Calcul Numeric

Cursul 4

2020

Anca Ignat

Metode numerice de rezolvarea sistemelor liniare

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

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

în care ***A***$\boldsymbol{A_i(b)}$ 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 $\boldsymbol{x}$. Unul din cele mai folosiți algoritmi este **algoritmul de eliminare Gauss :**

$$\boldsymbol{Ax=b} \quad \leftrightarrow \tilde{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{x} = \tilde{\boldsymbol{b}} \text{ } \mathbf{cu} \text{ } \tilde{\boldsymbol{A}} \text{ matrice superior triunghiulară}$$

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b} = \tilde{\boldsymbol{A}}^{-1}\tilde{\boldsymbol{b}} \quad \textbf{(notăm } \boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b} \sim \widetilde{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{x} = \tilde{\boldsymbol{b}}\textbf{)}$$

Metoda substituției

Fie sistemul liniar $Ax = b$ unde matricea sistemului A este triunghiulară. Pentru a găsi soluția unică a sistemului, trebuie ca matricea să fie nesingulară. Determinantul matricelor triunghiulare este dat de formula:

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

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

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

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

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

Din prima ecuație se deduce x_1:

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

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 $\boldsymbol{i}$:

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

folosind variabilele $x_1, x_2, \ldots, x_{i-1}$ 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 $\boldsymbol{x_n}$ 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:

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

Acest algoritm se numește ***metoda substituției directe***.

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

$$
\begin{array}{l}
a_{11}x_1 + \cdots + a_{1i}x_i + \cdots + a_{1n-1}x_{n-1} + a_{1n}x_n = b_1 \\
\quad \ddots \\
\qquad\qquad a_{ii}x_i + \cdots + a_{in-1}x_{n-1} + a_{in}x_n = b_i \\
\qquad\qquad\quad \ddots \\
\qquad\qquad\qquad\qquad a_{n-1n-1}x_{n-1} + a_{n-1n}x_n = b_{n-1} \\
\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad a_{nn}x_n = b_n
\end{array}
$$

Necunoscutele $x_1, x_2, \ldots, x_n$ 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 $\boldsymbol{i}$:

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

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

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

Din prima ecuație găsim valoarea lui $\boldsymbol{x_1}$:

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

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

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

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

A - numărul operațiilor $\pm$ (adunări/scăderi) efectuate.

Atunci pentru calculul componentei x_i se efectuează

M=n-i+1, A=n-i şi 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

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

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:

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

Pas 2
se construiește sistemul
$\boldsymbol{A^{(2)}x = b^{(2)} \sim Ax = b,}$ unde $\boldsymbol{A^{(2)}}$ are primele două coloane în formă superior triunghiulară.

$\vdots$

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

$\vdots$

Pasul n-1 :
se obține sistemul
$\boldsymbol{A^{(n-1)}x = b^{(n-1)} \sim Ax = b,}$ unde $\boldsymbol{A^{(n-1)}}$ are primele ***n-1*** coloane în formă superior triunghiulară.

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

Pasul 1

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

Fie ecuația ***i,*** cu ***i=1,…,n***

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

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

$$E_1 * \left(\frac{-a_{21}}{a_{11}} \right) + E_2 = E_2^{(1)} \quad \Rightarrow \quad a_{21}^{(1)} = 0$$

$$\vdots$$

$$E_1 * \left(\frac{-a_{i1}}{a_{11}} \right) + E_i = E_i^{(1)} \quad \Rightarrow \quad a_{i1}^{(1)} = 0$$

$$\vdots$$

$$E_1 * \left(\frac{-a_{n1}}{a_{11}} \right) + E_n = E_n^{(1)} \quad \Rightarrow \quad a_{n1}^{(1)} = 0$$

Sistemul obținut prin aceste operații are forma:

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)} x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + \cdots\cdots\cdots + a_{1n}^{(1)} x_n = b_1^{(1)} \\ \qquad\qquad a_{22}^{(1)} x_2 + \cdots\cdots\cdots + a_{2n}^{(1)} x_n = b_2^{(1)} \\ \qquad\qquad \vdots \\ \qquad\qquad a_{i2}^{(1)} x_2 + \cdots\cdots\cdots + a_{in}^{(1)} x_n = b_i^{(1)} \\ \qquad\qquad \vdots \\ \qquad\qquad a_{n2}^{(1)} x_2 + \cdots\cdots\cdots + a_{nn}^{(1)} x_n = b_n^{(1)} \end{cases}$$

Pas 2

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

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

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

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

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

Pas r

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

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

Sistemul are forma următoare:

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

Presupunem $\boldsymbol{a_{rr}^{(r-1)} \neq 0}$.

Vom urmări anularea elementelor $\boldsymbol{a_{r+1r}^{(r)}, a_{r+2r}^{(r)}, \cdots, a_{nr}^{(r)}}$.

$$\begin{cases} E_r^{(r-1)} * \left(-\dfrac{a_{r+1r}^{(r-1)}}{a_{rr}^{(r-1)}}\right) + E_{r+1}^{(r-1)} = E_{r+1}^{(r)} \quad \Rightarrow \quad a_{r+1r}^{(r)} = 0; \\ \vdots \\ E_r^{(r-1)} * \left(-\dfrac{a_{ir}^{(r-1)}}{a_{rr}^{(r-1)}}\right) + E_i^{(r-1)} = E_i^{(r)} \quad \Rightarrow \quad a_{ir}^{(r)} = 0; \\ \vdots \\ E_r^{(r-1)} * \left(-\dfrac{a_{nr}^{(r-1)}}{a_{rr}^{(r-1)}}\right) + E_n^{(r-1)} = E_n^{(r)} \quad \Rightarrow \quad a_{nr}^{(r)} = 0; \end{cases}$$

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

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

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

1^0 ***Fără pivotare***

Se caută primul indice $i_0 \in \{r, r+1, \cdots, n\}$ 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 $\dfrac{1}{a_{rr}^{(r-1)}}$ astfel că valori mici ale lui $\left|a_{rr}^{(r-1)}\right|$ conduc la amplificarea erorilor de calcul. Pentru a asigura stabilitatea numerică a procesului de calcul este de dorit ca $\left|a_{rr}^{(r-1)}\right|$ să fie ***'mare'***.

2^0 ***Pivotare parțială***

Se determină indicele $\boldsymbol{i_0}$:

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

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

3^0 ***Pivotare totală***

Se determină indicii $\boldsymbol{i_0}$ şi $\boldsymbol{j_0}$:

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

și se interschimbă liniile i_0 , r dacă $i_0 \neq r$ şi 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, $\boldsymbol{a_{rr}^{(r-1)} = 0}$, atunci putem deduce că $\boldsymbol{A^{(r-1)}}$ este singulară.

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

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

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

Deoarece operațiile efectuate (cele de interschimbare 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:

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

$$\mathbf{det}\, \boldsymbol{A}^{(r-1)} = \boldsymbol{a}_{11}^{(r-1)} \boldsymbol{a}_{22}^{(r-1)} \cdots \boldsymbol{a}_{r-1\,r-1}^{(r-1)}\, \mathbf{det} \begin{bmatrix} \mathbf{0} \cdots\cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \cdots\cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} \cdots\cdots & \mathbf{0} \end{bmatrix} = \mathbf{0}$$

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

$r = 1;$

pivotare$(r);$

while $(r \leq n - 1$ **şi** $|a_{rr}| > \varepsilon)$

// Pas r

$*$ **for** $i = r + 1, \ldots, n$

- $f = -\dfrac{a_{ir}}{a_{rr}};$
- **for** $j = r + 1, \ldots, n$

  $a_{ij} = a_{ij} + f * a_{rj};$
- $a_{ir} = 0;$
- $b_i = b_i + f * b_r;$

$*\ r = r + 1;$

$*$ **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 $\boldsymbol{r}$ și în total este:

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

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

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

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

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. De asemenea, 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”

Notația actuală:

$$3b_1 + 2b_2 + b_3 = 39$$
$$2b_1 + 3b_2 + b_3 = 34$$
$$b_1 + 2b_2 + 3b_3 = 26$$

Notația *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:

0	**0**	**3**
4	**5**	**2**
8	**1**	**1**
39	**24**	**39**

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:

0	**0**	**3**
0	**5**	**2**
36	**1**	**1**
99	**24**	**39**

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

Descompuneri *LU*

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

L inferior triunghiulară şi ***U*** superior triunghiulară

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

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \leftrightarrow \boldsymbol{L}\boldsymbol{U}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \leftrightarrow \begin{cases} \boldsymbol{L}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b} \Rightarrow \text{soluţia } \boldsymbol{y}^* \\ \boldsymbol{U}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}^* \Rightarrow \text{soluţia } \boldsymbol{x}^* \end{cases}, \ \boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$$

Fie minorul principal principal al matricii $\boldsymbol{A}$:

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

Teoremă (descompunere *LU*)

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

$$\boldsymbol{A = L \cdot U} \tag{1}$$

Demonstraţie. ***Existenţa***: demonstraţia se face prin inducţie după $\boldsymbol{n}$ dimensiunea matricii $\boldsymbol{A}$.

Algoritmul Doolittle *de calcul al descompunerii* ***LU***

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

- câte o linie din matricea $\boldsymbol{U}$ şi
- câte o coloană din matricea $\boldsymbol{L}$.

Descriem în continuare, un pas oarecare.

Pasul $\boldsymbol{p}$ $(\boldsymbol{p} = \mathbf{1, 2, \ldots,} \boldsymbol{n})$

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

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

$$\begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \boldsymbol{u_{pp}} & \boldsymbol{u_{pp+1}} & \cdots & \boldsymbol{u_{pn}} \end{pmatrix} \text{ lin. } \boldsymbol{p} \text{ a matr. } \boldsymbol{U}$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{1} \\ \boldsymbol{l_{p+1\,p}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{l_{np}} \end{pmatrix} \text{ col. } \boldsymbol{p} \text{ a matr. } \boldsymbol{L}$$

Se cunosc de la paşii anteriori:

- elementele primelor ***p-1*** linii din ***U*** (elemente u_{kj} cu $k = 1,\dots, p-1, \forall j$) şi
- 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} şi $(LU)_{pi}$. Avem:

$$a_{pi} = (LU)_{pi} = \sum_{k=1}^{n} l_{pk} u_{ki} \; (l_{pk} = 0, k = p+1,\dots,n) = \sum_{k=1}^{p} l_{pk} u_{ki} =$$

$$= l_{pp} u_{pi} + \sum_{k=1}^{p-1} l_{pk} u_{ki}$$

Pentru $\boldsymbol{i = p,\dots,n}$ avem:

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

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

Calculul elementelor ***coloanei p*** din matricea ***L:***

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

se face analog:

$$a_{ip} = (LU)_{ip} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kp} (u_{kp} = 0, k = p+1, \ldots, n) = \sum_{k=1}^{p} l_{ik} u_{kp} =$$

$$= l_{ip} u_{pp} + \sum_{k=1}^{p-1} l_{ik} u_{kp}$$

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

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

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

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

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

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{U} = \boldsymbol{L_1} \cdot \boldsymbol{U_1} \qquad (4)$$

Din ipoteza $\boldsymbol{A}$ nesingulară rezultă existenţa inverselor matricilor $\boldsymbol{L}, \boldsymbol{L_1}, \boldsymbol{U}, \boldsymbol{U_1}$. Înmulţind egalitatea (4) la stânga cu $\boldsymbol{L^{-1}}$şi cu $\boldsymbol{U_1^{-1}}$ la dreapta obţinem

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

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

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

Descompunerea Cholesky

O matrice $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n \times n}}$ se numeşte ***pozitiv definit***ă dacă:

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

Notaţie: $\boldsymbol{A} > \boldsymbol{0}$

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

Descompunerea Cholesky pentru matricea **A** este de forma:

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

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

Matricea $\boldsymbol{L}$ se calculează în $\boldsymbol{n}$ paşi, coloană după coloană.

Pas *r* (*r=1,…,n*)

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

Coloana ***r*** a matricii ***L:***

$$\begin{pmatrix} \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \boldsymbol{l_{rr}} & \boldsymbol{l_{r+1r}} & \cdots & \boldsymbol{l_{ir}} & \cdots & \boldsymbol{l_{nr}} \end{pmatrix}^{\boldsymbol{T}}$$

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

Calcul $\boldsymbol{l_{rr}}$:

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

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

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

$$a_{ir} = \left(LL^T\right)_{ir} = \begin{pmatrix} l_{i1} & \cdots & l_{ir-1} & l_{ir} & \cdots & l_{ii} & \cdots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{r1} \\ \vdots \\ l_{rr-1} \\ l_{rr} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} =$$

$$= l_{i1}l_{r1} + l_{i2}l_{r2} + \cdots + l_{ir-1}l_{rr-1} + l_{ir}l_{rr} \quad \Rightarrow \quad l_{ir} = \frac{\left(a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik}l_{rk}\right)}{l_{rr}}$$

Algoritmul de eliminare Gauss fără schimbare de ecuații $\Leftrightarrow$ 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 ecuații.

Algoritmul se poate scrie astfel:

$$\textbf{for } r = 1,\ldots,n-1$$

$$\textbf{for } i = r+1,\ldots,n$$

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

  $// \; E_i = E_i + f * E_r$

- $\textbf{for } j = r+1,\ldots,n$

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

- $a_{ir} = 0;$
- $b_i = b_i + f * b_r;$

Considerăm vectorul și matricea:

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

$$t^{(r)} e_r^T = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ t_{r+1}^{(r)} \\ \vdots \\ t_n^{(r)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 1 & 0 \cdots 0 \end{pmatrix} = \begin{array}{cl} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & \overbrace{0}^{\text{col r}} & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & & \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & t_{r+1}^{(r)} & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & & \\ 0 & 0 & \cdots & t_n^{(r)} & \cdots & 0 \end{pmatrix} & \begin{array}{l} \\ \\ \\ - \text{lin}\,(r+1) \\ \\ \\ \end{array} \end{array}$$

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

$$\boldsymbol{T_r} = \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} & & & \textbf{col } \boldsymbol{r} & & \end{array} \\ \left(\begin{array}{cccccc} \mathbf{1} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} & \cdots & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & & & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{1} & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \boldsymbol{t_{r+1}^{(r)}} & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & & \\ 0 & 0 & \cdots & \boldsymbol{t_n^{(r)}} & \cdots & 1 \end{array} \right) \end{array}$$

Inversa matricei T_r este

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

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

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 matricelor A și B.

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{e}_i^T \boldsymbol{B} &= \boldsymbol{e}_i^T(\boldsymbol{T}_r \boldsymbol{A}) = \boldsymbol{e}_i^T(\boldsymbol{I}_n + \boldsymbol{t}^{(r)}\boldsymbol{e}_r^T)\boldsymbol{A} = \boldsymbol{e}_i^T \boldsymbol{A} + \boldsymbol{e}_i^T \boldsymbol{t}^{(r)}\boldsymbol{e}_r^T \boldsymbol{A} = \\
&= \boldsymbol{e}_i^T \boldsymbol{A} + t_i^{(r)}(\boldsymbol{e}_r^T \boldsymbol{A})
\end{aligned}
$$

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

$$
\boldsymbol{e}_i^T \boldsymbol{B} = \begin{cases} \boldsymbol{e}_i^T \boldsymbol{A} & i = 1,\ldots,r \ (t_i^{(r)} = 0) \\ \boldsymbol{e}_i^T \boldsymbol{A} + t_i^{(r)}(\boldsymbol{e}_r^T \boldsymbol{A}) & i = r+1,\ldots,n \end{cases}.
$$

Operația $\boldsymbol{T_r A}$ descrie Pasul $\boldsymbol{r}$ al algoritmului de eliminare Gauss dacă:

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

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

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

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

Avem:

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

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

Prin inducție se arată că:

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

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