Обусловленность и устойчивость

Обусловленность задачи

Пусть есть абстрактная вычислительная задача.

Дано: x, найти: $f(x)$. Коль скоро x — это нечто, представленное в компьютере, можно сказать, что он представлен неточно и отличается от истинного на некоторое значение Δx. Часто бывает так, что и сами исходные данные представлены с какой-то ошибкой.

$$\Delta f = f(x + \Delta x) - f(x)$$

Необходимо исследовать, как такие ошибки влияют на значения функции $f(x)$.

Абсолютная обусловленность — это предел отношения нормы приращения f к норме приращения x:

$$\nu = \lim_{\varepsilon \to 0} \sup_{||\Delta x|| < \varepsilon} \frac{||\Delta f||}{||\Delta x||}$$

Более естественным понятием является *относительная обусловленность*:

$$\mu = \lim_{\varepsilon \to 0} \sup_{||\Delta x|| < \varepsilon} \frac{||\Delta f|| / ||f||}{||\Delta x|| / ||x||}$$

Допустим, если $\mu = 10$, можно сказать, что одна неизвестная десятичная цифра в x приводит к тому, что в f неизвестно уже две десятичные цифры.

Обусловленность задачи вычисления значения вещественной функции одной переменной

В случае такой задачи вычисления обусловленности несколько упрощаются:

- Абсолютная обусловленность: $\nu = \lim_{|\Delta x| \to 0} \frac{|\Delta f|}{|\Delta x|} = |f'|$
- Относительная обусловленность: $\mu = \lim_{|\Delta x| \to 0} \frac{|\Delta f| / |f|}{|\Delta x| / |x|} = |\frac{f' x}{f}|$

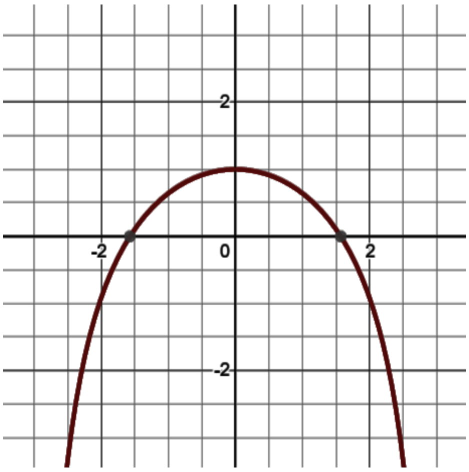
Рассмотрим значения относительной обусловленности для некоторых функций:

$$\begin{array}{ccc} \mu_{\sqrt{x}} & = & 1/2 \\ \mu_{1/x} & = & 1 \\ \mu_{x^n} & = & n \\ \mu_{e^x} & = & x \\ \mu_{\sin x} & = & \frac{x}{\tan x} \end{array}$$

Задача вычисления корня обусловлена хорошо, что можно сказать и про $f(x) = \dfrac{1}{x}$.

Задача вычисления $f(x) = e^x$ при больших значениях x обусловлена плохо.

График относительной обусловленности задачи вычисления функции $f(x) = \sin x$ представлен ниже:



Наиболее хорошая обусловленность в промежутке $[-\pi/2, \pi/2]$

Не все функции имеют удобную относительную обусловленность, например $f(x) = \log x$:

$$\begin{aligned} \mu_{\log x} &= \tfrac{1}{|\log x|} \\ \nu_{\log x} &= \tfrac{1}{|x|} \end{aligned}$$

Несложно заметить, что в районе 1 число относительной обусловленности стремится к бесконечности.

В проектировании машинных алгоритмов, однако, вышеописанные соображения по поводу обусловленности не играют большой роли, потому что в компьютере нет бесконечно малых величин, а есть дискретная сетка чисел. Необходимо обеспечить верность значащих битов вычисляемой функции. Эта цель достигается средствами, порой не связанными (по крайней мере напрямую) с обусловленностью.

Погрешности машинной арифметики

Отметим несколько аспектов того, как организуются вычисления в машинной арифметики. Прежде всего, определим погрешность представления:

$$\delta x = \frac{\tilde{x} - x}{x} = \frac{\varepsilon_x}{x} \quad |\delta x| < \epsilon$$
$$\delta y = \frac{\tilde{y} - y}{y} = \frac{\varepsilon_y}{x} \quad |\delta y| < \epsilon$$

Предположим, необходимо посчитать $x^2 - y^2$. Вычислим погрешности операций, если сначала возводить x в квадрат, затем y в квадрат, а затем производить вычитание:

$x \otimes x = (x \times x)(1 + \delta_1), |\delta_1| \le \epsilon$

$y \otimes y = (y \times y)(1 + \delta_2), |\delta_2| \le \epsilon$

$(x \otimes x) \ominus (y \otimes y) = (x^2(1 + \delta_1) - y^2(1 + \delta_2))(1 + \delta_3), |\delta_3| \le \epsilon$

И теперь можно определить относительную погрешность представления всего выражения:

$$\delta((x \otimes x) \ominus (y \otimes y)) = \tfrac{(x^2(1+\delta_1) - y^2(1+\delta_2))(1+\delta_3) - (x^2 - y^2)}{x^2 - y^2}$$
$$\approx \tfrac{x^2\delta_1 - y^2\delta_2 + (x^2 - y^2)\delta_3}{x^2 - y^2} = \delta_3 + \delta_1 + \tfrac{y^2(\delta_1 - \delta_2)}{x^2 - y^2}$$

Можно сказать, что алгоритм неустойчивый, так как относительная погрешность зависит от значений x, y.

Теперь вычислим то же выражение, но использовав разложение $x^2 - y^2 = (x + y)(x - y)$:

$$\delta((x \oplus y) \otimes (x \ominus y)) = \frac{(x+y)(1+\delta_1)(x-y)(1+\delta_2)(1+\delta_3) - (x^2 - y^2)}{x^2 - y^2} \approx \delta_1 + \delta_2 + \delta_3$$

Алгоритм можно считать устойчивым.

Фактически была решена одна и та же задача, но разными методами. Поэтому стоит говорить не только об обусловленности задачи, но и об обусловленности методов: иногда задача может быть хорошо обусловлена, а метод может оказаться неустойчивым.

Обусловленность задачи нахождения корня функции

Дано: $f(x) = 0$. Найти: x.

Задача поменялась – теперь дана функция $f(x)$, а найти необходимо x, таким образом в определении числа обусловленности меняются местами числитель и знаменатель. Относительная обусловленность:

$$\mu = \lim_{|\Delta x| \to 0} \frac{|\Delta x|/|x|}{|\Delta f|/|f|} = \left| \frac{f}{f' x} \right|$$

В окрестности точки, где $f' = 0$, численный метод, использующий f для нахождения корня, скорее всего, не сойдется из-за плохой обусловленности задачи.

Теперь рассмотрим обусловленность задачи нахождения корня многочлена.

Дано: $P(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k x^k = 0$. Найти: x

Выпишем следующую частную производную, что позволит определить относительную обусловленность:

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}a_k} = \frac{1}{P'} \frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}a_k} \Rightarrow \lim_{|\Delta a_k| \to 0} \frac{|\Delta x|/|x|}{|\Delta a_k|/|a_k|} = \left| \frac{a_k x^{k-1}}{P'} \right|$$

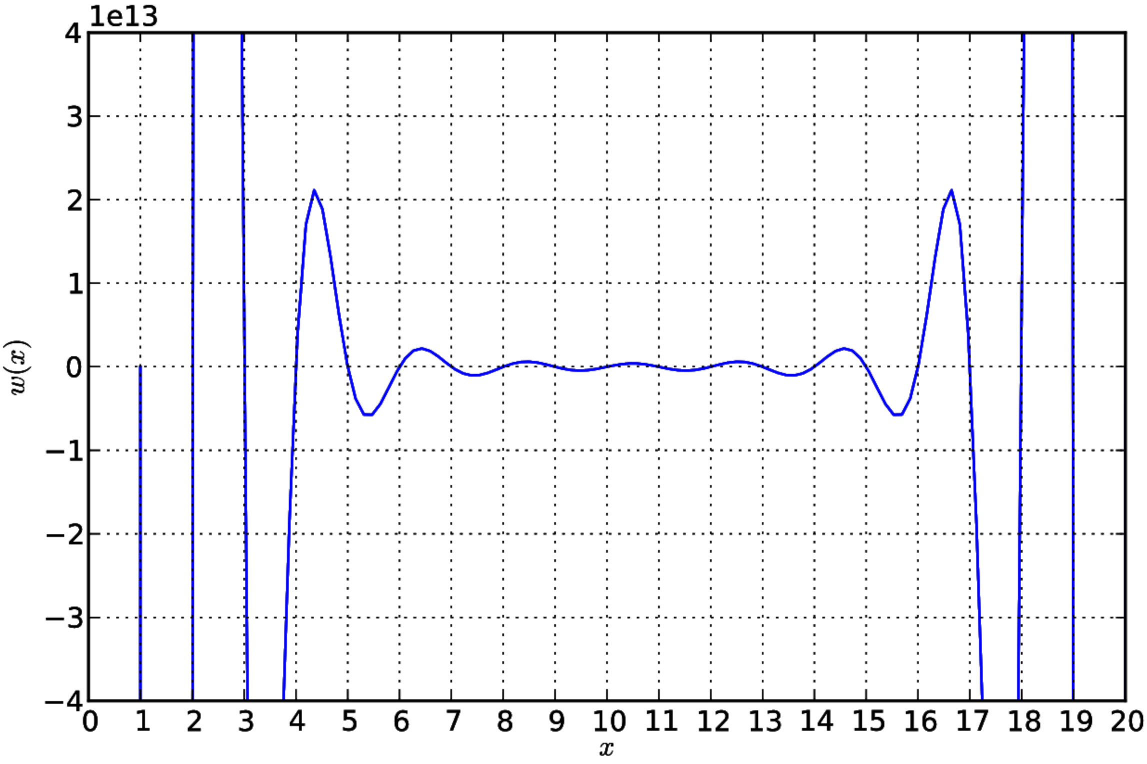
Можно показать, что чувствительность будет высокая в тех точках, где производная многочлена равна 0, то есть решение нестабильно для кратных корней.

Кратность корня – не единственная причина, по которой обусловленность задачи может быть плохой.

Известен многочлен Уилкинсона:

$$w(x) = \prod_{i=1}^{20} (x - i) = (x-1)(x-2)\cdots(x-20)$$

График многочлена:



Экспериментально было показано, что многочлен очень чувствителен к малейшим изменениям коэффициента — изменение коэффициента на маленькое значение может повлечь за собой изменение корней на большие значения.

Чувствительность к коэффициентам полиномов, получающихся в результате интерполяции, как правило, также высока.

Решение квадратного уравнения

Дано: $ax^2 + bx + c = 0$. Найти: x.

Решение общеизвестно:

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, D = b^2 - 4ac$$

Число относительной обусловленности системы при параметрах a, b, c (в каждом случае два остальных параметра считаются фиксированными):

$$\mu_a = \lim_{\Delta a \to 0} \frac{|\Delta x|/|x|}{|\Delta a|/|a|} = \left|\frac{xx'_a}{a}\right| = \frac{1}{2}\left|\frac{\pm b}{\sqrt{D}} - 1\right|$$
$$\mu_b = \left|\frac{xx'_a}{a}\right| = \left|\frac{b}{\sqrt{D}}\right|$$
$$\mu_c = \left|\frac{xx'_c}{c}\right| = \left|\frac{2ac}{\sqrt{D}(-\sqrt{D} \pm b)}\right|$$

При кратных корнях, то есть при $D = 0$, то получаем стремящееся к бесконечности число относительной обусловленности, что означает нестабильную работу данной формулы в случае кратных корней.

Если a, c очень малы, то в числителе для одного из корней получается практически $-b + b$. Получаем катастрофическое сокращение значащих битов, то есть большая часть битов обнулится, что приводит к большой неустойчивости данного численного метода. Чтобы избавиться от этого, несколько изменим формулы для вычисления корней:

Решение для $D \approx b^2$:

$$
\begin{aligned}
x_1 &= \frac{2c}{-b - \operatorname{sgn}(b)\sqrt{D}} \\
x_2 &= \frac{-b - \operatorname{sgn}(b)\sqrt{D}}{2a} = \frac{c}{ax_1}
\end{aligned}
$$

Таким образом, в знаменателе не вычитаются близкие величины, значащие биты не теряются. Ответ получается с меньшей ошибкой. Для второго корня можно использовать теорему Виета. Кроме того, даже если $a = 0$, один из корней также можно будет найти.

Обусловленность СЛАУ

Дано: $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$. Найти $\mathbf{x}$.

В данной задаче тема обусловленности наиболее актуальна.

Прежде чем приступать к методам, рассмотрим математическую обусловленность задачи:

$$
(A + \Delta A)(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) = \mathbf{b} + \Delta b
$$

Подробный вывод опустим и выпишем сразу результат:

$$
\Delta A \Delta b \approx 0 \Rightarrow \frac{||\Delta\mathbf{x}||}{||\mathbf{x}||} \le \mu\left(\frac{||\Delta A||}{||A||} + \frac{||\Delta b||}{||b||}\right), \mu = ||A|| \cdot ||A^{-1}|| \ge 1
$$

В любом случае, число обусловленности не может быть меньше 1. Числа обусловленности, исчисляемые тысячами, говорят о плохой обусловленности.

Если матрица A симметричная положительно определенная, то число обусловленности – отношение максимального и минимального собственного числа:

$$
\mu = \frac{\lambda_{\max} A}{\lambda_{\min} A}
$$

Пример

Рассмотрим пример того, как работает обусловленность в СЛАУ.

$$
\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.001 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}
$$

Как видно, $x = 2, y = 0$ подходят как математическое решение системы.

Внесем возмущение в вектор b:

$$
\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.001 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2.001 \end{pmatrix}
$$

Решение системы: $x = 1, y = 1$. Получается совершенно другое решение, несмотря на небольшое возмущение во входных данных. Данная система плохо обусловлена.

Докажем это, посчитав матрицу A^{-1} и вычислив число обусловленности:

$$
\begin{gathered}
\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.001 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} 1001 & -1000 \\ -1000 & 1000 \end{pmatrix} \\
||A||_2 \cdot ||A^{-1}||_2 \approx 4000
\end{gathered}
$$

Число обусловленности велико, что доказывает плохую обусловленность.

Пример №2

В этом примере будет матрица A, которая дает вполне приемлемое число обусловленности:

$$A = \begin{pmatrix} 0.001 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad A^{-1} = \begin{pmatrix} -1.001 & 1.001 \\ 1.001 & -0.001001 \end{pmatrix}, \quad \mu(A) = ||A||_2 \cdot ||A^-1||_2 \approx 3.46$$

Проведем решение СЛАУ методом Гаусса:

Первым и единственным шагом будут преобразования для приведения матрицы к верхней треугольной, с которой обусловленность уже будет плохой.

$$U = \begin{pmatrix} 0.001 & 1 \\ 0 & -999 \end{pmatrix}, \quad U^{-1} \approx \begin{pmatrix} 1000 & 1.001 \\ 0 & -0.001001 \end{pmatrix}, \quad \mu(U) = ||U||_2 \cdot ||U^-1||_2 \approx 1414$$

Таким образом, применение численного метода ведет к плохой обусловленности матрицы, которая изначально не давала плохую обусловленность.

Если воспользоваться методом LUP разложения, то такой проблемы возникать уже не будет (будет выбираться ведущий элемент в столбце, осуществляться перестановка, что исправит ситуацию):

$$PA = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0.001 & 1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0.999 \end{pmatrix}, \quad U^{-1} \approx \begin{pmatrix} 1 & -1.001 \\ 0 & 1.001 \end{pmatrix}, \quad \mu(U) = ||U||_2 \cdot ||U^-1||_2 \approx 3.46$$

Таким образом, выбор ведущего элемента влияет на обусловленность.

Это не является строгим доказательством того, что LUP разложение всегда лучше справляется с возрастанием обусловленности, но на практике чаще всего это так.

Итак, методы могут ухудшать обусловленность матрицы, не менять ее, но могут ли улучшать?

Предобуславливатели СЛАУ

Модифицируем систему, умножив слева и справа на некоторую (невырожденную) матрицу:

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \;\to\; M^{-1}A\mathbf{x} = M^{-1}\mathbf{b}, \quad \mu(M^{-1}A) < \mu(A)$$

Если обеспечится условие меньшего значения числа обусловленность, то цель достигнута. Вопрос только в том, что это за матрица M.

LUP-разложение также в некотором роде содержит предобуславливатель, в качестве него выступает матрица P:

$$PA = LU \;\Rightarrow\; PLU\mathbf{x} = P\mathbf{b}, \quad \mu(LU) \leqslant \mu(A)$$

Однако для нахождения P требуется прогонка метода, чего хотелось бы избежать.

Чисто формально единичная матрица является предобуславливателем, потому что неравенство чисел обусловленности нестрогое.

$$M = E: \; \mu(M^{-1}A) = \mu(A)$$

Также предобуславливателем может быть и сама матрица A, ведь тогда число обусловленности станет равно 1:

$$M = A: \; \mu(M^{-1}A) = 1$$

Но в таком случае необходимо считать матрицу A^{-1}. Вычисление обратной матрицы, во-первых, требует больших затрат, чем нахождение более простого предобуславливателя, и во-вторых, обессмысливает задачу, т. к. сама по себе обратная матрица будет содержать те самые численные ошибки, от которых мы хотели избавиться, вводя предобуславливатель.

Надо понимать, что поиск предобуславливателя – не совсем точная наука, и матрицы A бывают самые разные. Но вот некоторые из них, которые применяются в итеративных методах:

- Предобуславливатель Якоби: $A = L + D + U, M = D$
- Предобуславливатель Гаусса-Зейделя (GS): $M = L + D$
- Симметричный предобуславливатель Гаусса-Зейделя (SGS): $M = (L + D)D^{-1}(L + D)^T$
- Прочие: SSOR, ILU(0), ILU(n), AMG