Computació Numèrica

Sistemes d'equacions lineals. (II) Mètodes iteratius. (III) Mínims quadrats.

M. Àngela Grau Gotés

Departament de Matemàtica Aplicada II
Universitat Politècnica de Catalunya · BarcelonaTech.

3 de març de 2020

drets d'autor

"Donat el caràcter i la finalitat exclusivament docent i eminentment il·lustrativa de les explicacions a classe d'aquesta presentació, l'autor s'acull a l'article 32 de la Llei de propietat intel·lectual vigent respecte de l'ús parcial d'obres alienes com ara imatges, gràfics o altre material contingudes en les diferents diapositives"

Índex

MATLAB®

Conceptes generals

`Matlab` treballa essencialment només amb un tipus d'objecte, una matriu rectangular de nombres reals o complexes.

En particular, per matrius d'una fila o columna parlarem de vectors.

Matrius

Una matriu s'obté entrant la llista explícita dels seus elements, separats per blancs o comes, fent servir punt i coma per acabar una fila, i entre claudàtors.

$\gg$ `A = [1 1; 2 2]`

Podem fer referència als elements de la matriu,

$\gg$ A(2,2) ens retorna 2,

i modificar el seu valor si així convé $\gg$ A(2,2)=5.

Les matrius no s'han de dimensionar, això permet d'afegir files ($\gg$ `A=[A;3 3]`) o treure-les-en ($\gg$ `A=A(1:2,:)`) i retornem a la matriu `A` inicial.

Com definir una matriu?

a) Per la llista explícita dels seus elements.
b) Fent ús de funcions predefinides en `Matlab`:

   `rand` , `randn` , `zeros` , `eye` , `ones` , `magic` , `hilbert` , `diag`.
c) Llegint dades des d'un fitxer extern.
d) Executant un `script` definit per nosaltres.

Per practicar...

Exercici 1 Definiu la matriu $U = (u_{ij})_{15\times 15}$ i el vector $b = (b_i)_{15\times 1}$ com

$$u_{ij} = \begin{cases} \cos(ij) & i \leq j\,, \\ 0 & i > j\,, \end{cases} \qquad \text{i} \qquad b_i = \tan(i)\,.$$

Exercici 2 Definiu la matriu $L = (u_{ij})_{20\times 20}$ i el vector $b = (b_i)_{20\times 1}$ com

$$l_{ij} = \begin{cases} i + j & i \geq j\,, \\ 0 & i < j\,, \end{cases} \qquad \text{i} \qquad b_i = i\,.$$

Funcions matricials

a) La trasposada d'una matriu `A`, s'obté per `A'`.
b) La inversa d'una matriu `A`, s'obté per `inv(A)`.
c) La diagonal d'una matriu `A`, s'obté per `diag(A)`.
d) El determinant d'una matriu `A`, s'obté per `det(A)`.
e) `rank(A)` és el rang d'una matriu `A`.
f) `norm(A)` és la norma d'una matriu `A`.
g) `norm(v)` és el mòdul d'un vector `v`.

Funcions predefinides

a) `A\b` , solució del sistema $Ax = b$.

b) `[L,U,P]=lu(A)` , factorització $PA = LU$.

c) `L=chol(A)` , factorització $A = LL'$.

d) `[Q,R]=qr(A)` , factorització $A = QR$.

e) `[V,D]=eig(A)` , vectors i valors propis.

f) `[S,V,D]=svd(A)` , descompossició en valors singulars.

g) Parts d'una matriu:

- superior `triu(A)` ,
- inferior `tril(A)` ,
- diagonal `diag(A)` .

Per practicar...

Exercici 3 Per a les matrius

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 0 & 4 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -2 & 6 \end{pmatrix} \quad \text{i} \quad C = \begin{pmatrix} 2 & -5 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}.$$

Comproveu les igualtats següents:

a) $(AB)C = A(BC)$,

b) $A(B + C) = AB + AC$,

c) $(AB)^t = B^t A^t$.

d) $(A + B)C = AC + BC$.

Sistemes d'equacions lineals

Mètodes iteratius

Mètodes iteratius

MATLAB®

- ✓ `D=diag(diag(A));` Diagonal de la matriu A.
- ✓ `d=diag(1 ./diag(A))` Inversa de la diagonal de A.
- ✓ `L=tril(A,-1)` Part triangular inferior de la matriu A.
- ✓ `U=triu(A,1)` Part triangular superior de la matriu A.

Mètode de Jacobi

$$Ax = b \Longleftrightarrow x^{k+1} = B_J\, x^k + c_J\,, \quad \forall\; k \geq 0\,.$$

✓ $B_J = -D^{-1}(L+U)$	Matriu d'iteració del mètode.
✓ $c_J = D^{-1}b$	Vector d'iteració del mètode.
✓ $\rho(B_J) < 1$	Convergència a priori.
✓ $\|x^{k+1} - x^k\| < \epsilon$	Convergència a posteriori.

Mètode de Gauss-Seidel

$$Ax = b \Longleftrightarrow x^{k+1} = B_{GS}\, x^k + c_{GS}\,, \quad \forall\ k \geq 0\,.$$

- ✓ $C = (L + D)^{-1}$ Matriu auxiliar del mètode.
- ✓ $B_{GS} = -C\ U$ Matriu d'iteració del mètode.
- ✓ $c_{GS} = C\ b$ Vector d'iteració del mètode.
- ✓ $\rho(B_{GS}) < 1$ Convergència a priori.
- ✓ $\|x^{k+1} - x^k\| < \epsilon$ Convergència a posteriori.

Mètodes de relaxació - variant JACOBI

Són una generalització dels dos mètodes estudiats; sumem i restem x_i^k en l'expressió del mètode de Jacobi,

$$x_{Ji}^{k+1} = x_i^k + \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j^k\right) k \geq 0\,.$$

$$x_i^{k+1} = \omega x_{Ji}^{k+1} + (1-\omega) x_i^k \quad k \geq 0\,.$$

- ✓ $C = D^{-1}$ Matriu auxiliar.
- ✓ $B_{sor} = C\left((1-\omega)D - \omega(L+U)\right)$ Matriu d'iteració.
- ✓ $c_{sor} = \omega\ C\ b$ Vector d'iteració.

Mètodes de relaxació - variant SEIDEL

Són una generalització dels dos mètodes estudiats; sumem i restem x_i^k en l'expressió del mètode de Jacobi,

$$x_{Si}^{k+1} = x_i^k + \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^k \right) k \geq 0 \,.$$

$$x_i^{k+1} = \omega x_{Si}^k + (1-\omega) x_i^k \quad k \geq 0 \,.$$

- ✓ $C = (D + \omega L)^{-1}$ Matriu auxiliar.
- ✓ $B_{sor} = C\left((1-\omega)D - \omega U\right)$ Matriu d'iteració.
- ✓ $c_{sor} = \omega \; C \; b$ Vector d'iteració.

Pràctica 1

Mètodes de Jacobi, de Gauss - Seidel i de relaxació

Exercici Escriviu un programa que implementi els esquemes iteratius dels mètodes descrits en aquest document. Proveu-lo per:

$$(A\,|\,b) = \left(\begin{array}{ccc|c} 4 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 4 & 4 \end{array}\right)$$

"Si el mètode de Jacobi és convergent i el mètode de Gauss-Seidel també, Gauss-Seidel és més ràpid"

Pràctica 2

Convergéncia mètodes iteratius

Exercici Introduiu un test de convergència per als algoritmes de Jacobi, Gauss - Seidel i relaxació. Proveu-lo per

$$\text{a) } (A\,|\,b) = \left(\begin{array}{rrrr|r} 10 & -7 & 0 & 1 & 7 \\ -3 & 2 & 6 & 0 & 4 \\ 5 & -1 & 5 & 0 & 6 \\ -1 & 0 & 2 & -1 & -3 \end{array}\right)$$

$$\text{b) } (A\,|\,b) = \left(\begin{array}{rrrr|r} 6 & -2 & 2 & 4 & 0 \\ 12 & -8 & 4 & 10 & -10 \\ 3 & -13 & 3 & 3 & -39 \\ -6 & 4 & 2 & -18 & -16 \end{array}\right).$$

Exercici 1

Exercici Resoleu pel mètode de Jacobi i de Gauss-Seidel els sistemes $Ax = b$ donat per

$$A = \begin{pmatrix} 10 & -1 & 2 & 0 \\ -1 & 11 & -1 & 3 \\ 2 & -1 & 10 & -1 \\ 0 & 3 & -1 & 8 \end{pmatrix} \qquad b = \begin{pmatrix} 6 \\ 25 \\ -11 \\ 15 \end{pmatrix}$$

prenent $x^{(0)} = (0\,,0\,,0\,,0)^\top$ i una tolerància $0.5 \cdot 10^{-12}$. Quantes iteracions calen?

Calculeu els errors $\delta^k = ||x^k - x^{k-1}||$ i estudieu δ^k/δ^{k-1}.

Exercici 2

Determineu el factor w òptim per a resoldre

$$\left\{\begin{array}{rcrcrcrcl} x & + & y & + & z & & & = & 2 \\ x & & & + & z & + & 2t & = & 3 \\ x & + & y & & & + & t & = & 4 \\ -x & + & y & - & z & + & t & = & 1 \end{array}\right.$$

fent ús dels mètode de sobrerelaxació variants de Jacobi i de Gauss-Seidel. Feu un estudi per $0 < \omega < 2$. Presenteu els resultats en una taula.

Exercici 3

Resoleu pel mètodes de classe el sistema $Ax = b$ donat per

$$A = \begin{pmatrix} 15 & -5 & 0 & -5 \\ -5 & 12 & -2 & 0 \\ 0 & -2 & 6 & -2 \\ -5 & 0 & -2 & 9 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} -3.45 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad x^* = \begin{pmatrix} 0.14 \\ 0.95 \\ 0.37 \\ 0.16 \end{pmatrix}$$

prenent $x^{(0)} = (0\,,0\,,0\,,0)^\top$ i una tolerància $0.5 \cdot 10^{-12}$. Quantes iteracions calen?

Calculeu els errors $e^k = ||x^k - x^*||$, $\delta^k = ||x^k - x^{k-1}||$.
Estudieu e^k/e^{k-1} i δ^k/δ^{k-1}.

Autoavaluació

Exercici Feu servir $(0.33116, 0.70000)^t$ com a punt inicial per resoldre pel mètode de Gauss-Seidel el sistema $Ax = b$. Què passa?

$$A = \begin{pmatrix} 0.96326 & 0.81321 \\ 0.81321 & 0.68654 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 0.88824 \\ 0.74988 \end{pmatrix}.$$

Sistemes d'equacions lineals

Mínims quadrats

Equacions normals

$Ax = b\,,\quad$ m files i n incògnites amb rang(A)=n :

- ✓ $A'AX = A'b$ Equacions normals.
- ✓ $RX = Q'b$ Solució per factorització.
- ✓ $\|b - AX\|_2$ Residu mínim.
- ✓ $||Y - \hat{Y}||_2$ Estimació error.

Pràctica 3

Equacions normals

Exercici Determineu la solució d'error quadràtic mínim per al sistema lineal:

$$\left\{\begin{array}{rcrcrcrcr} x & + & y & + & z & & & = & 2 \\ x & & & + & z & + & 2t & = & 3 \\ x & + & y & & & + & t & = & 4 \\ & - & y & + & 2z & & & = & 2 \\ -x & + & y & - & z & + & t & = & 1 \end{array}\right.$$

1. Escriviu el sistema lineal de la forma $Ax = b$. Escriviu les equacions normals en forma matricial $Bx = c$.
2. Doneu la solució de les equacions normals. Quin mètode de resolució feu servir per al sistema de les equacions normals.
3. Calculeu el vector residu en la solució. Comproveu que $(0, -1, 2, -1)^t$ té residu més gran.

Pràctica 4

Ajust per paràbola

Exercici Determineu una funció quadràtica que satisfaci al màxim (error quadràtic mínim) la taula següent:

X	8	10	12	16	20	40
Y	0.88	1.22	1.64	2.72	3.96	11.96

1. Escriviu el sistema lineal associat al problema. Escriviu les equacions normals en forma matricial $Bx = c$.
2. Doneu la solució de les equacions normals. Expliqueu el mètode de resolució que feu servir.
3. Representeu les dades i la funció quadràtica obtinguda en un mateix gràfic.

Pràctica 5

Sistema d'equacions sobredeterminat

Exercici Els pesos atòmics de l'oxigen i del nitrogen són aproximadament $O = 16$ i $N = 14$; utilitzeu els pesos moleculars dels sis òxids de nitrogen donats a continuació per tal d'ajustar els pesos atòmics per mínims quadrats

Compost	NO	N_2O	NO_2	N_2O_3	N_2O_5	N_2O_4
Pes molecular	30.006	44.013	46.006	76.012	108.010	92.011

1. Plantejeu el problema com un sistema lineal. Escriviu el sistema lineal de la forma $Ax = b$. Estudieu si té solució.
2. Escriviu les equacions normals associades a la resolució per mínims quadrats, en forma matricial $Bx = c$. Determineu la solució de les equacions normals.
3. Calculeu el vector residu en la solució. Comproveu que $O = 16$ i $N = 14$ té residu més gran.

Pràctica 6

Corba amb millor ajust

Exercici

X	0.25	0.50	0.75	1.00	1.25	1.50	1.75
Y	0.40	0.50	0.90	1.28	1.60	1.66	2.02

Empreu una tècnica de mínims quadrats per ajustar la taula de dades a funcions del tipus:

1. $y = a_0 + a_1 x$. Determineu a_0 i a_1, doneu l'equació de la funció obtinguda i calculeu el vector residu en la solució.
2. $y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4$. Determineu a_0, a_1, a_2, a_3 i a_4, doneu l'equació de la funció obtinguda i calculeu el vector residu en la solució.
3. $y = a x^{\alpha}$. Determineu a i α, doneu l'equació de la funció obtinguda i calculeu el vector residu en la solució.
4. Quin dels tipus sembla el més adient. Per què?

Guies de MATLAB

- MathWorks Documentation Center, Matlab Users's Guide online
- MathWorks Documentation Center, Matlab Functions's Guide online
- MathWorks Documentation Center, Matlab Users's Guide in pdf
- MathWorks Documentation Center, Tutorials