

Tema nr. 2

Date n dimensiunea sistemului, ϵ - precizia calculelor, matricea pătratică cu elemente reale $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, vectorul termenilor liberi $b \in \mathbb{R}^n$ să se implementeze algoritmul de eliminare Gauss cu pivotare parțială.

- Folosind algoritmul de eliminare Gauss cu pivotare parțială, să se decidă dacă matricea A este singulară sau nu și în caz că matricea A este nesingulară, utilizând metoda substituției inverse, să se aproximeze soluția sistemului, x_{Gauss} :

$$Ax = b. \quad (1)$$

- Fie x_{Gauss} soluția aproximativă calculată. Să se verifice soluția afișând următoarea normă:

$$\|A^{init}x_{Gauss} - b^{init}\|_2$$

A^{init} și b^{init} sunt datele inițiale, nu cele modificate pe parcursul algoritmului. Am notat cu $\|\cdot\|_2$ norma Euclidiană. Această normă ar trebui să fie mai mică decât 10^{-6} , dacă ați implementat corect metoda eliminării Gauss.

- Folosindu-se una din bibliotecile menționate în pagina laboratorului, să se calculeze și să se afișeze soluția sistemului $Ax = b$ și inversa matricei A , x_{bibl} și A_{bibl}^{-1} . Să se afișeze următoarele norme:

$$\|x_{Gauss} - x_{bibl}\|_2$$

$$\|x_{Gauss} - A_{bibl}^{-1}b^{init}\|_2.$$

Aceste norme ar trebui să fie mai mici decât 10^{-6} .

- Folosind algoritmul de eliminare Gauss, calculați o aproximare a inversei acestei matrice, A_{Gauss}^{-1} . Să se afișeze:

$$\|A_{Gauss}^{-1} - A_{bibl}^{-1}\|$$

Folosiți orice normă matriceală este implementată în bibliotecă.

Scrieți programul astfel încât să poată fi testat (și) pe sisteme de dimensiuni mai mari decât 100.

Bonus (25pt): Să se adapteze algoritmul de eliminare Gauss cu pivotare parțială pentru matrice tridiagonale de forma:

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ c_1 & a_2 & b_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_2 & a_3 & b_3 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & c_{n-2} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & c_{n-1} & a_n \end{pmatrix}$$

Să se calculeze soluția sistemului $Ax = g$. La sfârșitul rulării algoritmului de eliminare Gauss pentru matrice tridiagonală, se ajunge la o matrice de forma:

$$R = \begin{pmatrix} d_1 & e_1 & f_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & e_2 & f_2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & d_{n-2} & e_{n-2} & f_{n-2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & d_{n-1} & e_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & d_n \end{pmatrix}$$

La aplicarea algoritmului de eliminare Gauss, să se lucreze doar cu cei 6 vectori a, b, c, d, e, f .

Observație

Precizia calculelor ϵ , este un număr pozitiv de forma:

$$\epsilon = 10^{-m} (\text{cu } m = 5, 6, \dots, 10, \dots \text{ la alegere})$$

valoare care este dată de intrare în program (se citește de la tastatură sau din fișier) la fel ca și dimensiunea n a datelor. Acest număr se folosește atunci când testăm dacă o variabilă este 0 sau nu înaintea unei operații de împărțire.

Dacă vrem să efectuăm operația de împărțire $s = \frac{1.0}{v}$ unde $v \in \mathbb{R}$ nu vom scrie:

$$\text{if}(v! = 0) \ s = 1/v;$$

```
else print(" nu se poate face impartirea");
```

ci vom scrie în program:

```
if(abs(v) > eps) s = 1/v;
else print(" nu se poate face impartirea");
```

Metoda substituției inverse

Fie sistemul liniar:

$$Ax = b \quad (2)$$

unde matricea sistemului A este triunghiulară superior . Pentru a găsi soluția unică a sistemului (2), trebuie ca matricea să fie nesingulară. Determinantul matricelor triunghiulare este dat de formula:

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

Prin urmare, pentru rezolvarea sistemului (2) vom presupune că:

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

Vom considera sistemul liniar (2) cu matrice superior triunghiulară:

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

Necunoscutele x_1, x_2, \dots, x_n se deduc pe rând, folosind ecuațiile sistemului de la ultima către prima. Din ultima ecuație, deducem valoarea lui x_n :

$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}} \quad (3)$$

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

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

Continuăm să calculăm valori x_i din ecuațiile sistemului:

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

Din prima ecuație găsim valoarea lui x_1 :

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

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

$$x_i = \frac{(b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j)}{a_{ii}} \quad , \quad i = n, n-1, \dots, 2, 1 \quad (4)$$

Algoritmul de eliminare Gauss

Ideea de rezolvare este de a transforma succesiv sistemul (1) folosind operații elementare (ce nu modifică soluția sistemului) și a aduce matricea A la o formă superior triunghiulară. Algoritmul se desfășoară în $(n-1)$ pași. La un pas l oarecare se transformă coloana l a matricei A în formă superior triunghiulară fără a modifica forma triunghiulară a primelor $(l-1)$ coloane.

Pas l : Presupunem că elementul de pe poziția (l, l) numit și element pivot este nenul, $a_{ll} \neq 0$. Pentru $i = l+1, \dots, n$ se înmulțește linia l a matricei A cu $(-a_{il}/a_{ll})$ și se adună la linia i . Schimbare se face și asupra componentei i a vectorului b . Matricea A și vectorul b se modifică astfel:

$$a'_{ij} = a_{ij} - \frac{a_{il}}{a_{ll}}a_{lj} \quad , \quad i = \overline{l+1, n} \quad , \quad j = \overline{l+1, n} \quad (5)$$

$$b'_i = b_i - \frac{a_{il}}{a_{ll}}b_l \quad , \quad i = \overline{l+1, n} \quad , \quad (6)$$

$$a'_{il} = 0 \quad , \quad i = \overline{l+1, n} \quad , \quad (7)$$

$$a'_{ij} = a_{ij} \quad , \quad b'_i = b_i \quad \text{pentru restul indicilor } i, j$$

În formula (5) factorul $f = \frac{a_{il}}{a_{ll}}$ se calculează în afara buclei *for* pentru j .

Alegerea pivotului $a_{ll} \neq 0$ ($|a_{ll}| > \epsilon$)

Pentru a aduce pe poziția (l, l) un element nenul avem trei posibilități:

1. Varianta *fără pivotare*

Se alege primul indice $i_0 \in \{l, l+1, \dots, n\}$ astfel ca $a_{i_0 l} \neq 0$. Se interschimbă liniile i_0 și l ale matricei A și componentele i_0 și l ale vectorului b .

2. Varianta cu *pivotare parțială*

Se alege indicele $i_0 \in \{l, l+1, \dots, n\}$ astfel ca:

$$|a_{i_0 l}| = \max\{|a_{il}|, i = \overline{l, n}\}.$$

Se interschimbă liniile i_0 și l ale matricei A și componentele i_0 și l ale vectorului b .

3. Varianta cu *pivotare totală*

Se aleg indicii $i_0, j_0 \in \{l, l+1, \dots, n\}$ astfel ca:

$$|a_{i_0 j_0}| = \max\{|a_{ij}|, i = \overline{l, n}, j = \overline{l, n}\}.$$

Se interschimbă liniile i_0 și l , coloanele j_0 și l ale matricei A și componentele i_0 și l ale vectorului b .

Dacă după efectuarea pivotării (indiferent de varianta de pivotare aleasă) elementul pivot este nul

$$a_{ll} = 0 \quad \sim \quad \text{abs}(a[l, l]) \leq \epsilon$$

atunci matricea A **este singulară**.

Observații:

1) În pasul Gauss l (5)+(6)+(7) calculele se pot efectua în matricea A inițială ($a' = a$).

2) Dacă pentru memorarea matricei A și a vectorului b se folosește o matrice cu n linii și $(n+1)$ coloane, vectorul b fiind memorat în coloana $(n+1)$ a matricei A , calculele (6) sunt incluse în (5) pentru $j = n+1$; se simplifică și interschimbarea liniilor i_0 și l .

3) Dacă pivotul se alege folosind varianta a 3-a, cu pivotare totală, la final trebuie să avem grijă să restabilim ordinea inițială a componentelor vectorului soluție (ținând cont de coloana j_0 a pivotului de la fiecare pas).

Algoritmul de eliminare Gauss (varianta 1) :

```
     $l = 1;$   
    caută_pivot();  
    interschimba_linii(); // (dacă e cazul)  
    while ( $l \leq n - 1$ ) and ( $|a_{ll}| > \epsilon$ ) do  
        begin  
            (5)+(6)+(7);  
             $l = l + 1;$   
            caută_pivot();  
            interschimba_linii(); // (dacă e cazul)  
        end  
    if  $|a_{ll}| \leq \epsilon$  then print('matrice singulara');  
    else  
        begin  
            rezolvă_sistem_superior_triunghiular();  
            // (se folosește metoda substituției inverse)  
            verifică_soluție();  
        end
```

Algoritmul de eliminare Gauss (varianta 2):

(Vectorul b este memorat în coloana $n + 1$ a matricei A și factorii care se folosesc pentru aducerea la forma superior triunghiulară se memorează în partea strict inferior triunghiulară a matricei A)

```
l = 1;
cauta_pivot();
interschimba_linii(); // (dacă e cazul)
while (l ≤ n - 1) and (|all| > ε) do
  begin
    for i = l + 1, ..., n
      ail =  $\frac{a_{il}}{a_{ll}}$ ;
    for j = l + 1, ..., n + 1
      // j = n + 1 corespunde transformării vectorului b
      aij = aij - ailalj;
    l = l + 1;
    cauta_pivot();
    interschimba_linii(); // (dacă e cazul)
  end
if |all| ≤ ε then print('matrice singulara');
else
  begin
    rezolva_sistem_superior_triunghiular();
    // (se folosește metoda substituției inverse)
    verifica_solutie();
  end
end
```

Calculul unei aproximări a inversei unei matrice

Dacă se cunoaște o metodă numerică de rezolvare a sistemelor liniare (în cazul de față se va folosi algoritmul de eliminare Gauss), coloanele matricei inverse se pot aproxima rezolvând n sisteme liniare.

Coloana j a matricei A^{-1} se aproximează rezolvând sistemul liniar:

$$Ax = e_j, \quad j = 1, 2, \dots, n, \\ e_j = (0, \dots, 1, 0, \dots, 0)^T, \quad 1 \text{ este pe poziția } j \text{ în vectorul } e_j$$

Procedura de calcul a matricei A_{Gauss}^{-1} este următoarea:

- Se calculează eliminarea Gauss a matricei extinse $[A, I_n] \in \mathbb{R}^{n \times 2n}$ (I_n este matricea unitate de dimensiune n). Se adaptează varianta a 2-a a algoritmului de eliminare Gauss cu pivotare parțială, astfel încât să modifice toate coloanele matricei I_n simultan, împreună cu transformarea matricei A în formă superior triunghiulară. În varianta a 2-a a algoritmului descrisă mai sus se face transformarea Gauss a matricei $[A, b] \in \mathbb{R}^{n \times (n+1)}$.

La final, matricea va avea următoarea formă $[R, I_{transform}]$ unde R este forma superior triunghiulară a matricei A iar $I_{transform}$ este matricea I_n modificată conform algoritmului de eliminare Gauss.

- for $j = 1, \dots, n$
 1. b =coloana j a matricei $I_{transform}$;
 2. se rezolvă sistemul superior triunghiular $Rx = b$, folosind metoda substituției inverse, se obține soluția x^* (x^* este soluția sistemului liniar $Ax = e_j$);
 3. se memorează x^* în coloana j a matricei A_{Gauss}^{-1} ;

Procedura de mai sus detaliază, în fapt, rezolvarea numerică a ecuației matriceale:

$$AX = I_n, \quad X \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad I_n = \text{matricea unitate.}$$

Exemplu

Sistemul liniar:

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 4 & 4 & 6 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 5 \\ 1 \\ 14 \end{pmatrix}$$

are soluția $x = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

După aplicarea algoritmului de eliminare Gauss cu pivotare parțială (a doua variantă), matricea extinsă

$$[A, b] = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 & 5 \\ 0 & 2 & 1 & 1 \\ 4 & 4 & 6 & 14 \end{pmatrix}$$

devine:

$$\begin{pmatrix} 4 & 4 & 6 & 14 \\ 0 & 2 & 1 & 1 \\ 0.5 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

Sistemul superior triunghiular $Rx = b_{transformat}$ echivalent cu sistemul inițial este:

$$\begin{pmatrix} 4 & 4 & 6 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 14 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Matricea $[A, I_3]$:

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 4 & 4 & 6 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

devine:

$$\begin{pmatrix} 4 & 4 & 6 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0.5 & -1 & -1 & 1 & 1 & -0.5 \end{pmatrix}.$$

Pentru găsirea coloanelor matricei A^{-1} trebuie rezolvate următoarele 3 sisteme superior triunghiulare:

$$\begin{pmatrix} 4 & 4 & 6 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{coloana 1 a matricei } A^{-1},$$

$$\begin{pmatrix} 4 & 4 & 6 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{coloana a 2-a a matricei } A^{-1},$$

$$\begin{pmatrix} 4 & 4 & 6 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -0.5 \end{pmatrix} \quad \text{coloana a 3-a a matricei } A^{-1}.$$

Inversa matricei A este:

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0.5 & -0.25 \\ 0.5 & 1 & -0.25 \\ -1 & -1 & 0.5 \end{pmatrix}.$$