Condicionamiento y Estabilidad

Alan Reyes-Figueroa

Métodos Numéricos II (Aula 05) 23.julio.2024

Condicionamiento

En abstracto, un problema numérico es una función $f : X \to Y$ entre espacios normados. ($X =$ espacio de datos, $Y =$ espacio de soluciones). f es generalmente no lineal, pero la mayoría de las veces es continua.
Nos interesa el comportamiento de un problema f en un punto de datos particular $\mathbf{x} \in X$
La combinación de un problema f con datos prescritos $\mathbf{x}$ es llamada una **instancia** del problema.

Definición

Un problema (instancia) ***bien condicionado*** *es un problema con la propiedad de que toda pequeña perturbación de* $\mathbf{x}$ *conduce sólo a pequeños cambios en* $f(\mathbf{x})$*. Un problema* ***mal condicionado*** *es un problema con la propiedad de que una pequeña perturbación de* $\mathbf{x}$ *conduce a un gran cambio en* $f(\mathbf{x})$*.*

Definición

*Sea $\delta\mathbf{x}$ una pequeña perturbación de $\mathbf{x}$ y sea $\delta f = f(\mathbf{x}+\delta\mathbf{x}) - f(\mathbf{x})$. El **número de condición absoluta** $\widehat{\kappa} = \widehat{\kappa}(\mathbf{x})$ del problema f en $\mathbf{x}$ se define como*

$$\widehat{\kappa}(\mathbf{x}) = \lim_{\delta\to 0} \sup_{||\delta\mathbf{x}||<\delta} \frac{||\delta f||}{||\delta\mathbf{x}||}. \tag{1}$$

Generalmente escribiremos (1) como

$$\widehat{\kappa}(\mathbf{x}) = \sup_{\delta\mathbf{x}} \frac{||\delta f||}{||\delta\mathbf{x}||}. \tag{2}$$

en el entendido de que $\delta\mathbf{x}$ y δf son infinitesimales.

Si f es diferenciable, podemos evaluar el número de condición por medio de la derivada de f. La definición de la derivada nos da, en primer orden, $\delta f \approx Df(\mathbf{x})\,\delta\mathbf{x}$, (igualdad en el límite $||\delta\mathbf{x}|| \to 0$). Así, el número de condición absoluta se convierte en $\widehat{\kappa}(\mathbf{x}) = ||Df(\mathbf{x})||$.

Definición

*Sea $\delta\mathbf{x}$ una pequeña perturbación de $\mathbf{x}$ y sea $\delta f = f(\mathbf{x}+\delta\mathbf{x}) - f(\mathbf{x})$. El **número de condición relativa** $\kappa = \kappa(\mathbf{x})$ del problema f en $\mathbf{x}$ se define como*

$$\kappa(\mathbf{x}) = \lim_{\delta\to 0} \sup_{||\delta\mathbf{x}||<\delta} \left(\frac{||\delta f||}{||f(\mathbf{x})||} \Big/ \frac{||\delta\mathbf{x}||}{||\mathbf{x}||} \right) = \lim_{\delta\to 0} \sup_{||\delta\mathbf{x}||<\delta} \frac{||\delta f||\,||\mathbf{x}||}{||f(\mathbf{x})||\,||\delta\mathbf{x}||}. \tag{3}$$

o asumiendo nuevamente que $\delta\mathbf{x}$ y δf son infinitesimales

$$\kappa(\mathbf{x}) = \sup_{\delta\mathbf{x}} \frac{||\delta f||\,||\mathbf{x}||}{||f(\mathbf{x})||\,||\delta\mathbf{x}||}. \tag{4}$$

Si f es diferenciable, esta cantidad se expresa como $\kappa(\mathbf{x}) = \dfrac{||Df(\mathbf{x})||}{||f(\mathbf{x})||/||\mathbf{x}||}$.

Con estas definiciones, ya podemos decir que un problema es bien condicionado si κ es pequeño (*e.g.*, $1, 10, 10^2$), o mal condicionado si κ es grande (*e.g.*, $10^6, 10^{16}$).

Condicionamiento

Ejemplo: Considere el problema de calcular $\sqrt{x}$, para $x > 0$. El jacobiano de $f : x \to \sqrt{x}$ es la derivada $Df(x) = f'(x) = \frac{1}{2\sqrt{x}}$, por lo que tenemos

$$\kappa(x) = \frac{||Df(x)||}{||f(x)||/||x||} = \frac{1/2\sqrt{x}}{\sqrt{x}/x} = \frac{1}{2},$$

de modo que este es un problema bien condicionado.

Ejemplo: Considere ahora el problema de obtener el escalar $f(\mathbf{x}) = x_1 - x_2$ del vector $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^T \in \mathbb{R}^2$. Para simplificar, usamos la norma ∞ en el espacio de datos $\mathbb{R}^2$. El jacobiano de f es

$$Df(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} 1 & -1 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad ||Df(\mathbf{x})||_\infty = 2.$$

Entonces, el número de condición es

$$\kappa(\mathbf{x}) = \frac{||Df(\mathbf{x})||}{||f(x)||/||x||} = \frac{2 \ \max\{|x_1|, |x_2|\}}{|x_1 - x_2|}.$$

Esta cantidad es grande si $|x_1 - x_2| \approx 0 \ \Rightarrow$, el problema mal condicionado si $x_1 \approx x_2$.

Condicionamiento

Otros problemas mal condicionados:

- Calcular las raíces de un polinomio.
- Resolver un sistema de ecuaciones lineales.
- Hallar los autovalores de una matriz no simétrica.

Ejemplo:
El problema de calcular los autovalores de una matriz no simétrica, es a menudo mal acondicionado. Consideremos las matrices

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1000 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{y} \qquad A' = \begin{pmatrix} 1 & 1000 \\ 0.001 & 1 \end{pmatrix}.$$

Los autovalores de A son $\lambda = 1$ con multiplicidad 2. Los autovalores de A' son $\lambda_1 = 0$ y $\lambda_2 = 2$.

Condicionamiento

Se puede mostrar que si A es una matriz simétrica (o una matriz normal), entonces sus autovalores están bien condicionados.

Por otro lado, se puede demostrar que si λ y $\lambda + \delta\lambda$ son los correspondientes autovalores de A y $A + \delta A$, entonces $|\delta\lambda| < ||\delta A||_2$, con igualdad si δA es un múltiplo de la matriz identidad (ejercicio 26.3).
Por lo tanto, el número de condición absoluta del problema de valores propios simétricos es $\widehat{\kappa} = 1$, si se miden las perturbaciones en la norma 2, y el número de condición relativa es $\kappa = ||A||_2/|\lambda|$.

Condicionamiento

Condición del producto matriz-vector:
Sea $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ y considere el problema de calcular $A\mathbf{x}$ para un vector $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Vamos a determinar un número de condición correspondiente a perturbaciones de $\mathbf{x}$ pero no de A. Sea $||\cdot||$ una norma vectorial arbitraria, y su respectiva norma matricial inducida. Trabajando directamente con la definición de κ, entonces

$$\kappa(\mathbf{x}) = \sup_{\delta\mathbf{x}} \left(\frac{||A(\mathbf{x}+\delta\mathbf{x}) - A\mathbf{x}||}{||A\mathbf{x}||} \Big/ \frac{||\delta\mathbf{x}||}{||\mathbf{x}||} \right) = \sup_{\delta\mathbf{x}} \left(\frac{||A(\delta\mathbf{x})||}{||\delta\mathbf{x}||} \Big/ \frac{||A\mathbf{x}||}{||\mathbf{x}||} \right).$$

Esto es

$$\kappa(\mathbf{x}) = ||A|| \frac{||\mathbf{x}||}{||A\mathbf{x}||}. \tag{5}$$

Suponga en el cálculo anterior que A es una matriz cuadrada y no singular. Entonces podemos usar el hecho de que $||\mathbf{x}||/||A\mathbf{x}|| \leq ||A^{-1}||$ en (5) para hallar una cota para κ:

$$\kappa(\mathbf{x}) \leq ||A||\,||A^{-1}||. \tag{6}$$

o escribir

$$\kappa(\mathbf{x}) = \alpha\, ||A||\, ||A^{-1}||, \quad \text{con } \alpha = \frac{||\mathbf{x}||}{||A\mathbf{x}||} \Big/ ||A^{-1}||. \tag{7}$$

Para ciertas elecciones de **x**, se tiene $\alpha = 1$ y, en consecuencia, $\kappa = ||A||\,||A^{-1}||$. Por ejemplo, si $||\cdot|| = ||\cdot||_2$, esto ocurrirá siempre que **x** sea múltiplo del mínimo vector singular derecho de A.
De hecho, A no tiene por qué ser cuadrada. Si $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ con $m > n$, es de rango completo, las ecuaciones (6) y (7) se mantienen con A^{-1} reemplazada por la pseudoinversa A^{+}.

¿Qué pasa con el problema inverso: dada A, calcular $A^{-1}\mathbf{b}$ a partir de la entrada $\mathbf{b}$? Es idéntico al problema que acabamos de considerar, excepto que A se reemplaza por A^{-1}.

Resumimos esto en el siguiente resultado.

Condicionamiento

Teorema

Sea $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ no singular y considere la ecuación $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$. El problema de calcular **b***, dado* **x***, tiene número de condición*

$$\kappa(\mathbf{x}) = ||A|| \frac{||\mathbf{x}||}{||\mathbf{b}||} \leq ||A||\,||A^{-1}||, \tag{8}$$

con respecto a las perturbaciones de **x***.*
El problema de calcular **x***, dado* **b***, tiene número de condición*

$$\kappa(\mathbf{b}) = ||A^{-1}|| \frac{||\mathbf{b}||}{||\mathbf{x}||} \leq ||A||\,||A^{-1}||, \tag{9}$$

con respecto a las perturbaciones de **b***.*
Si $||\cdot|| = ||\cdot||_2$, entonces la igualdad se mantiene en (8) si **x** *es un múltiplo del mínimo vector singular derecho de A, y la igualdad se cumple en (9) si* **b** *es un múltiplo del mayor vector singular izquierdo de A.*

Definición

*El producto $\kappa(A) = ||A||\,||A^{-1}||$ se llama el **número de condición** de la matriz A.*
*Cuando $\kappa(A)$ es pequeño, se dice que A está **bien condicionada**; si $\kappa(A)$ es grande, decimos que A está **mal condicionada**.*
En el caso en que A es singular, escribimos $\kappa(A) = \infty$.

En el caso de la 2-norma $||\cdot|| = ||\cdot||_2$, entonces $||A|| = \sigma_1$ y $||A^{-1}|| = \frac{1}{\sigma_m}$. Entonces

$$\kappa(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_m}. \tag{10}$$

en la 2-norma. La relación σ_1/σ_m puede interpretarse como la excentricidad de la hiperelipse que es la imagen de la esfera unitaria de $S^1 \subset \mathbb{R}^n$ bajo A.

Número de Condición

Para una matriz rectangular $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m > n$, de rango completo, el número de condición se define en términos de la pseudoinversa: $\kappa(A) = ||A||\,||A^+||$. Como A^+ está motivado por problemas de mínimos cuadrados, esta definición es más útil en el caso $||\cdot|| = ||\cdot||_2$, donde tenemos

$$\kappa(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_n}. \tag{11}$$

Pregunta: En el teorema anterior, fijamos A y perturbamos los vectores $\mathbf{x}$ o $\mathbf{b}$. ¿Qué ocurre si ahora perturbamos A?

Dejamos fijo $\mathbf{b}$ y consideramos el comportamiento del problema $A \to \mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b}$, cuando A se perturba por un infinitesimal δA. Entonces $\mathbf{x}$ debe cambiar por un infinitesimal $\delta\mathbf{x}$, donde

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

Usando la igualdad $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ y eliminando el término doblemente infinitesimal $(\delta A)(\delta\mathbf{x})$, obtenemos $(\delta A)\mathbf{x} + A(\delta\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, es decir, $\delta\mathbf{x} = -A^{-1}(\delta A)\mathbf{x}$.

Número de Condición

Esta ecuación implica que $||\delta\mathbf{x}|| \leq ||A^{-1}||\,||\delta A||\,||\mathbf{x}||$, o equivalentemente

$$\frac{||\delta\mathbf{x}||}{||\mathbf{x}||} \Big/ \frac{||\delta A||}{||A||} \leq ||A^{-1}||\,||A|| = \kappa(A).$$

La igualdad en esta cota se cumple siempre que δA sea tal que

$$||A^{-1}(\delta A)\mathbf{x}|| = ||A^{-1}||\,||\delta A||\,||\mathbf{x}||,$$

y se puede demostrar mediante el uso de normas duales (ejercicio 3.6) que para cualquier A y cualquier norma $||\cdot||$, tales perturbaciones δA existen. Esto nos lleva al siguiente resultado.

Teorema

Sea $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ fijo y considere el problema de calcular $\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b}$, donde A es cuadrada y no singular. El número de condición de este problema con respecto a las perturbaciones en A es

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