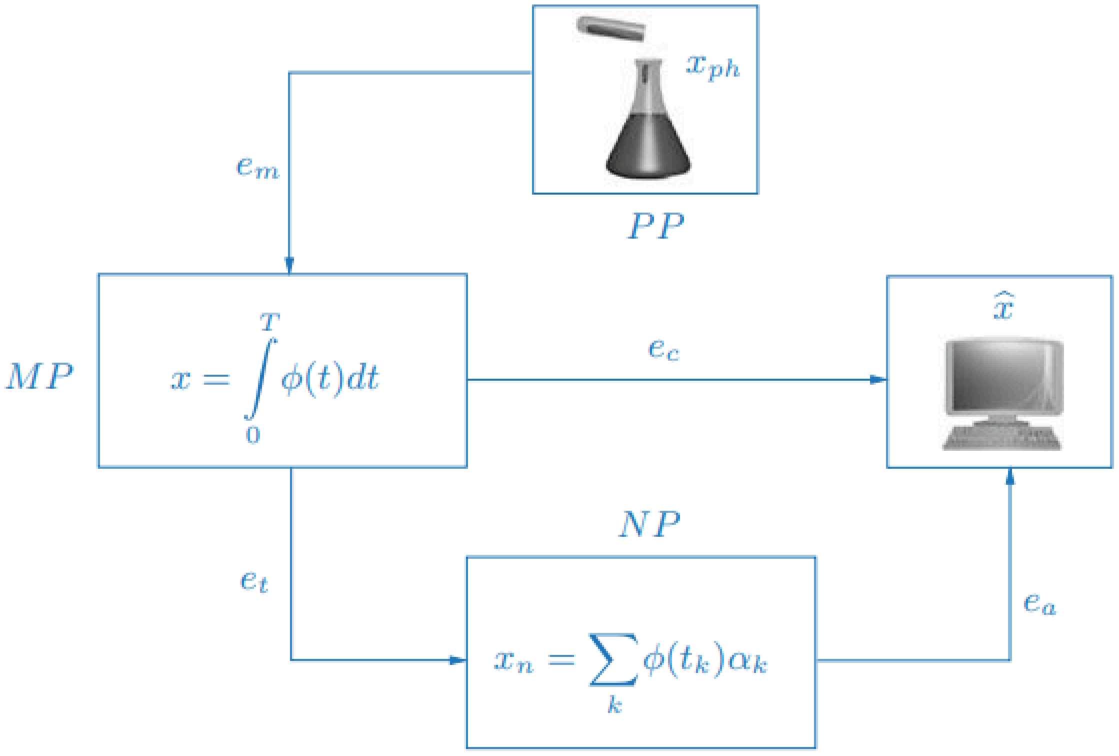

Fig. 1.6. Types of errors in a computational process

1. **Erro do Modelo** (e_m)
   Ocorre ao simplificar a realidade física (PP) em um modelo matemático (MP). Está além do controle computacional.

Errar não é só humano

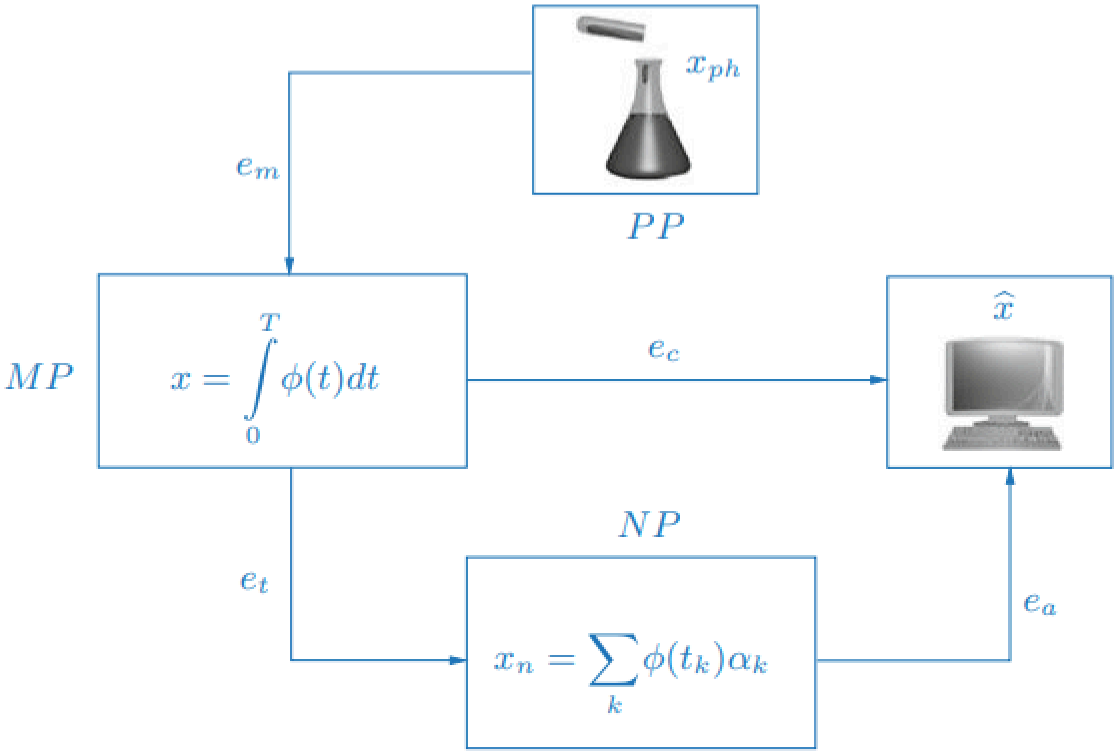

Fig. 1.6. Types of errors in a computational process

2. **Erro Algorítmico** (e_a)
   Erros introduzidos durante a resolução computacional do modelo matemático, principalmente devido a arredondamentos na representação numérica.

Errar não é só humano

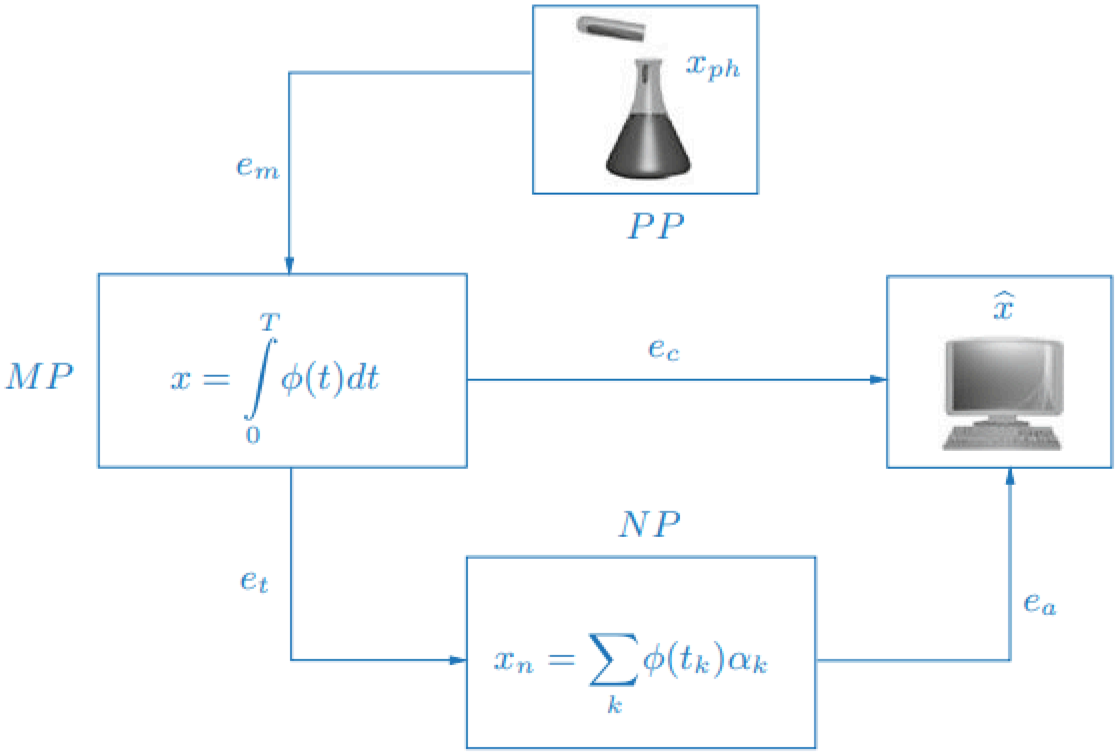

Fig. 1.6. Types of errors in a computational process

3. **Erro de Truncamento** (e_t)
   Erros introduzidos ao aproximar sequências infinitas por operações finitas. Ocorre quando a solução numérica (x_n) difere da solução exata (x).

Errar não é só humano

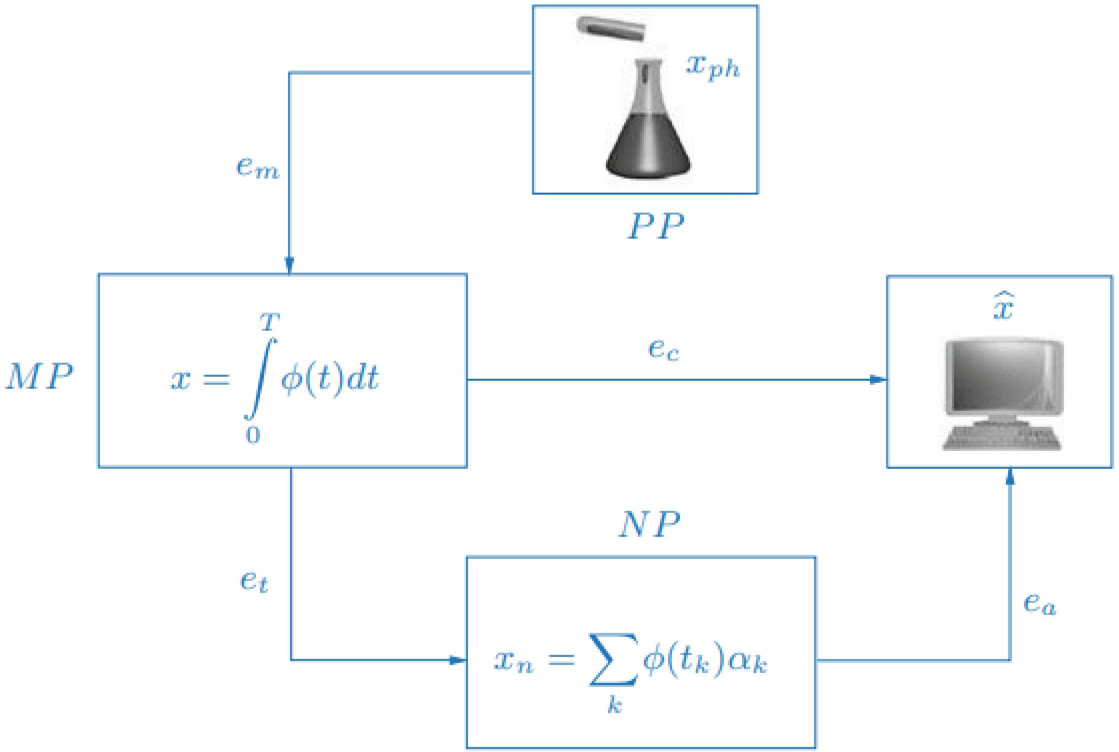

Fig. 1.6. Types of errors in a computational process

4. **Erro Computacional** (e_c)
   O erro total que surge a partir da soma do erro algorítmico (e_a) e do erro de truncamento (e_t).

   Este é o erro de interesse ao resolver problemas numéricos.

Quarteroni, Alfio, Fausto Saleri, and Paola Gervasio. Scientific computing with MATLAB and Octave. Vol. 3. Berlin: Springer, 2006.

Precisão Numérica

A precisão numérica é afetada pela ***ordem das operações aritméticas*** (pelo algoritmo).

Como ilustração, suponha uma máquina com dois algarismos significativos e que desejamos calcular

$$1 + \epsilon + \epsilon + \ldots + \epsilon,$$

onde $\epsilon = 3.0 \times 10^{-2}$ e que tenhamos $n = 11$ parcelas.

Algoritmo Ingênuo de Soma

```
s = 0
for i in range(n):
  s += epsilon
```

Algoritmo de Soma de Kahan

```
s = 0
c = 0
for i in range(n):
  # y : parcela + compensação
  y = epsilon - c
  # soma efetiva
  t = s + y
  # c : erro de arredondamento
  c = (t - s) - y
  s = t
```

Algoritmo de Soma de Kahan

k	$y = \epsilon - c$	$t = s + y$	$c = (t - s) - y$	$s = t$
1	3.0×10^{-2}	1.0	$(1.0 - 0.0) - 3.0 \times 10^{-2} = -3.0 \times 10^{-2}$	1.0
2	6.0×10^{-2}	1.0	$(1.0 - 0.0) - 6.0 \times 10^{-2} = -3.0 \times 10^{-2}$	1.0
3	9.0×10^{-2}	1.0	$(1.0 - 0.0) - 9.0 \times 10^{-2} = -6.0 \times 10^{-2}$	1.0
4	1.2×10^{-1}	1.1	$(1.1 - 1.0) - 1.2 \times 10^{-2} = -2.0 \times 10^{-2}$	1.1
5	5.0×10^{-2}	1.1	$(1.1 - 1.1) - 5.0 \times 10^{-2} = -5.0 \times 10^{-2}$	1.1
6	8.0×10^{-2}	1.1	$(1.1 - 1.1) - 8.0 \times 10^{-2} = -8.0 \times 10^{-2}$	1.1
7	1.1×10^{-1}	1.2	$(1.2 - 1.1) - 1.1 \times 10^{-1} = -1.0 \times 10^{-2}$	1.2

Caso de estudo

Para a matriz A, calcule a solução dos sistemas lineares $Ax = b$ e $A\hat{x} = \hat{b}$ onde

$$A = \begin{bmatrix} 1000 & 999 \\ 999 & 998 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1999 \\ 1998 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \hat{b} = \begin{bmatrix} 1999 \\ 1998.001 \end{bmatrix}.$$

Escrevendo $\hat{x} = x + \delta x$ e $\hat{b} = b + \delta b$, compare as variações relativas $\dfrac{\delta x}{x}$ e $\dfrac{\delta b}{b}$.

Norma de um vetor

Uma norma (ou **norma vetorial**) em $\mathbb{R}^n$ é uma função que atribui a cada $x \in \mathbb{R}^n$ um número real não-negativo $\|x\|$, tal que para todos $x, y \in \mathbb{R}^n$ e todos $\alpha \in \mathbb{R}$:

1. **Positividade**
   $\|x\| \geq 0$ para todo x, e $\|x\| = 0$ se e somente se $x = 0$
2. **Homogeneidade absoluta**
   $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$
3. **Desigualdade triangular**
   $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$

Exemplos

1. Norma euclidiana

$$||x||_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2}$$

2. Norma de Manhattan (ou *norma do valor absoluto* ou *norma 1*)

$$||x||_1 = |x_1| + |x_2| + \cdots + |x_n|$$

3. Norma infinita

$$||x||_\infty = \max(|x_1|, |x_2|, \cdots, |x_n|)$$

4. Norma p

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

Norma de uma matriz

Para todos $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e $\alpha \in \mathbb{R}$:

1. **Positividade**
   $\|A\| \geq 0$ para todo A, e $\|A\| = 0$ se e somente se $A = 0$
2. **Homogeneidade absoluta**
   $\|A\alpha\| = |\alpha|\|A\|$
3. **Desigualdade triangular**
   $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$
4. **Submultiplicatividade**
   $\|AB\| \leq \|A\|\|B\|$

Exemplos

1. Norma de Frobenius

$$||A||_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}^2}$$

2. Norma de Schatten p

$$||A||_p = \left(\sum_{i=1}^{n} \sigma_i^p\right)^{1/p},$$

onde σ_i são os valores singulares de A.

Norma Matricial Induzida

Seja $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. A norma induzida por uma norma vetorial $\|\cdot\|$ é definida como

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

A norma induzida mede a amplificação máxima de um vetor x por uma matriz A.

Teorema 2.1.26

A norma matricial induzida é uma norma matricial.

Teorema 2.1.24

Uma norma vetorial e sua norma matricial induzida satisfazem a desigualdade

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

para todo $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e $x \in \mathbb{R}^n$.

Além disso, sempre existe um vetor x tal que $||Ax|| = ||A|| \, ||x||$.

Retornando ao caso de estudo

1. $Ax = b$ e $A(x + \delta x) = b + \delta b$ implica em $A\delta x = \delta b$, portanto $\delta x = A^{-1}\delta b$.
2. Uma vez que $||Az|| \leq ||A||\,||z||$ para todo $z \in \mathbb{R}^n$, temos
   2.1 $||\delta x|| \leq ||A^{-1}||\,||\delta b||$.
   2.2 $||b|| \leq ||A||\,||x|| \implies ||x|| \geq \dfrac{||b||}{||A||}$.

Portanto,

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

Número de Condição

Seja A uma matriz não singular. O número de condição de A é definido como

$$\kappa(A) = ||A||||A^{-1}||.$$

1. *O número de condição mede a sensibilidade da solução de um sistema linear às variações dos dados.*
2. *Em um sistema linear com número de condição alto, pequenas variações nos dados podem causar grandes variações na solução.*

Retornando ao caso de estudo...

Calcule o número de condição da matriz A para a norma de Frobenius.

Exemplo: Matrizes de Hilbert

Um dos exemplos mais famosos de matrizes mal condicionadas são as **matrizes de Hilbert**, definidas por $h_{ij} = 1/(i + j - 1)$.

Essas matrizes são simétricas, podem ser mostradas como positivas definidas e se tornam cada vez mais mal condicionadas à medida que n aumenta. Por exemplo, $\kappa_2(H_4) \approx 1.6 \times 10^4$ e $\kappa_2(H_8) \approx 1.5 \times 10^{10}$.

$$H_4 = \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 & 1/4 \\ 1/2 & 1/3 & 1/4 & 1/5 \\ 1/3 & 1/4 & 1/5 & 1/6 \\ 1/4 & 1/5 & 1/6 & 1/7 \end{bmatrix},$$

Interpretação Geométrica do Condicionamento

Definições

Ampliação máxima e mínima

$$maxmag(A) = \max_{x \neq 0} \frac{||Ax||}{||x||} \quad \text{e} \quad minmag(A) = \frac{||Ax||}{||x||}$$

Nota: Ampliação máxima é outro nome para a norma induzida $||A||$.

Propriedades

$$maxmag(A) = \frac{1}{minmag(A^{-1})} \quad \text{e } maxmag(A^{-1}) = \frac{1}{minmag(A)}$$

Interpretação Geométrica do Condicionamento

Prova

Sabendo que $maxmag(A) = \max_{x \neq 0} \frac{||Ax||}{||x||}$ e escrevendo $y = Ax$, obtemos

$$\begin{aligned}
\operatorname{maxmag}(A) = & \max_{A^{-1}y \neq 0} \frac{\|y\|}{\|A^{-1}y\|} = \min_{A^{-1}y \neq 0} \frac{\|A^{-1}y\|}{\|y\|} \\
= & \min_{y \neq 0} \frac{\|A^{-1}y\|}{\|y\|} = \operatorname{minmag}(A^{-1})
\end{aligned}$$

Interpretação Geométrica do Condicionamento

Teorema 2.1.12

$$\kappa(A) = \frac{maxmag(A)}{minmag(A)}, \text{ para toda matriz } A \text{ não singular.}$$

Nota:

1. Em matrizes mal condicionadas, a razão entre as amplificações máxima e mínima são muito grandes ($\kappa(A) \gg 1$).
2. Portanto, alguns vetores serão muito ampliados, enquanto outros serão muito contraídos.
3. Esta desproporção é que permite erros pequenos serem amplificados quando as matrizes são mal condicionadas.

Condicionamento vs Determinante

Ainda que o condicionamento envolva tanto A quanto A^{-1} e que A^{-1} só exista se $det(A) \neq 0$, a verdade é que ***o determinante não é útil no cálculo do condicionamento***.

Exemplo

Considere a matriz

$$A_\alpha = \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \alpha \end{bmatrix}.$$

Temos $\det(A) = \alpha^2$, mas para qualquer norma induzida $\kappa(A) = 1$. Portanto, A_α é bem condicionada mesmo quando temos $det(A) = \alpha^2$ muito pequeno.

Mal Condicionamento e *Scaling*

Algumas vezes o problema do mal condicionamento é causado pela diferença entre as magnitudes das linhas (colunas) da matriz.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \epsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \epsilon \end{bmatrix}.$$

Se fizermos uma perturbação $b + \delta b = \begin{bmatrix} 1 \\ 2\epsilon \end{bmatrix}$ encontraremos a solução perturabada $x + \delta x = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$, ou seja, $\frac{||\delta x||}{||x||} \gg \frac{||\delta b||}{||b||}$.

De fato, A é mal condicionada para $\epsilon \approx 0$,

$$\kappa_1(A) = \kappa_2(A)) = \kappa_\infty(A) = 1/\epsilon$$

Teorema 2.2.25

Seja A uma matriz não singular qualquer, e sejam $a_1, a_2, \ldots, a_n$ suas colunas. Então, para qualquer i e j,

$$\kappa_p(A) \geq \frac{\|a_i\|_p}{\|a_j\|_p}, \quad 1 \leq p \leq \infty.$$

Prova. Claramente $a_i = Ae_i$ (e_i base canônica). Portanto,

$$\operatorname{maxmag}(A) = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_p} \geq \frac{\|Ae_i\|_p}{\|e_i\|_p} = \|a_i\|_p,$$

$$\operatorname{minmag}(A) = \min_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_p} \leq \frac{\|Ae_j\|_p}{\|e_j\|_p} = \|a_j\|_p,$$

$$\kappa_p(A) = \frac{\operatorname{maxmag}(A)}{\operatorname{minmag}(A)} \geq \frac{\|a_i\|_p}{\|a_j\|_p}.$$

Estimando o Condicionamento

Uma vez que $\frac{\|A^{-1}w\|_1}{\|w\|_1} \leq \max_{y\neq 0} \frac{\|A^{-1}y\|_1}{\|y\|_1} = \|A^{-1}\|_1$.

Tomando $w = b$, temos $A^{-1}w = x$, então

$$\frac{\|x\|_1}{\|b\|_1} \leq \|A^{-1}\|_1 \quad \text{e} \quad \kappa_1(A) \geq \frac{\|A\|_1\|x\|_1}{\|b\|_1} = \frac{\|A\|_1\|A^{-1}w\|_1}{\|w\|_1}.$$

Se tivermos uma decomposição LU de A, podemos calcular $A^{-1}w$ resolvendo $Ac = w$. Além disso, se w for escolhido em uma direção próxima da amplificação máxima por A^{-1}, a teremos

$$\kappa_1(A) \approx \frac{\|A\|_1\|A^{-1}w\|_1}{\|w\|_1}$$

Perturbação na Matriz A

Teorema 2.3.1

Se A é não singular e $\dfrac{\|\delta A\|}{\|A\|} < \dfrac{1}{\kappa(A)}$, então $A + \delta A$ é não singular.

Teorema 2.3.3

Seja A não singular, seja $b \neq 0$, e sejam x e $\hat{x} = x + \delta x$ soluções de $Ax = b$ e $(A + \delta A)\hat{x} = b$, respectivamente. Então,

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \kappa(A) \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}$$

Demonstração

Reescrevendo a equação $(A + \delta A)\hat{x} = b$ como $Ax + A\delta x + \delta A\hat{x} = b$, utilizando a equação $Ax = b$, e reorganizando a equação resultante, obtemos $\delta x = -A^{-1}\delta A\hat{x}$. Assim,

$$\|\delta x\| \leq \|A^{-1}\|\|\delta A\|\|\hat{x}\|.$$

Dividindo por $\|x\|$ e usando a definição $\kappa(A) = \|A\|\|A^{-1}\|$, obtemos o resultado desejado.

Análise à *posteriori*, usando resíduo

Teorema 2.4.1

Seja A não singular, seja $b \neq 0$, e seja $\hat{x}$ uma aproximação para a solução de $Ax = b$ (em outras palavras, $\hat{x}$ é qualquer vetor). Seja $r = b - A\hat{x}$. Então,

$$\frac{\|x - \hat{x}\|}{\|x\|} \leq \kappa(A) \frac{\|r\|}{\|b\|}.$$

PERGUNTAS?