

Calcul Numeric

Cursul 5

2022

Anca Ignat

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:

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:

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

$$t^{(r)}e_r^T = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \\ t_{r+1}^{(r)} \\ \vdots \\ t_n^{(r)} \end{pmatrix} (\mathbf{0} \dots \mathbf{1} \mathbf{0} \dots \mathbf{0}) = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \overbrace{\mathbf{0}}^{\text{col } r} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & & & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & t_{r+1}^{(r)} & \dots & \mathbf{0} - \text{lin}(r+1) \\ \vdots & & & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & t_n^{(r)} & \dots & \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

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

$$T_r = \begin{matrix} & \text{col } r \\ \left(\begin{array}{cccccc} \mathbf{1} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} & \dots & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & & & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{1} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & t_{r+1}^{(r)} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & & & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & t_n^{(r)} & \dots & \mathbf{1} \end{array} \right) \end{matrix}$$

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

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

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 ecuații poate fi descris astfel:

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

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

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:

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

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

Descompuneri QR

Definiție

Se numește *matrice ortogonală*, o matrice $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ care satisface relația:

$$Q^T Q = Q Q^T = I_n \quad (Q^{-1} = Q^T) .$$

Matricele ortogonale au următoarele proprietăți:

- Dacă Q este matrice ortogonală atunci și matricea transpusă Q^T este ortogonală.

$$Q^T Q = Q^T (Q^T)^T = Q Q^T = (Q^T)^T Q^T = I_n$$

- Dacă Q_1 și Q_2 sunt matrice ortogonale atunci $Q_1 Q_2$ este tot matrice ortogonală.

$$(Q_1 Q_2)^T (Q_1 Q_2) = Q_2^T Q_1^T Q_1 Q_2 = Q_2^T I Q_2 = I_n$$

$$(Q_1 Q_2) (Q_1 Q_2)^T = Q_1 Q_2 Q_2^T Q_1^T = Q_1^T I Q_1 = I_n$$

- Dacă $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ este matrice ortogonală și $x \in \mathbb{R}^n$ atunci $\|Qx\|_2 = \|x\|_2$.

$$\|Qx\|_2^2 = (Qx, Qx) = (x, Q^T Qx) = (x, x) = \|x\|_2^2, \quad \|\cdot\|_2 \geq 0 \Rightarrow$$

$$\|Qx\|_2 = \|x\|_2$$

Fie A o matrice reală pătratică de dimensiune n . Pp. că avem:

$$A = QR$$

unde Q este o matrice ortogonală iar R este o matrice superior triunghiulară.

$$Ax = b \Leftrightarrow QRx = b \Leftrightarrow Q^T QRx = Q^T b \Leftrightarrow Rx = Q^T b$$

Algoritmul lui Householder

Matrice de reflexie - $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$ de forma:

$$P = I_n - 2vv^T, \quad v \in \mathbb{R}^n, \quad \|v\|_2 = \sqrt{\sum_{j=1}^n |v_j|^2} = 1$$

$$vv^T = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} (v_1, v_2, \dots, v_n) = \begin{pmatrix} v_1^2 & v_1 v_2 & \dots & v_1 v_n \\ v_2 v_1 & v_2^2 & \dots & v_2 v_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_n v_1 & v_n v_2 & \dots & v_n^2 \end{pmatrix}.$$

Matricele de reflexie sunt :

simetrice - $\mathbf{P} = \mathbf{P}^T$ și

ortogonale - $\mathbf{P}\mathbf{P}^T = \mathbf{P}^T\mathbf{P} = \mathbf{P}^2 = \mathbf{I}_n$.

$$\mathbf{P}^T = (\mathbf{I}_n - 2\mathbf{v}\mathbf{v}^T)^T = \mathbf{I}_n - 2(\mathbf{v}\mathbf{v}^T)^T = \mathbf{I}_n - 2(\mathbf{v}^T)^T \mathbf{v}^T = \mathbf{I}_n - 2\mathbf{v}\mathbf{v}^T = \mathbf{P}$$

$$\begin{aligned}
P^2 &= (I_n - 2vv^T)(I_n - 2vv^T) = I_n - 2vv^T - 2vv^T + 4(vv^T)(vv^T) = \\
&= I_n - 4vv^T + 4v(v^T v)v^T = I_n - 4vv^T + 4v\|v\|_2^2 v^T = \\
&= I_n - 4vv^T + 4vv^T = I_n \quad (\|v\|_2 = 1)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
n = 2, \quad v &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad P = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - 2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1 \ 0) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad x \in \mathbb{R}^2, \quad y = Px \\
x &= \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Vectorul $y=Px$ este reflectatul vectorului x în raport cu axa Ox_2 .

Algoritmul care folosește matricele de reflexie pentru a obține o descompunere QR pentru o matrice $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ a fost descris de Alston S. Householder în articolul "*Unitary triangularization of a nonsymmetric matrix*" apărut în Journal of the Assoc. of Computing Machinery 5 (1958), 339-342.

Transformarea matricei A într-una superior triunghiulară se face în $(n-1)$ pași, la fiecare pas folosindu-se o matrice de reflexie.

Pas 1: $A^{(1)} = P_1 A$ (matricea P_1 se alege astfel încât col. 1 să fie transformată în formă superior triunghiulară)

Pas 2: $A^{(2)} = P_2 A^{(1)} = P_2 (P_1 A)$ (P_2 transformă col. 2 în formă superior triunghiulară, fără să schimbe col. 1)

Pas r : $A^{(r)} = P_r A^{(r-1)} = P_r (P_{r-1} \dots P_1 A)$ (se transformă col r în formă superior triunghiulară fără să schimbe primele $(r-1)$ coloane)

Descompunerea QR construită cu algoritmul Householder este următoarea:

$$P_{n-1} \cdots P_r \cdots P_2 P_1 A = \tilde{Q} A = R$$

unde

$$\tilde{Q} = P_{n-1} \cdots P_r \cdots P_2 P_1$$

\tilde{Q} este matrice ortogonală ca produs de matrice ortogonale.

$$\tilde{Q} A = R \Leftrightarrow \tilde{Q}^T \tilde{Q} A = \tilde{Q}^T R \Leftrightarrow A = \tilde{Q}^T R = QR$$

$$Q = \tilde{Q}^T = (P_{n-1} \cdots P_r \cdots P_2 P_1)^T = P_1 P_2 \cdots P_r \cdots P_{n-1}$$

Pasul r

La intrarea în pasul r matricea A are forma:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1r} & \cdots & a_{1n} \\ \mathbf{0} & a_{22} & \cdots & a_{2r} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & a_{rr} & \cdots & a_{rn} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & a_{r+1r} & \cdots & a_{r+1n} \\ \vdots & & & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & a_{ir} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & & & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & a_{nr} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

Pasul \mathbf{r} constă în:

$$\mathbf{A} := \mathbf{P}_r \mathbf{A}$$

$$\mathbf{P}_r = \mathbf{I}_n - 2\mathbf{v}^r (\mathbf{v}^r)^T, \quad \mathbf{v}^r \in \mathbf{R}^n, \quad \|\mathbf{v}^r\|_2 = 1$$

unde vectorul \mathbf{v}^r se alege astfel ca matricea \mathbf{A} să aibă și coloana \mathbf{r} în formă superior triunghiulară:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1r} & \cdots & a_{1n} \\ \mathbf{0} & a_{22} & \cdots & a_{2r} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & a_{rr} & \cdots & a_{rn} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \cdots & a_{r+1n} \\ \vdots & & & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & & & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

Calculul matricei P_r

Pentru simplitate vom nota $P_r=P$, $v^r=v$.

$$Ae_r = \begin{pmatrix} a_{1r} \\ a_{2r} \\ \vdots \\ a_{r-1r} \\ a_{rr} \\ a_{r+1r} \\ \vdots \\ a_{ir} \\ \vdots \\ a_{nr} \end{pmatrix} \rightarrow (PA)e_r = \bar{A}e_r = \begin{pmatrix} \bar{a}_{1r} = a_{1r} \\ \bar{a}_{2r} = a_{2r} \\ \vdots \\ \bar{a}_{r-1r} = a_{r-1r} \\ \bar{a}_{rr} = k \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

Aplicând proprietatea matricelor ortogonale :

$$\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n \times n}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \|\mathbf{Q}\mathbf{x}\|_2 = \|\mathbf{x}\|_2$$

pentru matricea $\mathbf{Q}=\mathbf{P}$ și vectorul $\mathbf{x}=\mathbf{A}\mathbf{e}_r$ avem:

$$\|\mathbf{P}\mathbf{A}\mathbf{e}_r\|_2^2 = a_{1r}^2 + a_{2r}^2 + \cdots + a_{r-1r}^2 + k^2 =$$

$$\|\mathbf{A}\mathbf{e}_r\|^2 = a_{1r}^2 + a_{2r}^2 + \cdots + a_{r-1r}^2 + a_{rr}^2 + a_{r+1r}^2 + \cdots + a_{ir}^2 + \cdots + a_{nr}^2$$

Din relația de mai sus rezultă:

$$k^2 = \sigma = a_{rr}^2 + a_{r+1r}^2 + \cdots + a_{ir}^2 + \cdots + a_{nr}^2 = \sum_{i=r}^n a_{ir}^2 \Rightarrow k = \pm \sqrt{\sigma}$$

Determinarea vectorului \mathbf{v} ce definește matricea \mathbf{P} :

$$\begin{aligned} (\mathbf{PA})\mathbf{e}_r &= (\mathbf{I}_n - 2\mathbf{v}\mathbf{v}^T)(\mathbf{A}\mathbf{e}_r) = \mathbf{A}\mathbf{e}_r - 2(\mathbf{v}\mathbf{v}^T)(\mathbf{A}\mathbf{e}_r) = \\ &= \mathbf{A}\mathbf{e}_r - 2\mathbf{v}(\mathbf{v}^T(\mathbf{A}\mathbf{e}_r)) = \mathbf{A}\mathbf{e}_r - (2\alpha)\mathbf{v} = \mathbf{A}\mathbf{e}_r - \mathbf{u} \end{aligned}$$

unde cu α și \mathbf{u} am notat:

$$\alpha := \boldsymbol{v}^T (A \boldsymbol{e}_r) = \left((A \boldsymbol{e}_r), \boldsymbol{v} \right)_{\mathbb{R}^n} = \left(\begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_{1r} \\ \boldsymbol{a}_{2r} \\ \vdots \\ \boldsymbol{a}_{ir} \\ \vdots \\ \boldsymbol{a}_{nr} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \boldsymbol{v}_1 \\ \boldsymbol{v}_2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{v}_i \\ \vdots \\ \boldsymbol{v}_n \end{pmatrix} \right)_{\mathbb{R}^n} =$$

$$= \boldsymbol{a}_{1r} \boldsymbol{v}_1 + \boldsymbol{a}_{2r} \boldsymbol{v}_2 + \cdots + \boldsymbol{a}_{ir} \boldsymbol{v}_i + \cdots + \boldsymbol{a}_{nr} \boldsymbol{v}_n$$

$$u := (2\alpha) v = Ae_r - (PA)e_r = \begin{pmatrix} a_{1r} \\ a_{2r} \\ \vdots \\ a_{r-1r} \\ a_{rr} \\ a_{r+1r} \\ \vdots \\ a_{ir} \\ \vdots \\ a_{nr} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} a_{1r} \\ a_{2r} \\ \vdots \\ a_{r-1r} \\ k \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ a_{rr} - k \\ a_{r+1r} \\ \vdots \\ a_{ir} \\ \vdots \\ a_{nr} \end{pmatrix}$$

Cu aceste notații, matricea \mathbf{P} devine:

$$\mathbf{P} = \mathbf{I}_n - 2\left(\frac{1}{2\alpha}\right)u \left(\frac{1}{2\alpha}\right)u^T = \mathbf{I}_n - \left(\frac{1}{2\alpha^2}\right)uu^T = \mathbf{I}_n - \frac{1}{\beta}uu^T$$
$$\beta := 2\alpha^2$$

Pentru a cunoaște matricea \mathbf{P} trebuie să mai determinăm constanta β . Din condiția:

$$\|v\|_2^2 = 1 \Rightarrow \left\|\frac{1}{2\alpha}u\right\|_2^2 = 1 \Rightarrow \frac{1}{4\alpha^2}\|u\|_2^2 = 1 \Rightarrow 2\beta = \|u\|_2^2$$

$$\begin{aligned}
\|u\|_2^2 &= \left\| \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ a_{rr} - k \\ a_{r+1r} \\ \vdots \\ a_{ir} \\ \vdots \\ a_{nr} \end{pmatrix} \right\|_2^2 = (a_{rr} - k)^2 + a_{r+1r}^2 + \cdots + a_{ir}^2 + \cdots + a_{nr}^2 = \\
&= a_{rr}^2 + a_{r+1r}^2 + \cdots + a_{ir}^2 + \cdots + a_{nr}^2 - 2ka_{rr} + k^2 = \\
&= \sigma - 2ka_{rr} + \sigma = 2(\sigma - ka_{rr})
\end{aligned}$$

de unde obținem:

$$\beta = \sigma - k a_{rr}$$

Vom alege semnul constantei k astfel încât β să fie cât mai mare posibil deoarece constanta β apare în operația de împărțire. Avem:

$$\beta \text{ "mare"} \rightarrow \beta = \sigma - k a_{rr} \geq \sigma \quad (\sigma \geq 0) \rightarrow$$

$$\text{semn } k = -\text{semn } a_{rr}$$

Ce înseamnă $\beta = 0$?

$$\beta = \frac{1}{2} \|u\|_2^2 = 0 \rightarrow \|u\|_2^2 = 0 \rightarrow u = 0 \rightarrow$$

$$\rightarrow a_{rr} = k, a_{r+1r} = 0, \dots, a_{ir} = 0, \dots, a_{nr} = 0$$

Cum $a_{rr}=k$ și $\text{semn } k = -\text{semn } a_{rr}$ obținem:

$$a_{ir} = 0, \quad \forall i = r, \dots, n$$

adică avem coloana r deja în formă superior triunghiulară, se poate trece la pasul următor. În acest caz matricea A este singulară.

Ne interesează cum se efectuează operația $A = P_r A$ fără a face înmulțire matricială. Vom pune în evidență schimbările în raport cu coloanele.

$$\begin{aligned}
 (PA)e_j &= \text{noua col. } j \text{ a matr. } A = (I_n - \frac{1}{\beta} uu^T)(Ae_j) = \\
 &= Ae_j - \frac{1}{\beta}(uu^T)(Ae_j) = Ae_j - \frac{1}{\beta}u(u^T(Ae_j)) = \\
 &= Ae_j - \frac{\gamma_j}{\beta}u
 \end{aligned}$$

$$\gamma_j := u^T(Ae_j) = \left(\begin{array}{c} a_{1j} \\ a_{2j} \\ \vdots \\ a_{rj} \\ a_{r+1j} \\ \vdots \\ a_{nj} \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ a_{rr} - k \\ a_{r+1r} \\ \vdots \\ a_{nr} \end{array} \right)_{\mathbb{R}^n} =$$

$$= a_{rj}(a_{rr} - k) + \cdots + a_{ij}a_{ir} + \cdots + a_{nj}a_{nr} = \sum_{i=1}^n u_i a_{ij} = \sum_{i=r}^n u_i a_{ij}$$

$$(u_i = \mathbf{0}, i = 1, \dots, r-1, u_r = a_{rr} - k, u_i = a_{ir}, i = r+1, \dots, n)$$

Noua coloană j se obține din vechea coloană j din care scădem vectorul u înmulțit cu constanta γ_j . Ne interesează ca primelor $(r-1)$ coloane să nu li se schimbe forma superior triunghiulară deja obținută.

Pentru $j=1,\dots,(r-1)$ avem:

$$\begin{aligned} \gamma_j &:= u^T (Ae_j) = \left(\begin{array}{c} a_{1j} \\ a_{2j} \\ \vdots \\ a_{jj} \\ a_{j+1j} = 0 \\ \vdots \\ a_{rj} = 0 \\ \vdots \\ a_{nj} = 0 \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ a_{rr} - k \\ a_{r+1r} \\ \vdots \\ a_{nr} \end{array} \right)_{\mathbb{R}^n} = \\ &= a_{1j} \mathbf{0} + \dots + a_{jj} \mathbf{0} + \dots + 0(a_{rr} - k) + \dots + 0a_{ir} + \dots + 0a_{nr} = \mathbf{0} \end{aligned}$$

Din faptul că $\gamma_j = 0, j = 1, \dots, r-1$ rezultă că primele $(r-1)$ coloane ale matricei A nu se schimbă când facem operația $A = P_r A$, rămân în formă superior triunghiulară.

Algoritmul de trecere de la matricea A la matricea $P_r A$ este următorul:

$$(P_r A)e_j = \begin{cases} Ae_j & \text{pentru } j = 1, \dots, r-1 \\ (a_{1r}, a_{2r}, \dots, a_{r-1r}, k, 0, \dots, 0)^T & \text{pentru } j = r \\ Ae_j - \frac{\gamma_j}{\beta} u & \text{pentru } j = r+1, \dots, n \end{cases}$$

$$\gamma_j = (Ae_j, u)_{\mathbb{R}^n} = \sum_{i=r}^n u_i a_{ij}$$

$$u_i = 0, \quad i = 1, \dots, r-1, \quad u_r = a_{rr} - k, \quad u_i = a_{ir}, \quad i = r+1, \dots, n$$

Operația de transformare a vectorului termenilor liberi

$$b := P_r b:$$

$$P_r b = (I_n - \frac{1}{\beta} (uu^T))b = b - \frac{1}{\beta} (uu^T)b = b - \frac{1}{\beta} u (u^T b) = b - \frac{\gamma}{\beta} u$$

$$\gamma = u^T b = (b, u)_{\mathbb{R}^n} = \sum_{i=r}^n u_i b_i$$

Algoritmul lui Householder

$$\tilde{Q} = I_n;$$

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{calculează matricea } P_r \text{ (constanta } \beta \text{ și vectorul } u) \\ A = P_r * A; \\ b = P_r * b; \\ \tilde{Q} = P_r * \tilde{Q}; \end{array} \right.$$

La sfârșitul acestui algoritm, în matricea A vom avea matricea superior triunghiulară R , în vectorul b vom avea $Q^T b^{\text{init}}$, b^{init} este vectorul inițial al termenilor liberi, iar matricea \tilde{Q} va conține matricea Q^T din factorizarea QR a matricei A .

Algoritmul Householder detaliat

$$\tilde{Q} = I_n;$$

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

// construcția matricii P_r – constanta β și vectorul u

- $\sigma = \sum_{i=r}^n a_{ir}^2;$
- **if** ($\sigma \leq \varepsilon$) **break** ; *//* $r = r + 1 \leftrightarrow P_r = I_n$ (A singulară)
- $k = \sqrt{\sigma};$
- **if** ($a_{rr} > 0$) $k = -k;$
- $\beta = \sigma - k a_{rr};$
- $u_r = a_{rr} - k; \quad u_i = a_{ir}, i = r + 1, \dots, n;$

// $A = P_r * A$

// transformarea coloanelor $j = r + 1, \dots, n$

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

- * $\gamma = (\gamma_j / \beta) = (Ae_j, u) / \beta = (\sum_{i=r}^n u_i a_{ij}) / \beta;$

- * for $i = r, \dots, n$

- $a_{ij} = a_{ij} - \gamma * u_i;$

// transformarea coloanei r a matricii A

- $a_{rr} = k; a_{ir} = 0, i = r + 1, \dots, n;$

// $b = P_r * b$

- $\gamma = (\gamma / \beta) = (b, u) / \beta = (\sum_{i=r}^n u_i b_i) / \beta;$

- for $i = r, \dots, n$ $b_i = b_i - \gamma * u_i;$

$$// \tilde{Q} = P_r * \tilde{Q}$$

• for $j = 1, \dots, n$

$$* \gamma = (\tilde{Q}e_j, u) / \beta = \left(\sum_{i=r}^n u_i \tilde{q}_{ij} \right) / \beta;$$

* for $i = r, \dots, n$

$$\tilde{q}_{ij} = \tilde{q}_{ij} - \gamma * u_i;$$

Numărul de operații efectuate:

A (adunări, scăderi):

$$(n-1) + 2n(n-1) + \frac{n(n-1)(2n-1)}{3} = \frac{(n-1)(n+1)(2n+3)}{3} = \\ = \frac{2}{3}n^3 + O(n^2)$$

M (înmulțiri, împărțiri):

$$4(n-1) + 3n(n-1) + \frac{n(n-1)(2n-1)}{6} = \frac{2}{3}n^3 + O(n^2)$$

R (radicali): $(n-1)$

Algoritmul lui Givens

Fie A o matrice reală pătratică de dimensiune n . Pp. că avem:

$$A = QR$$

unde Q este o matrice ortogonală iar R este o matrice superior triunghiulară.

$$Ax = b \Leftrightarrow QRx = b \Leftrightarrow Q^T QRx = Q^T b \Leftrightarrow Rx = Q^T b$$

În cazul algoritmului Givens, pentru a aduce sistemul $Ax=b$ la forma $Rx = Q^T b$ se folosesc matricele de rotație. O matrice de rotație $R_{pq}(\theta) = (r_{ij})_{i,j=1,n}$ are următoarea formă :

$$R_{pq}(\theta) = \begin{pmatrix} & & & \overset{p}{\mathbf{0}} & & \overset{q}{\mathbf{0}} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} & \dots & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & & & & & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{c} & \dots & \mathbf{s} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & & & & \mathbf{1} & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & (-\mathbf{s}) & \dots & \mathbf{c} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & & & & & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{1} \end{pmatrix} \begin{matrix} \\ \\ \\ \\ p \\ q \\ \\ \end{matrix}$$

$$r_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{pentru } i = j, \quad i \neq p, i \neq q \\ c & \text{pentru } i = j, \quad i = p, i = q \\ s & \text{pentru } i = p, j = q \\ -s & \text{pentru } i = q, j = p \\ 0 & \text{în rest} \end{cases}$$

unde $p, q \in \{1, \dots, n\}$ iar c și s sunt două numere reale care satisfac relația $c^2 + s^2 = 1$. Constantele c și s pot fi alese astfel încât $c = \cos \theta$, $s = \sin \theta$. Se arată ușor, folosind relația $c^2 + s^2 = 1$, că matricea $R_{pq}(\theta)$ este ortogonală:

$$R_{pq}(\theta) R_{pq}^T(\theta) = R_{pq}^T(\theta) R_{pq}(\theta) = I_n$$

Calculul matricei:

$$\mathbf{B} = \mathbf{R}_{pq}(\theta)\mathbf{A},$$

\mathbf{B} se obține din \mathbf{A} modificând doar liniile p și q .

Fie

$$\mathbf{A}_i = \mathbf{e}_i^T \mathbf{A}, \text{ - linia } i \text{ a matricei } \mathbf{A}$$

$$\mathbf{B}_i = \mathbf{e}_i^T \mathbf{B} \text{ - linia } i \text{ a matricei } \mathbf{B}.$$

Liniile matricei \mathbf{B} :

$$\mathbf{B}_i = \mathbf{A}_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad i \neq p, i \neq q$$

$$\mathbf{B}_p = c\mathbf{A}_p + s\mathbf{A}_q$$

$$\mathbf{B}_q = -s\mathbf{A}_p + c\mathbf{A}_q$$

$$b_{pj} = c a_{pj} + s a_{qj} \quad , \quad j = 1, \dots, n$$

$$b_{qj} = -s a_{pj} + c a_{qj} \quad , \quad j = 1, \dots, n$$

$$b_{ij} = a_{ij} \quad \text{în rest}$$

Calculul matricei :

$$D = A R_{pq}^T(\theta),$$

D se obține din A modificând doar coloanele p și q .

Notăm Ae_j , De_j – coloana j a matricei A și respectiv D .

Coloanele matricei D :

$$D_j = A_j, \quad j = 1, \dots, n, \quad j \neq p, j \neq q$$

$$De_p = cAe_p + sAe_q$$

$$De_q = -sAe_p + cAe_q$$

$$d_{ip} = c a_{ip} + s a_{iq}, \quad i = 1, \dots, n$$

$$d_{iq} = -s a_{ip} + c a_{iq}, \quad i = 1, \dots, n$$

$$d_{ij} = a_{ij} \quad \text{în rest}$$

Algoritmul lui Givens se desfășoară în $(n-1)$ pași - la pasul r se transformă coloana r a matricei A în formă superior triunghiulară fără a modifica primele $(r-1)$ coloane.

Pasul 1

Intrare: matricea A , vectorul b

Ieșire: matricea $A^{(1)}$ (cu prima coloană în formă superior triunghiulară), $b^{(1)}$

Se efectuează următoarele operații de înmulțire cu matrice de rotație:

$$R_{1n}(\theta_{1n}) \cdots R_{13}(\theta_{13}) R_{12}(\theta_{12}) A = A^{(1)}$$

$$R_{1n}(\theta_{1n}) \cdots R_{13}(\theta_{13}) R_{12}(\theta_{12}) b = b^{(1)}$$

Unghiurile θ_{li} (constantele c_{li} și s_{li}) se aleg astfel ca elementul de pe poziția $(i, 1)$ din matricea rezultat să devină 0 .

Pasul r

Intrare: matricea $A^{(r-1)}$ (are primele $(r-1)$ coloane în formă superior triunghiulară), $b^{(r-1)}$

Ieșire: matricea $A^{(r)}$ (cu primele r coloane în formă superior triunghiulară), $b^{(r)}$

La acest pas matricea $A^{(r-1)}$ și vectorul $b^{(r-1)}$ se transformă astfel:

$$R_{rn}(\theta_{rn}) \cdots R_{ri}(\theta_{ri}) \cdots R_{rr+1}(\theta_{rr+1}) A^{(r-1)} = A^{(r)}$$

$$R_{rn}(\theta_{rn}) \cdots R_{ri}(\theta_{ri}) \cdots R_{rr+1}(\theta_{rr+1}) b^{(r-1)} = b^{(r)}$$

unde elementele $c = c_{ri}$ și $s = s_{ri}$ din matricele de rotație se aleg astfel ca după înmulțirea cu $R_{ri}(\theta_{ri}), i = r + 1, \dots, n$ elementul (i, r) să devină 0 .

Considerăm operația $B = R_{ri}(\theta_{ri})A$, unde θ_{ri} se alege astfel ca $b_{ir} = 0$:

$$b_{rj} = c a_{rj} + s a_{ij} ,$$

$$b_{ij} = -s a_{rj} + c a_{ij} , j = 1, \dots, n$$

$$(b_{kl} = a_{kl} \quad \text{în rest})$$

$$(j = r) \quad b_{ir} = -s a_{rr} + c a_{ir}$$

Cea mai simplă alegere pentru c și s astfel ca să obținem $b_{ir}=0$ este:

$$c = f a_{rr} \quad , \quad s = f a_{ir} \quad ,$$

$$f \text{ ales astfel ca } c^2 + s^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad f = \frac{1}{\sqrt{a_{rr}^2 + a_{ir}^2}}$$

$$c = \frac{a_{rr}}{\sqrt{a_{rr}^2 + a_{ir}^2}} \quad , \quad s = \frac{a_{ir}}{\sqrt{a_{rr}^2 + a_{ir}^2}}$$

$$\sqrt{a_{rr}^2 + a_{ir}^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad a_{rr} = a_{ir} = 0 \quad \Rightarrow \quad c = 1 \quad , \quad s = 0$$

$$(R_{ir}(\theta) = I_n)$$

Deci elementul de pe poziția (i, r) este deja nul. Nu avem ce schimba în matricea A .

Operația $B = R_{ri}(\theta_{ri})A$, nu afectează forma superior triunghiulară a primelor $(r-1)$ coloane. În matricea B aceste coloane vor continua să fie în formă superior triunghiulară.

$$b_{rj} = c a_{rj} + s a_{ij} = 0, \quad b_{ij} = -s a_{rj} + c a_{ij} = 0, \quad j = 1, \dots, r-1$$

$$\text{deoarece } a_{rj} = a_{ij} = 0$$

Înmulțirea $B = R_{ri}(\theta_{ri})A$ nu schimbă decât liniile r și i ale matricei B . În concluzie, operația $B = R_{ri}(\theta_{ri})A$ nu schimbă elementele nule deja obținute, ci doar face ca elementul de pe poziția (i, r) să devină 0 .

Algoritmul lui Givens poate fi descris astfel:

$$R_{n-1n}(\theta_{n-1n}) \cdots R_{rn}(\theta_{rn}) \cdots R_{r+1}(\theta_{r+1}) \cdots R_{1n}(\theta_{1n}) \cdots R_{12}(\theta_{12}) A = R$$

$$R_{n-1n}(\theta_{n-1n}) \cdots R_{rn}(\theta_{rn}) \cdots R_{r+1}(\theta_{r+1}) \cdots R_{1n}(\theta_{1n}) \cdots R_{12}(\theta_{12}) b = \bar{b} = Q^T b$$

Notăm cu \tilde{Q} următoarea matrice:

$$\tilde{Q} = R_{n-1n}(\theta_{n-1n}) \cdots R_{rn}(\theta_{rn}) \cdots R_{r+1}(\theta_{r+1}) \cdots R_{1n}(\theta_{1n}) \cdots R_{12}(\theta_{12})$$

Matricea \tilde{Q} este matrice ortogonală ca produs de matrice ortogonale. Descompunerea QR a matricei A este următoarea:

$$\tilde{Q} A = R \quad (\tilde{Q}^{-1} = \tilde{Q}^T) \Rightarrow A = \tilde{Q}^T R = QR$$

$$\begin{aligned} Q = \tilde{Q}^T &= \left(R_{n-1n}(\theta_{n-1n}) \cdots R_{rn}(\theta_{rn}) \cdots R_{r+1}(\theta_{r+1}) \cdots R_{1n}(\theta_{1n}) \cdots R_{12}(\theta_{12}) \right)^T \\ &= R_{12}^T(\theta_{12}) \cdots R_{1n}^T(\theta_{1n}) \cdots R_{r+1}^T(\theta_{r+1}) \cdots R_{rn}^T(\theta_{rn}) \cdots R_{n-1n}^T(\theta_{n-1n}) \end{aligned}$$

Pe scurt, *algoritmul lui Givens* este următorul:

$$\begin{aligned} & \tilde{Q} = I_n; \\ & \text{for } r = 1, \dots, n-1 \\ & \quad \text{for } i = r+1, \dots, n \\ & \quad \quad \left\{ \begin{array}{l} A = R_{ri}(\theta_{ri}) * A; \\ b = R_{ri}(\theta_{ri}) * b; \\ \tilde{Q} = R_{ri}(\theta_{ri}) * \tilde{Q}; \end{array} \right. \end{aligned}$$

$$\tilde{Q} = I_n;$$

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

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

// construcția matricii $R_{ri}(\theta_{ri})$ – constantele c și s

- $f = \sqrt{a_{rr}^2 + a_{ir}^2};$

- if ($f \leq \varepsilon$) { $c = 1; s = 0;$ } // $R_{ri}(\theta_{ri}) = I$

- else { $c = a_{rr} / f ; s = a_{ir} / f ;$ }

// $A = R_{ri}(\theta_{ri}) * A$

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

$$\begin{cases} a_{rj} = c * a_{rj} + s * a_{ij}; \\ a_{ij} = -s * a_{rj}^{vechi} + c * a_{ij}; \end{cases}$$

- $a_{ir} = 0$; $a_{rr} = f$;

// $b = R_{ri}(\theta_{ri}) * b$

- $b_r = c * b_r + s * b_i$;

- $b_i = -s * b_r^{vechi} + c * b_i$;

// $\tilde{Q} = R_{ri}(\theta_{ri}) * \tilde{Q}$

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

$$\begin{cases} \tilde{q}_{rj} = c * \tilde{q}_{rj} + s * \tilde{q}_{ij}; \\ \tilde{q}_{ij} = -s * \tilde{q}_{rj}^{\sim vechi} + c * \tilde{q}_{ij}; \end{cases}$$

La sfârșitul acestui algoritm, în matricea A vom avea matricea superior triunghiulară R , în vectorul b vom avea $\tilde{Q}b^{\text{init}}$ (b^{init} - vectorul termenilor liberi inițial), iar matricea \tilde{Q} va conține matricea Q^T din factorizarea QR a matricei A .
 Numărând operațiile efectuate (exceptând calculul matricei \tilde{Q}) obținem:

$$\frac{n(n-1)}{2} \text{ radicali}$$

$$\frac{n(n-1)(4n+7)}{6} = \frac{2}{3}n^3 + O(n^2) - \text{adunări/scăderi}$$

$$\frac{2n(n-1)(2n+5)}{3} = \frac{4}{3}n^3 + O(n^2) \text{ înmulțiri/împărțiri}$$

***QR* – algoritmul Gram Schmidt**

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

$$A = QR$$

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

$a^j = A e_j$ – coloana j a matricei A

$q^j = Q e_j$ – coloana j a matricei Q

Relația (1) poate fi rescrisă astfel:

$$\left\{ \begin{array}{l} r_{11}q^1 = a^1 \\ r_{12}q^1 + r_{22}q^2 = a^2 \\ \vdots \\ r_{1p}q^1 + \cdots + r_{jp}q^j + \cdots + r_{pp}q^p = a^p \\ \vdots \\ r_{1n}q^1 + \cdots + r_{jn}q^j + \cdots + r_{nn}q^n = a^n \end{array} \right. \quad (2)$$

Algoritmul de calcul al descompunerii QR cu metoda Gram-Schmidt se desfășoară în n pași, la fiecare pas calculându-se:

- coloana p din matricea R
- coloana p din matricea Q

Avem:

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

Pasul 1

Se folosește prima ecuație a sistemului (2)

$$\mathbf{r}_{11}\mathbf{q}^1 = \mathbf{a}^1$$

Se face produsul scalar al acestei ecuații cu vectorii \mathbf{q}^1 și \mathbf{a}^1 . Se folosește proprietatea coloanelor matricelor ortogonale:

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

$$\mathbf{q}^1 = \frac{1}{r_{11}}\mathbf{a}^1 \quad \text{și} \quad \|\mathbf{q}^1\|_2 = 1$$

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

Pasul p

Se folosește ecuația 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 q^1, q^2, \dots, q^{p-1} . Se face, pe rând, produsul scalar al acestei ecuații cu vectorii:

$$q^1, q^2, \dots, q^{p-1}$$
$$q^p \text{ și } a^p.$$

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

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

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

Avem:

$$q^p = \frac{1}{r_{pp}} (a^p - r_{1p} q^1 - \dots - r_{p-1p} q^{p-1})$$

$$\|q^p\|_2^2 = 1 = \frac{1}{r_{pp}^2} \|(a^p - r_{1p} q^1 - \dots - r_{p-1p} q^{p-1})\|_2^2$$

Obținem:

$$\mathbf{r}_{pp} = \pm \left\| \mathbf{a}^p - \mathbf{r}_{1p} \mathbf{q}^1 - \cdots - \mathbf{r}_{p-1p} \mathbf{q}^{p-1} \right\|_2$$

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

Algoritmul Gram Schmidt modificat

for $i = 1, n$

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

for $i = 1, n$

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

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

for $j = (i + 1), n$

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

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

$$\mathbf{M}: \frac{(n^3 + 3n^2)}{2}$$

$$\mathbf{A}: \frac{(n^3 + n^2 - 2)}{2}$$