

Calcul Numeric

Cursul 11

2017

Anca Ignat

Problema în sensul celor mai mici pătrate

$$A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad b \in \mathbb{R}^m, \quad Ax = b, \quad x \in \mathbb{R}^n \quad (1)$$

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2$$

$$\vdots$$

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{in}x_n = b_i$$

$$\vdots$$

$$a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m$$

Sistemul are soluții clasice dacă:

$$\text{rang } A = \text{rang } [A \mid b]$$

- $m < n$ - o infinitate de soluții
- $m \geq n$
 - dacă $\text{rang } A = \text{rang } [A \mid b]$ soluții clasice
 - dacă $\text{rang } A \neq \text{rang } [A \mid b]$ soluții în sensul celor mai mici pătrate

Vectorul reziduu:

$$r(x) = b - Ax \in \mathbb{R}^m$$

Vectorul $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ se numește *soluție în sensul celor mai mici pătrate* pentru sistemul (1) dacă este soluția următoarei probleme de optimizare:

$$\min\{\|\mathbf{r}(\mathbf{x})\|_2^2 = \|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}\|_2^2; \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\} \quad (LSP)$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{3 \times 2}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad m = 3, n = 2$$

$$\text{rang } \mathbf{A} = 2 \neq \text{rang } [\mathbf{A} \mid \mathbf{b}] = 3$$

Sistemul:

$$\begin{aligned}x_1 + 2x_2 &= 0 \\ 2x_1 + x_2 &= 3 \\ -x_1 + x_2 &= 1\end{aligned}\tag{2}$$

nu are soluție clasică (nu există x_1, x_2 care să satisfacă toate cele 3 ecuații simultan). Vectorul reziduu are forma:

$$r(x) = b - Ax = \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x_1 - 2x_2 \\ 3 - 2x_1 - x_2 \\ 1 + x_1 - x_2 \end{pmatrix}$$

Soluția în sensul celor mai mici pătrate a acestui sistem este definită ca soluția problemei de optimizare:

$$\min\{(-x_1 - 2x_2)^2 + (3 - 2x_1 - x_2)^2 + (1 + x_1 - x_2)^2; x_1, x_2 \in \mathbb{R}\}$$

$$\min\{10 - 10x_1 - 8x_2 + 6x_1x_2 + 6x_1^2 + 6x_2^2; x_1, x_2 \in \mathbb{R}\}$$

Această problemă de minimizare are soluția:

$$x_1 = \frac{2}{3}, \quad x_2 = \frac{1}{3}, \quad \|r(x)\|_2^2 = \frac{16}{3}$$

și este soluția în sensul celor mai mici pătrate a sistemului (2).

$$\text{range}(\mathbf{A}) = \{ y \in \mathbb{R}^m; y = a_1 A^1 + a_2 A^2 + \cdots + a_n A^n, a_i \in \mathbb{R}, i = 1, n \}$$

$A = \begin{bmatrix} A^1 & A^2 & \cdots & A^n \end{bmatrix}$, $A^i \in \mathbb{R}^m$ sunt coloanele matricii A

Teoremă

Fie $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ($m \geq n$), $b \in \mathbb{R}^m$. Un vector $x \in \mathbb{R}^n$ minimizează norma euclidiană a vectorului reziduu $\|r(x)\|_2 = \|b - Ax\|_2$, rezolvând problema (**LSP**), dacă și numai dacă:

$$r(x) \perp \text{range}(A) \quad \Leftrightarrow \quad A^T r(x) = 0$$

sau echivalent

$$A^T A x = A^T b \quad (3)$$

Sistemul (3) poartă numele de sistemul de *ecuații normale* și este un sistem pătratic de dimensiune n , matricea sistemului $A^T A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ este simetrică. Sistemul de ecuații normale (3) este nesingular dacă și numai dacă $\text{rang } A = n$, în acest caz soluția x a sistemului (3) este unică.

$$\det A^T A \neq 0 \Leftrightarrow \text{rang } A = n$$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad A^T A = \begin{bmatrix} 6 & 3 \\ 3 & 6 \end{bmatrix}, \quad A^T b = \begin{pmatrix} 5 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$\begin{array}{l} 6x_1 + 3x_2 = 5 \\ 3x_1 + 6x_2 = 4 \end{array} \Rightarrow x_1 = \frac{2}{3}, x_2 = \frac{1}{3}$$

Pseudo-inversa matricii A

Presupunem că A are **rang** $A = n$. Atunci pseudo-inversa poate fi definită ca:

$$A^+ = \left(A^T A \right)^{-1} A^T \in \mathbb{R}^{n \times m} \quad (A^+ = A^I \quad ?)$$

$$A^+ = \begin{bmatrix} 6 & 3 \\ 3 & 6 \end{bmatrix}^{-1} * \begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 2 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Rezolvarea sistemului de ecuații normale

1) Folosind factorizarea Cholesky (descompunere LU) pentru matrici simetrice:

$$A^T A = LL^T, \quad L \in \mathbb{R}^{n \times n} \text{ matrice inferior triunghiulară}$$

- Se calculează matricea $A^T A$ și vectorul $A^T b$;
- Se calculează factorizarea Cholesky a matricii $A^T A = LL^T$;
- Se rezolvă sistemul inferior triunghiular $Ly = A^T b$ pentru y ;
- Se rezolvă sistemul superior triunghiular $L^T x = y$ pentru x ;

2) Se calculează descompunerea QR (cu algoritmul lui Householder adaptat) pentru matricea A :

$$A = QR, \quad Q \in \mathbb{R}^{m \times m} \text{ matrice ortogonală, } R \in \mathbb{R}^{m \times n},$$

$$R = \begin{bmatrix} \bar{R} \in \mathbb{R}^{n \times n} \\ \mathbf{0}_{(m-n) \times n} \end{bmatrix}, \quad \bar{R} - \text{matrice superior triunghiulară}$$

- Se calculează factorizarea QR modificată a matricii A ;
- Se calculează vectorul $Q^T b$;
- Se rezolvă sistemul sup. triunghiular $\bar{R}x = (Q^T b)_{i=1,n}$;

3) Se folosește desc. după valori singulare a matricii A

$$A = U\Sigma V^T, \quad \Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad U \in \mathbb{R}^{m \times m}, \quad V \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

- Se calculează SVD pentru matricea $A=U\Sigma V^T$;
- Se calculează vectorul $U^T b$;
- Se rezolvă sistemul diagonal $\Sigma w = U^T b$ pentru w ;
- Soluția este $x=Vw$;

1), 2) sau 3) ? \rightarrow se recomandă 2)

Rezolvarea ecuațiilor neliniare

Fie $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ o funcție continuă pe intervalul $[a, b]$ astfel ca $f(a)f(b) < 0$. În aceste condiții, există $x^* \in (a, b)$ astfel ca $f(x^*) = 0$. În cele ce urmează ne propunem să aproximăm soluția x^* a ecuației neliniare $f(x) = 0$.

Metoda biseției (a înjumătățirii intervalului)

Pp. $f(a)f(b) < 0!!!$ Pentru a aproxima soluția x^* căutată, vom construi un șir de intervale $\{[a_k, b_k]; k \geq 0\}$ ce satsifac:

$$x^* \in [a_k, b_k]$$

$$[a_{k+1}, b_{k+1}] \subset [a_k, b_k]$$

$$b_{k+1} - a_{k+1} = \frac{b_k - a_k}{2}$$

Pentru primul interval vom considera: $a_0 = a$, $b_0 = b$, $k = 0$.

Considerăm punctul c de mijloc al intervalului $[a_k, b_k]$:

$$c = \frac{a_k + b_k}{2}$$

Avem următoarele 3 variante:

1. $f(c)=0$ - soluția căutată este $x^*=c$, algoritmul se oprește;
2. $f(a_k)f(c) < 0 \rightarrow$ soluția se găsește în intervalul (a_k, c) ,
continuăm procedeul cu intervalul $[a_{k+1} = a_k, b_{k+1} = c]$;
3. $f(b_k)f(c) < 0 \rightarrow$ soluția se găsește în intervalul $x^* \in (c, b_k)$
procedeul continuă cu intervalul $[a_{k+1} = c, b_{k+1} = b_k]$.

Dat $\varepsilon > 0$ există un interval $[a_{\bar{k}}, b_{\bar{k}}]$ astfel ca $x^* \in (a_{\bar{k}}, b_{\bar{k}})$ și

$b_{\bar{k}} - a_{\bar{k}} < \varepsilon$ ($\bar{k} > \log_2 \frac{b-a}{\varepsilon}$). Pentru ε suficient de mic atât $a_{\bar{k}}$

cât și $b_{\bar{k}}$ pot fi considerate aproximații ale soluției x^* ($a_{\bar{k}} \approx x^*$ prin lipsă iar $b_{\bar{k}} \approx x^*$ prin adaos).

Metoda tangentei (Newton-Raphson)

Vom presupune că funcția $f \in C^1[a, b]$ este derivabilă pe $[a, b]$ cu derivata continuă în acest interval și satisface relația $f(a)f(b) < 0$. Pentru a aproxima soluția x^* a ecuației $f(x)=0$ vom construi un șir $\{x_k\} \subseteq \mathbb{R}$ care să convergă la x^* , $x_k \rightarrow x^*$, pentru $k \rightarrow \infty$. Primul element din șir, x_0 , considerăm că este dat. Următorul element din șir se construiește ca fiind punctul de intersecție al tangentei la graficul funcției f în punctul $(x_0, f(x_0))$ cu axa absciselor. Procedeu se repetă cu x_1 pentru a-l obține pe x_2 , ș.a.m.d.

$x_1 = \mathbf{Ox} \cap \text{tangentă la graficul funcției } f \text{ în punctul } (x_0, f(x_0))$

$x_2 = \mathbf{Ox} \cap \text{tangentă la graficul funcției } f \text{ în punctul } (x_1, f(x_1))$

\vdots

$x_{k+1} = \mathbf{Ox} \cap \text{tangentă la graficul fct. } f \text{ în pt. } (x_k, f(x_k)), k = 0, 1, 2, \dots$

Ecuția tangentei la graficul funcției f într-un punct $(a, f(a))$ este următoarea (pentru o funcție derivabilă):

$$y = f(a) + f'(a)(x - a)$$

Pentru a calcula x_{k+1} din x_k vom considera ecuația tangentei:

$$y = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k)$$

unde luăm $y = 0$. Avem:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad x_0 \text{ dat}$$

Formula de mai sus poate fi folosită doar dacă la fiecare pas $f'(x_k) \neq 0$. Dacă la un pas avem $f'(x_k) = 0$ putem calcula câteva iterații x_k ($k \geq \bar{k}$) folosind $f'(x_{\bar{k}-1})$.

Teoremă de convergență

Fie $f \in C^2[a, b]$, cu $f(a)f(b) < 0$, $f'(x) \neq 0$ și $f''(x) \neq 0$

$\forall x \in [a, b]$. Dacă alegem

$$x_0 = \begin{cases} a & \text{pentru } f(a)f''(a) > 0 \\ b & \text{pentru } f(b)f''(b) > 0 \end{cases}$$

atunci șirul $\{x_k; k \geq 0\}$ construit cu metoda tangentei este monoton, mărginit și convergent la unica soluție x^* a ecuației $f(x)=0$. Ordinul de convergență este mai mare decât 2.

Metoda falsei poziții (a coardei)

Presupunem că funcția f este continuă, $f \in C[a, b]$ și satisface relația $f(a)f(b) < 0$. Vom construi un șir $\{x_k\} \subseteq \mathbb{R}$ care să convergă la soluția căutată x^* , $x_k \rightarrow x^*$, pentru $k \rightarrow \infty$. Considerăm date primul element din șir, x_0 și un alt punct \tilde{x} . Procedul de construire a șirului este următorul:

$$x_1 = \mathbf{Ox} \cap \text{dreapta ce unește punctele } (\tilde{x}, f(\tilde{x})), (x_0, f(x_0))$$

$$x_2 = \mathbf{Ox} \cap \text{dreapta ce unește punctele } (\tilde{x}, f(\tilde{x})), (x_1, f(x_1))$$

\vdots

$$x_{k+1} = \mathbf{Ox} \cap \text{dreapta ce unește pt. } (\tilde{x}, f(\tilde{x})), (x_k, f(x_k)), k = 0, 1, 2, \dots$$

Ecuatia dreptei ce trece prin punctele $(a, f(a))$ cu $(b, f(b))$ este:

$$\frac{y - f(a)}{f(a) - f(b)} = \frac{x - a}{a - b}.$$

Pentru a-l obține pe x_{k+1} din x_k avem:

$$\frac{y - f(x_k)}{f(x_k) - f(\tilde{x})} = \frac{x - x_k}{x_k - \tilde{x}} \quad \text{cu} \quad y = 0$$

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)(x_k - \tilde{x})}{f(x_k) - f(\tilde{x})} = \frac{\tilde{x}f(x_k) - x_k f(\tilde{x})}{f(x_k) - f(\tilde{x})},$$

$$k = 0, 1, 2, \dots, \quad x_0 \text{ dat}$$

Teoremă de convergență

Fie $f \in C^2[a, b]$, cu $f(a)f(b) < 0$, $f'(x) \neq 0$ și $f''(x) \neq 0$ $\forall x \in [a, b]$. Dacă alegem

$$\begin{cases} \tilde{x} = a \text{ și } x_0 = b & \text{pentru } f(a)f''(a) > 0 \\ \tilde{x} = b \text{ și } x_0 = a & \text{pentru } f(b)f''(b) > 0 \end{cases}$$

atunci șirul $\{x_k; k \geq 0\}$ construit cu metoda falsei poziții este monoton, mărginit deci convergent la unica soluție x^* a ecuației $f(x)=0$.

Metoda secantei

Presupunem că funcția f este continuă, $f \in C[a, b]$ și satisface relația $f(a)f(b) < 0$. Vom construi un șir $\{x_k\} \subseteq \mathbb{R}$ care să convergă la soluția căutată x^* , $x_k \rightarrow x^*$, pentru $k \rightarrow \infty$.

Considerăm date primele două elemente din șir, x_0 și x_1 .

Procedeul de construire a șirului este următorul:

$$x_2 = \mathbf{Ox} \cap \text{dreapta ce unește punctele } (x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)),$$

$$x_3 = \mathbf{Ox} \cap \text{dreapta ce unește punctele } (x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2)),$$

\vdots

$$x_{k+1} = \mathbf{Ox} \cap \text{dreapta ce unește pct. } (x_{k-1}, f(x_{k-1})), (x_k, f(x_k)) , \\ k = 1, 2, \dots$$

Obținem elementul x_{k+1} din x_k și x_{k-1} astfel:

$$\frac{y - f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})} = \frac{x - x_k}{x_k - x_{k-1}} \quad \text{cu} \quad y = 0$$

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)(x_k - x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})} =$$

$$= \frac{x_{k-1}f(x_k) - x_k f(x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})},$$

$k = 1, 2, \dots$, x_0, x_1 dați

Teoremă de convergență

Fie x^* o soluție a ecuației $f(x)=0$. Pp. că $f \in C^2[x^* - r, x^* + r]$, $f'(x) \neq 0$ și $f''(x) \neq 0 \ \forall x \in [x^* - r, x^* + r]$. Atunci există $0 < r_0 \leq r$ pentru care, dacă $x_0, x_1 \in [x^* - r_0, x^* + r_0]$ atunci $x_k \in [x^* - r_0, x^* + r_0], \forall k \geq 2$ și $x_k \rightarrow x^*$, pentru $k \rightarrow \infty$. Ordinul de convergență este $q = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \approx 1.61803$.

Metoda lui Laguerre

Fie polinomul:

$$p(x) = a_0(x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n) , \quad a_0 \neq 0$$

Metoda lui Laguerre propune construirea unui șir de numere care să convergă la una din rădăcinile polinomului p .

Considerăm derivata polinomului p :

$$p'(x) = p(x) \left[\frac{1}{x - x_1} + \frac{1}{x - x_2} + \cdots + \frac{1}{x - x_n} \right]$$

Avem:

$$\ln |p(x)| = \ln |a_0| + \ln |x - x_1| + \ln |x - x_2| + \cdots + \ln |x - x_n|$$

$$\frac{d}{dx} \ln |p(x)| = \frac{1}{x - x_1} + \frac{1}{x - x_2} + \cdots + \frac{1}{x - x_n} = \frac{p'(x)}{p(x)} = G(x)$$

$$\begin{aligned} -\frac{d^2}{dx^2} \ln |p(x)| &= \frac{1}{(x - x_1)^2} + \frac{1}{(x - x_2)^2} + \cdots + \frac{1}{(x - x_n)^2} = \\ &= \frac{[p'(x)]^2 - p(x)p''(x)}{[p(x)]^2} = H(x) \end{aligned}$$

Fie x_1 rădăcina pe care vrem s-o aproximăm și y_k valoarea aproximativă curentă. Notăm cu $a = y_k - x_1$ și facem presupunerea că y_k se află la aceeași distanță de toate celelalte rădăcini, adică:

$$y_k - x_i = b \quad \forall i = 2, \dots, n.$$

Prin urmare avem:

$$G(y_k) = \frac{p'(y_k)}{p(y_k)} = \frac{1}{a} + \frac{n-1}{b}$$

$$H(y_k) = \frac{[p'(y_k)]^2 - p(y_k)p''(y_k)}{[p(y_k)]^2} = \frac{1}{a^2} + \frac{n-1}{b^2}$$

Rezolvăm acest sistem în raport cu \mathbf{a} și obținem:

$$\mathbf{a} = \frac{n}{\max \left[G(y_k) \pm \sqrt{(n-1)(nH(y_k) - G^2(y_k))} \right]}$$

Semnul la numitor este ales astfel ca expresia să aibă magnitudine maximă. Dacă ținem cont de expresiile pentru \mathbf{G} și \mathbf{H} obținem pentru \mathbf{a} următoarea formulă:

$$\mathbf{a} = \frac{n p(y_k)}{\max \left[p'(y_k) \pm \sqrt{(n-1)^2 [p'(y_k)]^2 - n(n-1)p(y_k)p''(y_k)} \right]}$$

Următorul element din șir va fi:

$$y_{k+1} = y_k - a = y_k - \frac{n}{\max \left[G(y_k) \pm \sqrt{(n-1)(nH(y_k) - G^2(y_k))} \right]}$$

$$y_{k+1} = y_k - \frac{n p(y_k)}{\max \left[p'(y_k) \pm \sqrt{(n-1)^2 [p'(y_k)]^2 - n(n-1)p(y_k)p''(y_k)} \right]}$$

Procedeul se oprește când a devine suficient de mic. Metoda lui Laguerre se poate apl. și ptr. aprox. răd. complexe și de asemenea pentru polinoame cu coeficienți complecși. Pentru rădăcini simple metoda lui Laguerre are ordinul de convergență 3.

Sisteme de ecuații neliniare

Consideră sistemul neliniar:

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases} \Leftrightarrow F(X) = \mathbf{0}, \quad F = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

Fie matricea jacobiană asociată funcției F (presupunem că funcțiile f_i sunt diferențiabile):

$$\nabla F(X) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & & & \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix} (x_1, x_2, \dots, x_n)$$

Pentru a găsi soluția X^* a sistemului de ecuații neliniare $F(X)=0$ se construiește un șir de vectori $X^{(k)} \in \mathbb{R}^n$ astfel:

$X^{(0)}$ – dat

$$X^{(k+1)} = X^{(k)} - [\nabla F(X^{(k)})]^{-1} F(X^{(k)}) = X^{(k)} + \Delta^{(k)},$$

$$\Delta^{(k)} = -[\nabla F(X^{(k)})]^{-1} F(X^{(k)}) \in \mathbb{R}^n, \quad k = 0, 1, \dots$$

Vectorul de corecție $\Delta^{(k)}$ poate fi calculat și ca soluție a sistemului liniar:

$$\nabla F(X^{(k)}) \Delta = -F(X^{(k)})$$

unde matricea sistemului este matricea jacobiană calculată în punctul $X^{(k)}$ iar vectorul termenilor liberi este $(-F(X^{(k)}))$.

Metoda descrisă mai sus poartă numele de metoda Newton. Pentru $n=1$ metoda Newton este chiar metoda tangentei descrisă anterior.