Calcul Numeric

Cursul 4

2022

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

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

Pasul r

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

Pasul n-1:

se obține sistemul

 $A^{(n-1)}x = b^{(n-1)} \sim Ax = b$, 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 ecuații și/sau două coloane în matricea A.

Pasul 1

Intrare: sistemul Ax=b

Ieșire : sistemul $A^{(1)}x = b^{(1)} \sim Ax = b$, matricea $A^{(1)}$ are

prima coloană în formă superior triunghiulară.

Fie ecuația i, cu i=1,...,n

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

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:

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

•

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

•

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

Sistemul obținut prin aceste operații are forma:

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

<u>Pas 2</u>

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

Ieșire: $A^{(2)}x = b^{(2)} \sim Ax = b$, $A^{(2)}$ 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 :

$$\begin{cases} E_{2}^{(1)} * \left(-\frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}\right) + E_{3}^{(1)} = E_{3}^{(2)} \implies a_{32}^{(2)} = \mathbf{0}; \\ \vdots \\ E_{2}^{(1)} * \left(-\frac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}\right) + E_{i}^{(1)} = E_{i}^{(2)} \implies a_{i2}^{(2)} = \mathbf{0}; \\ \vdots \\ E_{2}^{(1)} * \left(-\frac{a_{n2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}\right) + E_{n}^{(1)} = E_{n}^{(2)} \implies a_{n2}^{(2)} = \mathbf{0}; \end{cases}$$

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

Pas r

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

Ieșire : $A^{(r)}x = b^{(r)} \sim Ax = b$, $A^{(r)}$ are primele r coloane

în formă superior triunghiulară.

Sistemul are următoarea formă:

$$\begin{cases} a_{11}^{(r-1)}x_1 + \dots + a_{1r}^{(r-1)}x_r + \dots + a_{1n}^{(r-1)}x_n = b_1^{(r-1)} \\ \ddots \\ a_{rr}^{(r-1)}x_r + \dots + a_{rn}^{(r-1)}x_n = b_r^{(r-1)} \\ a_{rr}^{(r-1)}x_r + \dots + a_{r+1n}^{(r-1)}x_n = b_{r+1}^{(r-1)} \\ \vdots \\ a_{ir}^{(r-1)}x_r + \dots + a_{in}^{(r-1)}x_n = b_i^{(r-1)} \\ \vdots \\ a_{nr}^{(r-1)}x_r + \dots + a_{nn}^{(r-1)}x_n = b_n^{(r-1)} \end{cases}$$

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

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

$$\begin{cases} E_{r}^{(r-1)} * \left(-\frac{a_{r+1r}^{(r-1)}}{a_{rr}^{(r-1)}} \right) + E_{r+1}^{(r-1)} = E_{r+1}^{(r)} \implies a_{r+1r}^{(r)} = \mathbf{0}; \\ \vdots \\ E_{r}^{(r-1)} * \left(-\frac{a_{ir}^{(r-1)}}{a_{rr}^{(r-1)}} \right) + E_{i}^{(r-1)} = E_{i}^{(r)} \implies a_{ir}^{(r)} = \mathbf{0}; \\ \vdots \\ E_{r}^{(r-1)} * \left(-\frac{a_{nr}^{(r-1)}}{a_{rr}^{(r-1)}} \right) + E_{n}^{(r-1)} = E_{n}^{(r)} \implies a_{nr}^{(r)} = \mathbf{0}; \end{cases}$$

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

10 Fără pivotare

Se caută primul indice $i_0 \in \{r, r+1, \dots, n\}$ astfel încât $a_{i_0r}^{(r-1)} \neq 0$. Se interschimbă ecuațiile 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 $\left|a_{rr}^{(r-1)}\right|$ 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'.

2⁰ Pivotare parțială

Se determină indicele i_{θ} :

$$|a_{i_0r}^{(r-1)}| = \max\{|a_{ir}^{(r-1)}|; i = r,...,n\}$$

și se inter-schimbă ecuațiile i_0 , r dacă $i_0 \neq r$.

3⁰ Pivotare totală

Se determină indicii i_{θ} şi j_{θ} :

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

și se inter-schimbă ecuațiile 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

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

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

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

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

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

prin urmare matricea A inițială este singulară.

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

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

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

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

```
r = 1;
pivotare(r);
while (r \le n-1 \sin |a_{rr}| > \varepsilon)
     // Pas r
     * for i = r + 1, ..., n
            • f = -\frac{a_{ir}}{a_{rr}};
            • for j = r + 1, ..., n
                      a_{ij} = a_{ij} + f * a_{ri};
            \bullet a_{ir} = 0;
            \bullet 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:

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

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

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

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

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. 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:

Notația chinezească

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

 $2b_1 + 3b_2 + b_3 = 34$

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

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:

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

Descompuneri LU

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

L inferior triunghiulară și U superior triunghiulară

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

$$Ax = b \leftrightarrow LUx = b \leftrightarrow \begin{cases} Ly = b \Rightarrow \text{soluția } y^* \\ Ux = y^* \Rightarrow \text{soluția } x^* \end{cases}, x^* = A^{-1}b$$

Fie minorul principal principal al matricei A:

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

Teoremă (descompunere *LU*)

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

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

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

Algoritmul Crout 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 matricelor L și U are n etape. La fiecare pas se determină simultan:

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

Descriem în continuare, un pas oarecare.

Pasul
$$p (p = 1, 2, ..., n)$$

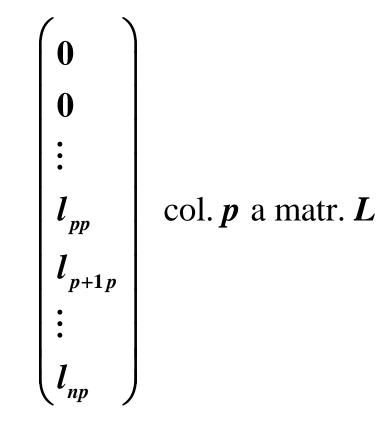
Se determină elementele coloanei p ale matricii L:

$$l_{ip}, i=p,...,n$$

și elementele liniei p ale matricii U ,

$$u_{pp} = 1$$
, u_{pi} , $i = p + 1,...,n$,

$$(u_{pi}=l_{ip}=0, i=1,...,p-1).$$



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

Se cunosc de la paşii anteriori:

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

Calculul elementelor *coloanei* p din matricea L, l_{ip} i = p,...,n se face folosind elementul a_{ip} şi $(LU)_{ip}$. Avem:

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

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

Pentru i = p, ..., n avem:

$$l_{ip} = a_{ip} - \sum_{k=1}^{p-1} l_{ik} u_{kp} , \quad i = p, ..., n$$
 (2)

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

Calculul elementelor *liniei* p din matricea U:

$$u_{pi}$$
, $i = p + 1,...,n$ $(u_{pi} = 0, i = 1,..., p - 1, u_{pp} = 1)$

se face analog:

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

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

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

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

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

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

Unicitatea: Demonstrație prin reducere la absurd.

Facem observația că inversa unei matrici nesingulare triunghiulară inferior (superior) este o matrice de același tip.

Presupunem că

$$A = L \cdot U = L_1 \cdot U_1 \tag{4}$$

Din ipoteza A nesingulară rezultă existența inverselor matricelor L, L₁, U, U₁. Înmulțind egalitatea (4) la stânga cu L⁻¹și cu U₁⁻¹ la dreapta obținem

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

Matricea UU_1^{-1} este superior triunghiulară cu elementele diagonale egale cu I iar matricea $L^{-1}L_1$ este inferior triunghiulară. Rezultă că:

$$UU_1^{-1} = L^{-1}L_1 = I_n$$
, deci $L=L_1$, $U=U_1$.

Numărul de operații efectuate:

A (adunări, scăderi):

$$\sum_{p=1}^{n} \left[(n-p+1)(p-1) + (n-p)(p-1) \right] = \frac{n(n-1)(2n-1)}{6} = \frac{1}{3}n^{3} + O(n^{2})$$

M (înmulțiri, împărțiri):

$$\sum_{n=1}^{n} \left[(n-p+1)(p-1) + (n-p)p \right] = \frac{(n-1)n(n+1)}{3} = \frac{1}{3}n^3 + O(n^2)$$

Descompunerea Cholesky

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

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

Notație: 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:

 $A = LL^T$, L 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 L se calculează în n pași, coloană după coloană.

Pas
$$r(r=1,...,n)$$

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

Coloana r a matricii L:

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

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

Calcul l_{rr} :

$$a_{rr} = \left(LL^{T}\right)_{rr} = \begin{pmatrix} l_{r1} & \cdots & l_{rr-1} & l_{rr-1} & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{r1} \\ \vdots \\ l_{rr-1} \\ l_{rr} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = l_{r1}^{2} + l_{r2}^{2} + \cdots + l_{rr-1}^{2} + l_{rr}^{2} \quad \Rightarrow \quad l_{rr} = \pm \sqrt{a_{rr} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk}^{2}}$$

Calcul l_{ir} (i=r+1,...,n):

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