Calcul Numeric

Cursul 7

2017

Anca Ignat

QR – algoritmul Gram Schmidt

$$A \in \mathbb{R}^{n\times n} \quad \textbf{cu} \quad \det A \neq 0$$

$$A = QR \quad \begin{bmatrix} a^1 & a^2 & \cdots & a^n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q^1 & q^2 & \cdots & q^n \end{bmatrix} \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & \cdots & r_{2n} \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \cdots & r_{nn} \end{pmatrix} \tag{1}$$

$a^j = Ae_j$ – coloana j a matricii A
$q^j = Qe_j$ – coloana j a matricii Q

Relaţia (1) poate fi rescrisă astfel:

$$\begin{cases} r_{11}q^1 = a^1 \\ r_{12}q^1 + r_{22}q^2 = a^2 \\ \vdots \\ r_{1p}q^1 + \cdots + r_{jp}q^j + \cdots + r_{pp}q^p = a^p \\ \vdots \\ r_{1n}q^1 + \cdots + r_{jn}q^j + \cdots + r_{nn}q^n = a^n \end{cases} \tag{2}$$

Algoritmul de calcul al descompunerii $\boldsymbol{QR}$ cu metoda Gram-Schmidt se desfăşoară în $\boldsymbol{n}$ paşi, la fiecare pas calculându-se:

- coloana $\boldsymbol{p}$ din matricea $\boldsymbol{R}$
- coloana $\boldsymbol{p}$ din matricea $\boldsymbol{Q}$

Avem:

$$\mathbf{det}\, A \neq 0,\ A = QR,\ Q - \ \textbf{ortogonală} \Rightarrow \ \mathbf{det}\, R \neq 0\ (r_{ii} \neq 0\ \forall i)$$

Pasul 1

Se foloseşte prima ecuaţie a sistemului (2)

$$r_{11}q^1 = a^1$$

Se face produsul scalar al acestei ecuaţii cu vectorii q^1 şi a^1. Se foloseşte proprietatea coloanelor matricilor orotogonale:

$$\left(q^i, q^j\right)_{\mathbb{R}^n} = \begin{cases} \| q^i \|_2^2 = 1 & \textbf{pentru} \quad i = j \\ 0 & \textbf{pentru} \quad i \neq j \end{cases}$$

Avem:

$$r_{11}\left(q^1, q^1\right)_{\mathbb{R}^n} = \left(a^1, q^1\right)_{\mathbb{R}^n} \quad \textbf{şi} \; r_{11}\left(q^1, a^1\right)_{\mathbb{R}^n} = \left(a^1, a^1\right)_{\mathbb{R}^n}$$

de unde obţinem:

$$r_{11} = \pm\left\|a^1\right\|_2 \;, \quad q^1 = \frac{1}{r_{11}} a^1 \; (r_{11} \neq 0 \textbf{ deoarece } \det A \neq 0)$$

Pasul p

Se foloseşte ecuaţia $\boldsymbol{p}$ sistemului (2):

$$r_{1p}q^1 + \cdots + r_{jp}q^j + \cdots + r_{pp}q^p = a^p$$

La acest pas se cunosc deja coloanele $\boldsymbol{q^1, q^2, \ldots, q^{p-1}}$. Se face, pe rând, produsul scalar al acestei ecuaţii cu vectorii:

$$\boldsymbol{q^1, q^2, \ldots, q^{p-1}}$$

$$\boldsymbol{q^p} \text{ şi } \boldsymbol{a^p}.$$

$$\left(\sum_{k=1}^{p} r_{kp}q^k, q^j\right)_{\mathbb{R}^n} = \left(a^p, q^j\right)_{\mathbb{R}^n} \quad j = 1, \ldots, p-1$$

$$\left(\sum_{k=1}^{p} r_{kp}q^k, q^j\right)_{\mathbb{R}^n} = \sum_{\substack{k=1 \\ k\neq j}}^{p} r_{kp}\left(q^k, q^j\right)_{\mathbb{R}^n} + r_{jp}\left(q^j, q^j\right)_{\mathbb{R}^n} = r_{jp}$$

$$r_{jp} = \left(a^p, q^j\right)_{\mathbb{R}^n} \quad j = 1, ..., p-1$$

Avem:

$$q^p = \frac{1}{r_{pp}}\left(a^p - r_{1p}q^1 - \cdots - r_{p-1\,p}q^{p-1}\right)$$

$$\| q^p \|_2^2 = 1 = \frac{1}{r_{pp}^2} \| \left(a^p - r_{1p}q^1 - \cdots - r_{p-1\,p}q^{p-1}\right) \|_2^2$$

Obţinemm

$$r_{pp} = \pm \left\| a^p - r_{1p}q^1 - \cdots - r_{p-1\,p}q^{p-1} \right\|_2$$

$$q^p = \frac{1}{r_{pp}}\left(a^p - r_{1p}q^1 - \cdots - r_{p-1\,p}q^{p-1}\right) = \frac{1}{r_{pp}}\left(a^p - \sum_{j=1}^{p-1} r_{jp}q^j\right)$$

Algoritmul Gram Schmidt modificat

for $\boldsymbol{i = 1,n}$

$\boldsymbol{v^i = a^i;}$

for $\boldsymbol{i = 1, n}$

$\boldsymbol{r_{ii} = \|v^i\|_2;}$

$\boldsymbol{q^i = (1/ r_{ii})\, v^i;}$

for $\boldsymbol{j = (i + 1)\,,\, n}$

$\boldsymbol{r_{ij} = (q^i\,,\, v^j);}$

$\boldsymbol{v^j = v^j - r_{ij}q^i;}$

$$\textbf{M:}\ \frac{(n^3 + 3n^2)}{2} \qquad\qquad \textbf{A:}\ \frac{(n^3 + n^2 - 2)}{2}$$

Exemple descompuneri ***QR***

http://profs.info.uaic.ro/~ancai/CN/curs/exempleQR/

Metode iterative pentru rezolvarea sistemelor de ecuaţii liniare

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

- se presupune cunoscut că $\boldsymbol{A}$ este nesingulară, **det** $\boldsymbol{A \neq 0}$;
- soluţia exactă a sistemului (1) se notează cu $\boldsymbol{x}^{*}$:

$$\boldsymbol{x}^{*} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b} \qquad (2)$$

- $\boldsymbol{n}$ - dimensiunea sistemului este "*mare*";
- $\boldsymbol{A}$ este matrice rară - cu "*puţine*" elemente $\boldsymbol{a_{ij} \neq 0}$;
- pentru a aproxima soluţia $\boldsymbol{x}^{*}$ matricea $\boldsymbol{A}$ nu se schimbă (transformă) ci doar se folosesc elementele nenule ale matricii ;

• se construieşte un şir de vectori $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\} \subseteq \mathbb{R}^n$, şir care în anumite cazuri, converge la $\boldsymbol{x}^*$:

$$\boldsymbol{x}^{(k)} \to \boldsymbol{x}^* \quad \textbf{pentru } \boldsymbol{k} \to \infty$$

O schemă generală de deducere a unei metode iterative

Fie descompunerea:

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B} - \boldsymbol{C}\ , \quad \boldsymbol{B}, \boldsymbol{C} \in \boldsymbol{R}^{n \times n}\ , \quad \boldsymbol{B} \text{ “}\textit{uşor}\text{” inversabilă} \qquad (3)$$

Ce înseamnă ***B*** "*uşor*" inversabilă?

Sistemul liniar, având ca matrice a sistemului matricea ***B***:

$$\boldsymbol{Bx} = \boldsymbol{f}$$

se rezolvă ‘uşor’ (adică repede) – ca în cazul sistemelor cu matrici diagonale sau triunghiulare, de exemplu.

$$Ax^* = b \leftrightarrow Bx^* - Cx^* = b \leftrightarrow$$

$$Bx^* = Cx^* + b \leftrightarrow x^* = B^{-1}Cx^* + B^{-1}b = Mx^* + d$$

unde

$$M := B^{-1}C \in \mathbb{R}^{n\times n}\ , \quad d := B^{-1}b \in \mathbb{R}^n \tag{4}$$

Şirul $\{x^{(k)}\}$ se construieşte astfel:

$$x^{(k+1)} := Mx^{(k)} + d, k = 0,1,2,\ldots x^{(0)} \in \mathbb{R}^n \textbf{ ales arbitrar} \tag{5}$$

Vectorul $x^{(k+1)}$ poate fi privit şi ca soluţia sistemului liniar:

$$Bx = f \ \textbf{ cu } f := Cx^{(k)} + b \tag{6}$$

Cunoscând vectorul $\boldsymbol{x}^{(k)}$, următorul element din şir, $\boldsymbol{x}^{(k+1)}$, se poate construi fie utilizând relaţia (5) (dacă putem construi matricea $\boldsymbol{M}$ explicit), fie rezolvând sistemul liniar (6).

Matricea $\boldsymbol{M}$ poartă numele de ***matricea iteraţiei*** iar vectorul $\boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ se numeşte ***iteraţia iniţială***.

Ne punem problema convergenţei şirului $\boldsymbol{x}^{(k)}$:

$$\boldsymbol{x}^{(k)} \to \boldsymbol{x}^* \quad , \quad k \to \infty$$

Se ştie că această convergenţă nu are loc pentru orice matrice $\boldsymbol{B}$. Avem următorul rezultat general de convergenţă.

Teorema de convergenţă

Fie $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ o matrice nesingulară şi $B,C \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $\det B \neq 0$, astfel ca $A=B-C$. Fie $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ un vector oarecare şi $\{x^{(k)}\}$ şirul de vectori dat de relaţia (5) cu M şi d daţi de (4). Atunci:

$$x^{(k)} \to x^*, k \to \infty, \ \forall x^{(0)} \ \Leftrightarrow \ \rho(M) < 1 \qquad (7)$$

unde $\rho(M) = \max\{|\lambda|; \lambda - \textbf{valoare proprie a matricii } M\}$ este raza spectrală a matricii M. Dacă există o normă matricială naturală astfel ca $\|M\| < 1$ atunci şirul $\{x^{(k)}\}$ converge la soluţia x^* a sistemului (1).

$$\|M\| < 1 \ \Rightarrow \quad x^{(k)} \to x^*, k \to \infty, \forall x^{(0)}. \qquad (8)$$

Demonstraţie: Scăzând relaţiile (5) şi $\boldsymbol{x^* = Mx^* + d}$ obţinem:

$$\boldsymbol{x^{(k+1)} - x^* = M(x^{(k)} - x^*)\,,\, k = 0,1,2,\ldots}$$

Avem:

$$\boldsymbol{x^{(p)} - x^* = M(x^{(p-1)} - x^*) = M^2(x^{(p-2)} - x^*) = \cdots = M^p(x^{(0)} - x^*)}$$

$$\boldsymbol{x^{(p)} - x^* = M^p(x^{(0)} - x^*)\,,\, \forall p}$$

Prin urmare:

$$\boldsymbol{x^{(p)} \to x^*\,,\, p \to \infty \;\Leftrightarrow\; M^p \to 0\,,\, p \to \infty}$$

$$\boldsymbol{M^p \to 0\,,\, p \to \infty \;\Leftrightarrow\; \rho(M) < 1}$$

Dacă:

$$\boldsymbol{\| M \| < 1 \;\Rightarrow\; M^p \to 0\,,\, p \to \infty \;\Rightarrow\; x^{(p)} \to x^*\,,\, p \to \infty \quad \forall x^{(0)}}$$

Evaluarea erorii absolute $\|x^{(k)} - x^*\|$

Presupunem $\|M\|<1$ (şirul $\{x^{(k)}\}$ converge la x^*).
Avem din (5):

$$x^{(l+1)} = Mx^{(l)} + d$$

$$x^{(l)} = Mx^{(l-1)} + d$$

$$x^{(l+1)} - x^{(l)} = M(x^{(l)} - x^{(l-1)}) \quad \forall l$$

Pentru orice ***k, j***, folosind relaţiile de mai sus, avem:

$$x^{(k+j+1)} - x^{(k+j)} = M(x^{(k+j)} - x^{(k+j-1)}) = \cdots = M^j(x^{(k+1)} - x^{(k)}) \,\forall k, j$$

Aplicând succesiv relaţia precedentă obţinem:

$$x^{(k+p)} - x^{(k)} = x^{(k+p)} - x^{(k+p-1)} + x^{(k+p-1)} - x^{(k+p-2)} + \cdots +$$

$$+ x^{(k+2)} - x^{(k+1)} + x^{(k+1)} - x^{(k)} =$$

$$= \sum_{j=0}^{p-1} (x^{(k+j+1)} - x^{(k+j)})$$

$$x^{(k+p)} - x^{(k)} = \sum_{j=0}^{p-1} (x^{(k+j+1)} - x^{(k+j)}) = (\sum_{j=0}^{p-1} M^j)(x^{(k+1)} - x^{(k)})$$

Făcând $p \to \infty$ obţinem:

$$x^* - x^{(k)} = (\sum_{j=0}^{\infty} M^j) M (x^{(k)} - x^{(k-1)})$$

$$\| M \| < 1 \Rightarrow \sum_{j=0}^{\infty} M^j = (I_n - M)^{-1}$$

Mai avem şi evaluarea:

$$\| M \| < 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{1 + \| M \|} \le \| (I_n - M)^{-1} \| \le \frac{1}{1 - \| M \|}$$

Prin urmare:

$$\| x^* - x^{(k)} \| \le \frac{\| M \|}{1 - \| M \|} \| x^{(k)} - x^{(k-1)} \|$$

Această relaţie ne spune că, din punct de vedere practic, putem opri algoritmul atunci când diferenţa dintre două iteraţii succesive devine suficient de mică, acest lucru asigurând apropierea de soluţie.