

Calcul Numeric

Cursul 4

2017

Anca Ignat

Metode numerice de rezolvarea sistemelor liniare

Fie matricea nesingulară $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ și $b \in \mathbb{R}^n$. Rezolvarea sistemului de ecuații liniare $Ax=b$ se poate face folosind *regula lui Cramer*:

$$x_i = \frac{\det A_i(b)}{\det A}, i = 1, \dots, n,$$

în care $A_i(b)$ se obține din matricea A prin înlocuirea coloanei i cu vectorul b .

Algoritmul dat de regula lui Cramer este foarte costisitor din punct de vedere al resurselor și instabil numeric.

Din aceste motive s-au căutat alte metode de aproximare a soluției \mathbf{x} . Unul din cele mai folosiți algoritmi este **algoritmul de eliminare Gauss** :

$A\mathbf{x}=\mathbf{b} \iff \tilde{A}\mathbf{x}=\tilde{\mathbf{b}}$ cu \tilde{A} matrice superior triunghiulară

$$\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b} = \tilde{A}^{-1}\tilde{\mathbf{b}} \quad (\text{notăm } A\mathbf{x} = \mathbf{b} \sim \tilde{A}\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{b}})$$

n = 11

Eliminarea Gauss

11-Mar-17 8:02:07 PM

Timp in milisecunde (eliminare Gauss) 1

11-Mar-17 8:02:07 PM

Eroarea $|Ax-b| = 1.6104453732771E-14$

Eroarea $|x-x_{\text{exact}}| = 1.48664318035423E-14$

Solutia exacta : 1,2, ...

Regula lui Cramer

11-Mar-17 8:02:07 PM

Timp in milisecunde (Cramer) 59162

11-Mar-17 8:03:06 PM

Eroarea $|Ax-b| = 2.05058121423138E-10$

Eroarea $|x-x_{\text{exact}}| = 7.27331901311298E-11$

```

n = 12

Eliminarea Gauss
11-Mar-17 7:07:09 PM
Timp in milisecunde (eliminare Gauss) 1
11-Mar-17 7:07:09 PM

Eroarea  $|Ax-b| = 2.4490422760762E-14$ 

Eroarea  $|x-x_{exact}| = 6.66023126225285E-14$ 

Solutia exacta : 1,2, ...

Regula lui Cramer
11-Mar-17 7:07:09 PM
Timp in milisecunde (Cramer) 1182896
11-Mar-17 7:26:52 PM

Eroarea  $|Ax-b| = 5.77670896101775E-10$ 

Eroarea  $|x-x_{exact}| = 1.77038320740296E-10$ 

```

n = 5000

Eliminarea Gauss

11-Mar-17 7:41:53 PM

Timp in milisecunde (eliminarea Gauss) 656400

11-Mar-17 7:52:49 PM

Eroarea $|Ax-b| = 3.16449493029238E-06$

Eroarea $|x-x_{\text{exact}}| = 1.72858114964426E-06$

Solutia exacta : 1,2, ...

Metoda substituției

Fie sistemul liniar $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ unde matricea sistemului A este triunghiulară. Pentru a găsi soluția unică a sistemului, trebuie ca matricea să fie nesingulară. Determinantul matricilor triunghiulare este dat de formula:

$$\det A = a_{11}a_{22} \cdots a_{nn}$$

$$\det A \neq 0, a_{ii} \neq 0 \quad \forall i = 1, 2, \dots, n$$

Vom considera întâi cazul când matricea A este inferior triunghiulară. Sistemul are forma:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 &= b_2 \\ \vdots & \\ a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{ii}x_i &= b_i \\ \vdots & \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{ni}x_i + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n \end{aligned} \tag{1}$$

Necunoscutele x_1, x_2, \dots, x_n , se deduc folosind ecuațiile sistemului de la prima către ultima.

Din prima ecuație se deduce x_1 :

$$x_1 = \frac{b_1}{a_{11}} \quad (2)$$

Din a doua ecuație , utilizând valoarea x_1 din (2), obținem x_2 :

$$x_2 = \frac{b_2 - a_{21}x_1}{a_{22}}$$

Când ajungem la ecuația i :

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{ii-1}x_{i-1} + a_{ii}x_i = b_i$$

folosind variabilele x_1, x_2, \dots, x_{i-1} calculate anterior, avem:

$$x_i = \frac{b_i - a_{i1}x_1 - \cdots - a_{ii-1}x_{i-1}}{a_{ii}}$$

Din ultima ecuație se deduce x_n astfel:

$$x_n = \frac{b_n - a_{n1}x_1 - a_{n2}x_2 - \cdots - a_{nn-1}x_{n-1}}{a_{nn}}$$

Algoritmul de calcul al soluției sistemelor (1) cu matrice inferior triunghiulară este următorul:

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j}{a_{ii}}, i = 1, 2, \dots, n-1, n$$

Acest algoritm se numește *metoda substituției directe*.

Vom considera, în continuare sistemul (1) cu matrice superior triunghiulară :

$$a_{11}x_1 + \cdots + a_{1i}x_i + \cdots + a_{1n-1}x_{n-1} + a_{1n}x_n = b_1$$

$$\cdot \cdot \cdot$$

$$a_{ii}x_i + \cdots + a_{in-1}x_{n-1} + a_{in}x_n = b_i$$

$$\cdot \cdot \cdot$$

$$a_{n-1n-1}x_{n-1} + a_{n-1n}x_n = b_{n-1}$$

$$a_{nn}x_n = b_n$$

Necunoscutele x_1, x_2, \dots, x_n se deduc pe rând, folosind ecuațiile sistemului, de la ultima către prima.

Din ultima ecuație găsim x_n :

$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}}$$

Folosind valoarea lui x_n dedusă mai sus, din penultima ecuație obținem:

$$x_{n-1} = \frac{b_{n-1} - a_{n-1n}x_n}{a_{n-1n-1}}$$

Când ajungem la ecuația i :

$$a_{ii}x_i + a_{i,i+1}x_{i+1} + \cdots + a_{in}x_n = b_i$$

se cunosc deja $x_{i+1}, x_{i+2}, \dots, x_n$ de unde ducem:

$$x_i = \frac{b_i - a_{i,i+1}x_{i+1} - \cdots - a_{in}x_n}{a_{ii}}$$

Din prima ecuație găsim valoarea lui x_1 :

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

Procedeul descris mai sus se numește de *metoda substituției inverse* pentru rezolvarea sistemelor liniare cu matrice superior triunghiulară:

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j}{a_{ii}}, i = n, n-1, \dots, 2, 1.$$

M - numărul de operații *, / (înmulțiri/împărțiri) efectuate

A - numărul operațiilor ± (adunări/scăderi) efectuate.

Atunci pentru calculul componentei x_i se efectuează $M=n-i+1$, $A=n-i$ și în total:

$$M = \sum_{i=n}^1 (n-i+1) = \sum_{k=1}^n k = \frac{n(n+1)}{2},$$
$$A = \sum_{i=n}^1 (n-i) = \sum_{k=1}^{n-1} k = \frac{n(n-1)}{2}$$

Efortul de calcul pentru metoda substituției directe este

$$M = \frac{n(n+1)}{2} \quad A = \frac{n(n-1)}{2}.$$

Algoritmul de eliminare Gauss

Algoritmul se realizează în $n-1$ pași prin transformarea sistemului dat într-un sistem echivalent cu matrice triunghiulară superior.

Pas 1

la acest pas se obține sistemul:

$A^{(1)}x = b^{(1)} \sim Ax = b$, unde $A^{(1)}$ are prima coloană în formă superior triunghiulară.

Pas 2

se construiește sistemul

$A^{(2)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(2)} \sim A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, unde $A^{(2)}$ are primele două coloane în formă superior triunghiulară.

⋮

Pasul r

se obține sistemul $A^{(r)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(r)} \sim A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, unde $A^{(r)}$ are primele r coloane în formă superior triunghiulară.

⋮

Pasul $n-1$:

se obține sistemul

$A^{(n-1)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(n-1)} \sim A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, unde $A^{(n-1)}$ are primele $n-1$ coloane în formă superior triunghiulară.

Dacă la un anumit pas matricea $A^{(r)}$ nu poate fi construită aceasta ne va arăta că matricea A este singulară.

În realizarea acestor pași se utilizează următoarele operații elementare:

- **înmulțirea unei ecuații cu un factor și adunarea la altă ecuație;**
- **interschimbarea a două linii și/sau două coloane în matricea A .**

Pasul 1

Intrare : sistemul $A\mathbf{x}=\mathbf{b}$

Ieșire : sistemul $A^{(1)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(1)} \sim A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, matr $A^{(1)}$ are
prima coloană în formă superior triunghiulară.

Fie ecuația i , cu $i=1,\dots,n$

$$E_i : \quad a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{in}x_n = b_i.$$

Presupunem $a_{11} \neq 0$. Operațiile efectuate au ca obiectiv
anularea coeficienților lui x_1 din ecuațiile de la 2 la n și sunt
descrise în continuare:

$$\mathbf{E}_1 * \begin{pmatrix} -\mathbf{a}_{21} \\ \mathbf{a}_{11} \end{pmatrix} + \mathbf{E}_2 = \mathbf{E}_2^{(1)} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{a}_{21}^{(1)} = \mathbf{0}$$

$$\vdots$$

$$\mathbf{E}_1 * \begin{pmatrix} -\mathbf{a}_{i1} \\ \mathbf{a}_{11} \end{pmatrix} + \mathbf{E}_i = \mathbf{E}_i^{(1)} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{a}_{i1}^{(1)} = \mathbf{0}$$

$$\vdots$$

$$\mathbf{E}_1 * \begin{pmatrix} -\mathbf{a}_{n1} \\ \mathbf{a}_{11} \end{pmatrix} + \mathbf{E}_n = \mathbf{E}_n^{(1)} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{a}_{n1}^{(1)} = \mathbf{0}$$

Sistemul obținut prin aceste operații are forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11}^{(1)} x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + \dots + a_{1n}^{(1)} x_n = b_1^{(1)} \\ a_{22}^{(1)} x_2 + \dots + a_{2n}^{(1)} x_n = b_2^{(1)} \\ \vdots \\ a_{i2}^{(1)} x_2 + \dots + a_{in}^{(1)} x_n = b_i^{(1)} \\ \vdots \\ a_{n2}^{(1)} x_2 + \dots + a_{nn}^{(1)} x_n = b_n^{(1)} \end{array} \right.$$

Pas 2

Intrare : $A^{(1)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(1)}$

Ieșire : $A^{(2)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(2)} \sim A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, $A^{(2)}$ are primele două coloane în formă superior triunghiulară.

Se presupune $a_{22}^{(1)} \neq 0$ și se urmărește anularea elementelor $a_{32}^{(2)}, a_{42}^{(2)}, \dots, a_{n2}^{(2)}$ (transformarea coloanei 2 în formă superior triunghiulară). Operațiile efectuate asupra ecuațiilor $E_i^{(1)}, i = 3, \dots, n$ sunt următoarele :

$$\left\{ \begin{array}{l} E_2^{(1)} * \left(-\frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} \right) + E_3^{(1)} = E_3^{(2)} \Rightarrow a_{32}^{(2)} = \mathbf{0}; \\ \vdots \\ E_2^{(1)} * \left(-\frac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} \right) + E_i^{(1)} = E_i^{(2)} \Rightarrow a_{i2}^{(2)} = \mathbf{0}; \\ \vdots \\ E_2^{(1)} * \left(-\frac{a_{n2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} \right) + E_n^{(1)} = E_n^{(2)} \Rightarrow a_{n2}^{(2)} = \mathbf{0}; \end{array} \right.$$

Se observă că nu se schimbă forma superior triunghiulară a primei coloane.

Pas r

Intrare : $A^{(r-1)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(r-1)}$

Ieșire : $A^{(r)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(r)} \sim A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, $A^{(r)}$ are primele r coloane în formă superior triunghiulară.

Sistemul are forma următoare:

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11}^{(r-1)} x_1 + \cdots + a_{1r}^{(r-1)} x_r + \cdots + a_{1n}^{(r-1)} x_n = b_1^{(r-1)} \\ \quad \cdot \\ \quad \cdot \\ \quad \cdot \\ \qquad \cdot \\ \qquad \cdot \\ \qquad \cdot \\ \\ a_{rr}^{(r-1)} x_r + \cdots + a_{rn}^{(r-1)} x_n = b_r^{(r-1)} \\ a_{r+1r}^{(r-1)} x_r + \cdots + a_{r+1n}^{(r-1)} x_n = b_{r+1}^{(r-1)} \\ \qquad \vdots \\ a_{ir}^{(r-1)} x_r + \cdots + a_{in}^{(r-1)} x_n = b_i^{(r-1)} \\ \qquad \vdots \\ a_{nr}^{(r-1)} x_r + \cdots + a_{nn}^{(r-1)} x_n = b_n^{(r-1)} \end{array} \right.$$

Presupunem $\mathbf{a}_{rr}^{(r-1)} \neq \mathbf{0}$.

Vom urmări anularea elementelor $\mathbf{a}_{r+1r}^{(r)}$, $\mathbf{a}_{r+2r}^{(r)}$, \dots , $\mathbf{a}_{nr}^{(r)}$.

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{E}_r^{(r-1)} * \left(-\frac{\mathbf{a}_{r+1r}^{(r-1)}}{\mathbf{a}_{rr}^{(r-1)}} \right) + \mathbf{E}_{r+1}^{(r-1)} = \mathbf{E}_{r+1}^{(r)} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{a}_{r+1r}^{(r)} = \mathbf{0}; \\ \vdots \\ \mathbf{E}_r^{(r-1)} * \left(-\frac{\mathbf{a}_{ir}^{(r-1)}}{\mathbf{a}_{rr}^{(r-1)}} \right) + \mathbf{E}_i^{(r-1)} = \mathbf{E}_i^{(r)} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{a}_{ir}^{(r)} = \mathbf{0}; \\ \vdots \\ \mathbf{E}_r^{(r-1)} * \left(-\frac{\mathbf{a}_{nr}^{(r-1)}}{\mathbf{a}_{rr}^{(r-1)}} \right) + \mathbf{E}_n^{(r-1)} = \mathbf{E}_n^{(r)} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{a}_{nr}^{(r)} = \mathbf{0}; \end{array} \right.$$

Se observă că nu se schimbă forma superior triunghiulară a primelor $r-1$ coloane.

La fiecare pas s-a făcut ipoteza $a_{rr}^{(r-1)} \neq 0$. Elementul $a_{rr}^{(r-1)}$ poartă numele de *pivot*. În cazul în care elementul pivot este nul se pot aplica următoarele strategii, numite de *pivotare*:

Pivotare ($a_{rr}^{(r-1)} \neq 0$?)

1⁰ *Fără pivotare*

Se caută primul indice $i_0 \in \{r, r+1, \dots, n\}$ astfel încât $a_{i_0 r}^{(r-1)} \neq 0$. Se interschimbă liniile i_0 și r .

Să observăm că în procesul de calcul la pasul r intervine factorul $\frac{1}{a_{rr}^{(r-1)}}$ astfel că valori mici ale lui $|a_{rr}^{(r-1)}|$ conduc la

amplificarea erorilor de calcul. Pentru a asigura stabilitatea numerică a procesului de calcul este de dorit ca $|a_{rr}^{(r-1)}|$ să fie ‘mare’.

2⁰ Pivotare parțială

Se determină indicele i_0 :

$$\left| a_{i_0 r}^{(r-1)} \right| = \max \left\{ \left| a_{ir}^{(r-1)} \right| ; i = r, \dots, n \right\}$$

și se interschimbă liniile i_0, r dacă $i_0 \neq r$.

3⁰ Pivotare totală

Se determină indicii i_0 și j_0 :

$$\left| a_{i_0 j_0}^{(r-1)} \right| = \max \left\{ \left| a_{ij}^{(r-1)} \right| ; i = r, \dots, n, j = r, \dots, n \right\}$$

și se interschimbă liniile i_0, r dacă $i_0 \neq r$ și coloanele j_0, r dacă $j_0 \neq r$

Schimbarea coloanelor implică schimbarea ordinii variabilelor astfel încât în final va trebui refăcută ordinea inițială a variabilelor.

Dacă după pivotare elementul pivot rămâne nul, $a_{rr}^{(r-1)} = 0$, atunci putem deduce că $A^{(r-1)}$ este singulară.

În adevăr, dacă în procesul de pivotare parțială $a_{rr}^{(r-1)} = 0$, atunci

$$\begin{aligned}
 A^{(r-1)} &= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & \ddots & & \\ & & a_{rr} = 0 & \cdots a_{rn} \\ & & 0 & \\ & & 0 & \\ & & 0 & \cdots a_{nn} \end{bmatrix} \Rightarrow \\
 \det A^{(r-1)} &= a_{11}^{(r-1)} a_{22}^{(r-1)} \cdots a_{r-1, r-1}^{(r-1)} \det \begin{bmatrix} 0 & \cdots & a_{rn} \\ 0 & & \\ \vdots & & \\ 0 & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = 0
 \end{aligned}$$

Deoarece operațiile efectuate (cele de inetrschimbare de linii și/sau coloane) nu au schimbat decât semnul determinantului avem:

$$\det A = \pm \det A^{(r-1)} = 0 \Rightarrow \det A = 0$$

prin urmare matricea A inițială este singulară.

Și în cazul procesului de pivotare totală dacă $a_{rr}^{(r-1)} = 0$, atunci:

$$A^{(r-1)} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & \cdots & a_{1n} \\ & \ddots & & & \\ & & a_{rr} = 0 \cdots 0 & & \\ & & 0 & & \\ & & 0 & & \\ & & 0 \cdots \cdots \cdots 0 & & \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\det A^{(r-1)} = a_{11}^{(r-1)} a_{22}^{(r-1)} \cdots a_{r-1, r-1}^{(r-1)} \det \begin{bmatrix} 0 \cdots \cdots 0 \\ 0 \cdots \cdots 0 \\ \vdots \quad \quad \quad \vdots \\ 0 \cdots \cdots 0 \end{bmatrix} = 0$$

$\det A = \pm \det A^{(r-1)} = 0 \Rightarrow A$ este matrice singulară.

```

 $r = 1;$ 
pivotare( $r$ );
while ( $r \leq n - 1$  și  $|a_{rr}| > \varepsilon$ )
    // Pas  $r$ 
    * for  $i = r + 1, \dots, n$ 
        •  $f = -\frac{a_{ir}}{a_{rr}};$ 
        • for  $j = r + 1, \dots, n$ 
             $a_{ij} = a_{ij} + f * a_{rj};$ 
        •  $a_{ir} = 0;$ 
        •  $b_i = b_i + f * b_r;$ 
    *  $r = r + 1;$ 
    * pivotare( $r$ );
if ( $|a_{rr}| \leq \varepsilon$ ) 'MATRICE SINGULARA'
else {  $A \leftarrow A^{(n-1)}$  ,  $b \leftarrow b^{(n-1)}$ 
    se rezolvă sistemul triunghiular superior  $Ax = b$ }

```

Numărul de operații efectuate la pasul r și în total este:

$$(n-r)[1M + (n-r)A + (n-r)M + 1A + 1M] \Rightarrow$$

$$\mathbf{M:} \quad \sum_{r=1}^{n-1} (n-r)^2 + 2 \sum_{r=1}^{n-1} (n-r) = \frac{(n-1)n(2n+5)}{6},$$

$$\mathbf{A:} \quad \sum_{r=1}^{n-1} (n-r)^2 + \sum_{r=1}^{n-1} (n-r) = \frac{(n-1)n(n+1)}{3},$$

$$\mathbf{M:} \quad \frac{n^3}{3} + \mathcal{O}(n^2) \quad ; \quad \mathbf{A:} \quad \frac{n^3}{3} + \mathcal{O}(n^2)$$

Eliminarea „chinezească”

200-100 î.Cr. China – *9 capitole despre arta matematică* – metodă de rezolvare foarte asemănătoare eliminării Gauss

„Avem 3 tipuri de grâu. Știm că 3 baloturi din primul tip, 2 baloturi din al doilea tip și 1 balot din al treilea tip cântăresc 39 măsuri. Deasemenea, 2 baloturi din primul tip, 3 baloturi din al doilea tip și 1 balot din al treilea tip cântăresc 34 măsuri și 1 balot din primul tip, 2 baloturi din al doilea tip și 3 baloturi din al treilea tip cântăresc 26 măsuri. Câte măsuri cântărește un balot din fiecare tip de grâu”

Notăția actuală:

$$3b_1 + 2b_2 + b_3 = 39$$

$$2b_1 + 3b_2 + b_3 = 34$$

$$b_1 + 2b_2 + 3b_3 = 26$$

Notăția *chinezească*

1	2	3
2	3	2
3	1	1
26	34	39

Pasul 1

Se înmulțește coloana a doua cu 3 și se scade din ea coloana a treia atât timp cât este posibil.

Se înmulțește prima coloană cu 3 și se scade din ea coloana a treia atât timp cât este posibil.

Se ajunge la forma:

$$\begin{array}{ccc} 0 & 0 & 3 \\ 4 & 5 & 2 \\ 8 & 1 & 1 \\ 39 & 24 & 39 \end{array}$$

Pasul 2

Se înmulțește prima coloană cu 5 și se scade din ea coloana a doua atât timp cât este posibil.

Se ajunge la forma:

$$\begin{array}{ccc} 0 & 0 & 3 \\ 0 & 5 & 2 \\ 36 & 1 & 1 \\ 99 & 24 & 39 \end{array}$$

Pentru rezolvare se folosește metoda substituției inverse pe sistemul obținut mai sus.

Descompuneri LU

$$A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad A = L \cdot U,$$

L inferior triunghiulară și U superior triunghiulară

$$L, U \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

$$Ax = b \Leftrightarrow L U x = b \Leftrightarrow \begin{cases} Ly = b \Rightarrow \text{soluția } y^* \\ Ux = y^* \Rightarrow \text{soluția } x^* \end{cases}, \quad x^* = A^{-1}b$$

Fie minorul principal principal al matricii A :

$$A_p = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1p} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2p} \\ \vdots & & & \\ a_{p1} & a_{p2} & \cdots & a_{pp} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{p \times p}, \quad p = 1, \dots, n$$

Teoremă (descompunere LU)

Fie $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ o matrice reală pătratică de dimensiune n astfel încât $\det A_p \neq 0, \forall p = 1, \dots, n$. Atunci există o unică matrice inferior triunghiulară $L = (l_{ij})_{i,j=1,\dots,n}$ cu $l_{ii} = 1, i = 1, \dots, n$ și o unică matrice superior triunghiulară $U = (u_{ij})_{i,j=1,\dots,n}$ astfel încât

$$A = L \cdot U \quad (1)$$

Demonstrație. *Existența*: demonstrația se face prin inducție după n dimensiunea matricii A .

Algoritmul Doolittle de calcul al descompunerii LU

Fie $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ o matrice reală pătratică de dimensiune n care satisface ipotezele teoremei de mai sus. Algoritmul de calcul al matricilor L și U are n etape. La fiecare pas se determină simultan:

- câte o linie din matricea U și
- câte o coloană din matricea L .

Descriem în continuare, un pas oarecare.

Pasul p ($p = 1, 2, \dots, n$)

Se determină elementele liniei p ale matricii U , $u_{pi}, i = p, \dots, n$, și elementele coloanei p ale matricii L ,

$$l_{ip}, i = p + 1, \dots, n \quad l_{pp} = 1 \quad (u_{pi} = l_{ip} = 0, i = 1, \dots, p-1).$$

$$\left(\begin{array}{ccccccc} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & u_{pp} & u_{pp+1} & \cdots & u_{pn} \end{array} \right) \text{ lin. } p \text{ a matr. } U$$

$$\left(\begin{array}{c} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{1} \\ l_{p+1p} \\ \vdots \\ l_{np} \end{array} \right) \text{ col. } p \text{ a matr. } L$$

Se cunosc de la pașii anteriori:

- elementele primelor $p-1$ linii din U
(elemente u_{kj} cu $k = 1, \dots, p-1, \forall j$) și
- elementele primelor $p-1$ coloane din L
(elemente l_{ik} cu $k = 1, \dots, p-1, \forall j$).

Calculul elementelor *liniei* p din matricea U , u_{pi} $i = p, \dots, n$ se face folosind elementul a_{pi} și $(LU)_{pi}$. Avem:

$$\begin{aligned}
 a_{pi} &= (LU)_{pi} = \sum_{k=1}^n l_{pk} u_{ki} \quad (l_{pk} = 0, k = p+1, \dots, n) = \sum_{k=1}^p l_{pk} u_{ki} = \\
 &= l_{pp} u_{pi} + \sum_{k=1}^{p-1} l_{pk} u_{ki}
 \end{aligned}$$

Pentru $i = p, \dots, n$ avem:

$$u_{pi} = a_{pi} - \sum_{k=1}^{p-1} l_{pk} u_{ki}, \quad i = p, \dots, n \quad (2)$$

($l_{pp} = 1$, l_{pk} , u_{ki} $k = 1, \dots, p-1$ sunt elemente de pe coloane din L și linii din U calculate la pașii anteriori)

Calculul elementelor *coloanei* p din matricea L :

$$l_{ip}, i = p+1, \dots, n \quad (l_{ip} = 0, i = 1, \dots, p-1, l_{pp} = 1)$$

se face analog:

$$\begin{aligned}
a_{ip} &= (LU)_{ip} = \sum_{k=1}^n l_{ik} u_{kp} (u_{kp} = 0, k = p+1, \dots, n) = \sum_{k=1}^p l_{ik} u_{kp} = \\
&= l_{ip} u_{pp} + \sum_{k=1}^{p-1} l_{ik} u_{kp}
\end{aligned}$$

Dacă $u_{pp} \neq 0$ putem calcula elementele nenule ale coloanei p din matricea L astfel:

$$l_{ip} = \frac{(a_{ip} - \sum_{k=1}^{p-1} l_{pk} u_{ki})}{u_{pp}}, \quad i = p+1, \dots, n \quad (3)$$

(elementele l_{pk} , u_{ki} $k = 1, \dots, p-1$ sunt calculate anterior pasului p)

Dacă $u_{pp} = 0$, calculele se opresc, descompunerea LU nu poate fi calculată - matricea A are un minor A_p cu determinantul 0 .

Unicitatea: Demonstrație prin reducere la absurd.
Facem observația că inversa unei matrici nesingulare triunghiulară inferior (superior) este o matrice de același tip.
Presupunem că

$$A = L \cdot U = L_1 \cdot U_1 \quad (4)$$

Din ipoteza A nesingulară rezultă existența inverselor matricilor L, L_1, U, U_1 . Înmulțind egalitatea (4) la stânga cu L^{-1} și cu U_1^{-1} la dreapta obținem

$$U U_1^{-1} = L^{-1} L_1.$$

Matricea $L^{-1} L_1$ este inferior triunghiulară cu elementele diagonale egale cu I iar matricea $U U_1^{-1}$ este superior triunghiulară. Rezultă că:

$$U U_1^{-1} = L^{-1} L_1 = I_n, \quad \text{deci} \quad L = L_1, \quad U = U_1.$$

Descompunerea Cholesky

O matrice $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ se numește *pozitiv definită* dacă:

$$(Ax, x)_{\mathbb{R}^n} > 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0$$

Notăție: $A > 0$

Fie $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ o matrice simetrică ($A=A^T$) și pozitiv definită.

Descompunerea Cholesky pentru matricea A este de forma:

$$A = LL^T, \quad L \text{ matrice inferior triunghiulară}$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T = \begin{pmatrix} l_{11} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & & & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ \mathbf{0} & l_{22} & \cdots & l_{n2} \\ \vdots & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

Matricea \mathbf{L} se calculează în n pași, coloană după coloană.

Pas r ($r=1, \dots, n$)

Se calculează elementele coloanei r a matricii L :
întâi elementul diagonal l_{rr} apoi
celelalte elemente l_{ir} ($i=r+1, \dots, n$)

Coloana r a matricii L :

$$\left(0 \quad \dots \quad 0 \quad l_{rr} \quad l_{r+1r} \quad \dots \quad l_{ir} \quad \dots \quad l_{nr} \right)^T$$

- se cunosc elementele primelor $(r-1)$ coloane ale matricii L

Calcul l_{rr} :

$$a_{rr} = \left(LL^T \right)_{rr} = \begin{pmatrix} l_{r1} & \cdots & l_{rr-1} & l_{rr-1} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{r1} \\ \vdots \\ l_{rr-1} \\ l_{rr} \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} =$$

$$= l_{r1}^2 + l_{r2}^2 + \cdots + l_{rr-1}^2 + l_{rr}^2 \quad \Rightarrow \quad l_{rr} = \pm \sqrt{a_{rr} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk}^2}$$

Calcul l_{ir} ($i=r+1, \dots, n$):

$$\begin{aligned}
 a_{ir} &= \left(L L^T \right)_{ir} = \begin{pmatrix} l_{i1} & \cdots & l_{ir-1} & l_{ir} & \cdots & l_{ii} & \cdots & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{r1} \\ \vdots \\ l_{rr-1} \\ l_{rr} \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} = \\
 &= l_{i1} l_{r1} + l_{i2} l_{r2} + \cdots + l_{ir-1} l_{rr-1} + l_{ir} l_{rr} \quad \Rightarrow \quad l_{ir} = \frac{\left(a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik} l_{rk} \right)}{l_{rr}}
 \end{aligned}$$

Algoritmul de eliminare Gauss fără schimbare de linii \Leftrightarrow descompunere LU

Presupunem că la fiecare pas al algoritmului de eliminare Gauss pivotul este nenul ($a_{rr}^{(r-1)} \neq 0$), deci nu e nevoie de schimbare de linii.

Algoritmul se poate scrie astfel:

for $r = 1, \dots, n-1$

for $i = r+1, \dots, n$

- $f = -\frac{a_{ir}}{a_{rr}};$

- $// E_i = E_i + f * E_r$

- **for $j = r+1, \dots, n$**

- $a_{ij} = a_{ij} + f * a_{rj};$

- $a_{ir} = 0;$

- $b_i = b_i + f * b_r;$

Considerăm vectorul și matricea:

$$\boldsymbol{t}^{(r)} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \\ \boldsymbol{t}_{r+1}^{(r)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{t}_n^{(r)} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n \quad , \quad \boldsymbol{T}_r := \boldsymbol{I}_n + \boldsymbol{t}^{(r)} \boldsymbol{e}_r^T \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{t}^{(r)} \boldsymbol{e}_r^T &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \\ \boldsymbol{t}_{r+1}^{(r)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{t}_n^{(r)} \end{pmatrix} (\mathbf{0} \ \dots \ \mathbf{1} \ \mathbf{0} \dots \mathbf{0}) = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \overbrace{\mathbf{0}}^{\text{col } r} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & & & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \boldsymbol{t}_{r+1}^{(r)} & \dots & \mathbf{0} - \text{lin}(r+1) \\ \vdots & & & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \boldsymbol{t}_n^{(r)} & \dots & \mathbf{0} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Matricea T_r este matrice triunghiulară inferior cu $\mathbf{1}$ pe diagonala principală:

$$T_r = \begin{matrix} & \text{col } r \\ \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} & \dots & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & & & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{1} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \boldsymbol{t}_{r+1}^{(r)} & \dots & 0 \\ \vdots & & & & & \\ 0 & 0 & \dots & \boldsymbol{t}_n^{(r)} & \dots & 1 \end{pmatrix} \end{matrix}$$

Inversa matricii T_r este

$$T_r^{-1} = I_n - t^{(r)} e_r^T .$$

$$\begin{aligned} T_r T_r^{-1} &= (I_n + t^{(r)} e_r^T)(I_n - t^{(r)} e_r^T) = I_n - t^{(r)} e_r^T + t^{(r)} e_r^T - t^{(r)} e_r^T t^{(r)} e_r^T = \\ &= I_n - t^{(r)} t_r^{(r)} e_r^T = I_n \quad (0 = t_r^{(r)} = e_r^T t^{(r)}) \end{aligned}$$

Dacă A este o matrice oarecare, vrem să vedem cum se poate construi matricea $B=T_r A$ fără a face înmulțire matricială. Vom studia legătura între liniile matricilor A și B .

$$\begin{aligned}
e_i^T B &= e_i^T (T_r A) = e_i^T (I_n + t^{(r)} e_r^T) A = e_i^T A + e_i^T t^{(r)} e_r^T A = \\
&= e_i^T A + t_i^{(r)} (e_r^T A)
\end{aligned}$$

Linia i a noii matrici B se obține din linia i a matricii A la care se adaugă linia r a matricii A înmulțită cu factorul $t_i^{(r)}$.

$$e_i^T B = \begin{cases} e_i^T A & i = 1, \dots, r \ (t_i^{(r)} = 0) \\ e_i^T A + t_i^{(r)} (e_r^T A) & i = r + 1, \dots, n \end{cases} .$$

Operația $T_r A$ descrie Pasul r al algoritmului de eliminare Gauss dacă:

$$t_{r+1}^{(r)} = -\frac{a_{r+1r}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}, \dots, t_i^{(r)} = -\frac{a_{ir}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}, \dots, t_n^{(r)} = -\frac{a_{nr}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}.$$

Algoritmul de eliminare Gauss fără schimbare de linii poate fi descris astfel:

$$T_{n-1} \cdots T_2 T_1 A = U \quad \text{cu} \quad T_r = I_n + t^{(r)} e_r^T,$$

$$t^{(r)} = \left(\mathbf{0} \cdots \mathbf{0} \left(-\frac{a_{r+1r}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}\right) \cdots \left(-\frac{a_{ir}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}\right) \cdots \left(-\frac{a_{nr}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}\right) \right)^T.$$

Avem:

$$A = T_1^{-1} T_2^{-1} \cdots T_{n-1}^{-1} U = LU \quad , \quad L := T_1^{-1} T_2^{-1} \cdots T_{n-1}^{-1}$$

$$\begin{aligned} T_1^{-1} T_2^{-1} &= (I_n - t^{(1)} e_1^T)(I_n - t^{(2)} e_2^T) = I_n - t^{(1)} e_1^T - t^{(2)} e_2^T + t^{(1)} e_1^T t^{(2)} e_2^T = \\ &= I_n - t^{(1)} e_1^T - t^{(2)} e_2^T + t^{(1)} t_1^{(2)} e_2^T = I_n - t^{(1)} e_1^T - t^{(2)} e_2^T \quad (t_1^{(2)} = 0) \end{aligned}$$

Prin inducție se arată că:

$$L = T_1^{-1} T_2^{-1} \cdots T_{n-1}^{-1} = I_n - t^{(1)} e_1^T - t^{(2)} e_2^T - \cdots - t^{(n-1)} e_{n-1}^T$$

$$L = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ -\frac{a_{21}}{a_{11}} & \mathbf{1} & \dots & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ -\frac{a_{31}}{a_{11}} & -\frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} & \dots & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & & & & & \\ -\frac{a_{r1}}{a_{11}} & -\frac{a_{r2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} & \dots & 1 & \dots & \mathbf{0} \\ -\frac{a_{r+11}}{a_{11}} & -\frac{a_{r+12}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} & \dots & -\frac{a_{r+1r}^{(r-1)}}{a_{rr}^{(r-1)}} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & & & & & \\ -\frac{a_{n1}}{a_{11}} & -\frac{a_{n2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} & \dots & -\frac{a_{nr}^{(r-1)}}{a_{rr}^{(r-1)}} & \dots & 1 \end{pmatrix}$$