Computació Numèrica

Part 2.1 - Resolució de sistemes lineals

M. Àngela Grau Gotés

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

17 de febrer 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

Àlgebra Lineal Numèrica

L'objectiu principal del tema és l'estudi de mètodes computacionals bàsics per a l'àlgebra lineal.

- Resolució de sistemes lineals no homogenis.
  - Mètodes directes: eliminació gaussiana, mètode de Gauss-Jordan, descompossició LU, factorització QR.
  - Mètodes iteratius: Jacobi, Gauss-Seidel i sobrerelaxació
  - Mínims quadrats.
- Càlcul de vectors i valors propis.
  - Mètodes de la potència.
  - Mètode QR.
  - Valors singulars.

Notació matricial

El sistema de m equacions lineals amb n incògnites,

$$\begin{array}{rcl} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots a_{1n}x_n & = & b_1\,, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots a_{2n}x_n & = & b_2\,, \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots a_{mn}x_n & = & b_m\,. \end{array} \tag{1}$$

Qualsevol sistema d'equacions lineals es pot representar per una matriu $A = (a_{ij})$ que recull els coeficients de les incògnites $x = (x_i)^t$, i el vector $b = (b_i)^t$, vector terme independent de tantes components com equacions $\left(1 \le i \le m,\ 1 \le j \le n\right)$.

Nomenclatura

Es parla de sistemes lineals

1. **Segons tamany**
   - Petits ($n \leq 300$),
   - Grans ($n > 300$).
2. **Segons estructura**
   - pocs elements no nuls, matriu plena.
   - bastants elements nuls, triangular superior o inferior.
   - molts elements nuls, matriu tridiagonal, matriu diagonal i matriu sparse.

Notació matricial

Per a resoldre el sistema, es crea la matriu augmentada:

$$(A|b) = \left(\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} & b_m \end{array}\right) \tag{2}$$

Hi ha sistemes sobredeterminats, amb més equacions que incògnites ($m > n$), hi ha sistemes no determinats, de menys equacions que incògnites ($n > m$) i sistemes amb el mateix nombre d'equacions que incògnites ($m = n$).

Existència de solucions

Per a un sistema $Ax = b$ segons el teorema de Rouche-Frobenius, tenim

- $rang(A) = rang(A|b) = n$ el sistema és compatible determinat.
- $rang(A) = rang(A|b) = r < n$ el sistema és compatible indeterminat, amb $n - r$ graus de llibertat.
- $rang(A) \neq rang(A|b)$ el sistema és incompatible.

Només estudiarem el cas $n = m$ i $det(A) = |A| \neq 0$, cas de solució és única que es pot calcular fent ús de la Regla de Cramer.

Mètode de Cramer

La solució de $Ax = b$, per la regla de Cramer és:

$$x_i = \frac{|A_i|}{|A|}\,, \quad 1 \leq i \leq n \tag{3}$$

on $|A|$ és del determinant de la matriu a, i $|A_i|$ és el determinant de la matriu A_i obtinguda substituint la columna i de la matriu A pel vector b.

Exercici

$$\begin{aligned} 2x_1 + 4x_2 + x_3 &= 1\,, \\ 8x_1 - x_2 + 3x_3 &= 0\,, \\ 2x_1 + 5x_2 &= 0\,. \end{aligned} \tag{4}$$

Matlab

```
%% Exemple 1
A=[2,4,1; 8,-1,3; 2,5 0] % defineixo matriu coeficients
b=[1;0;0]  %defineixo terme independent
%% regla de Cramer
d=det(A) % determinant de la matriu
%%
A1=A; A1(:,1)=b, d1=det(A1), x1=d1/d
%%
A2=A; A2(:,2)=b, d2=det(A2), x2=d2/d
%%
A3=A; A3(:,3)=b, d3=det(A3); x3=d3/d
%% solució
x=A\b;  % sol per matlab
```

Mètode de Cramer - Eficiència

Si la matriu és d'ordre n,

- calen $n+1$ determinants d'ordre n per a calcular x.
- cada determinant d'ordre n requereix $n!n-1$ operacions.
- el nombre d'operacions és, pel cap baix, $n!(n+1)-1$.

	Flops				
n	10^9 (Giga)	10^{10}	10^{11}	10^{12} (Tera)	10^{15} (Peta)
10	10^{-1}sec	10^{-2}sec	10^{-3}sec	10^{-4}sec	negligible
15	17 hours	1.74 hours	10.46 min	1 min	0.6 10^{-1} sec
20	4860 years	486 years	48.6 years	4.86 years	1.7 day
25	o.r.	o.r.	o.r.	o.r.	38365 years

Table 5.1. Time required to solve a linear system of dimension n by the Cramer rule. "o.r." stands for "out of reach"

És un mètode inapropiat per a l'ordinador.

Sistemes d'equacions lineals

Mètodes directes

Mètodes directes

Són mètodes que ens donen la solució exacte en un nombre finit d'operacions, si no fos pels errors d'arrodoniment acumulats i les possibles imprecisions en el coneixement inicial de la matriu de coeficients A i el terme independent b.

Es consideren adients per a sistemes lineals no massa grans $(100 - 500$ equacions) i amb pocs elements nuls.

S'estudien els mètodes,

- Mètode de Gauss.
- Mètodes de factorització LU, Txolesky i QR.
- I derivats: Gauss-Jordan, ...

Millor algoritme

En tots els algoritmes caldrà considerar

- el temps emprat per obtenir la solució (mesurat en nombre d'operacions).
- els errors d'arrodoniment del mètode de càlcul.

De res serveix un mètode que obtingui la solució en un temps clarament excesiu.

Primer presentem algorismes molt econòmics computacionalment, i finalment discutirem com afecten els errors d'arrodoniment a la solució obtinguda.

Sistema diagonal

$D = (d_{ij})$ tal que $d_{ij} = 0$ si $i \neq j$ i $1 \leq i, j \leq n$

$$(D|b) = \left(\begin{array}{cccc|c} d_{11} & 0 & \dots & 0 & b_1 \\ 0 & d_{22} & \dots & 0 & b_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & d_{nn} & b_n \end{array} \right) \tag{5}$$

La solució és $x_i = \dfrac{b_i}{d_{ii}}, \; 1 \leq i \leq n.$

Operacions: calen n divisions per calcular x.

Sistema triangular superior

$U = (u_{ij})$ tal que $u_{ij} = 0$ si $_{1 \leq j < i \leq n}$

$$(U|b) = \left(\begin{array}{ccccc|c} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} & b_1 \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \dots & u_{2n} & b_2 \\ 0 & 0 & u_{33} & \dots & u_{3n} & b_3 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \\ 0 & 0 & \dots & 0 & u_{nn} & b_n \end{array} \right) \tag{6}$$

La solució s'obté per substitució enrera, les fórmules són

$$x_n = \frac{b_n}{u_{nn}}, \quad x_i = \frac{1}{u_{ii}} \left(b_i - \sum_{k=i+1}^{n} u_{ik} x_k \right), \quad 1 \leq i < n.$$

Sistema triangular superior

Exercici

$$
\begin{aligned}
3x_1 + 2x_2 - 2x_3 + 4x_4 &= -5\,, \\
3x_2 - 5x_3 - 3x_4 &= 0\,, \\
4x_3 + x_4 &= -3\,, \\
2x_4 &= 6\,.
\end{aligned}
\tag{7}
$$

La solució s'obté per substitució enrera, el resultat és

$$x_4 = 3\,, \quad x_3 = -3/2\,, \quad x_2 = 1/2\,, \quad x_1 = -7\,,$$

Sistema triangular inferior

$L = (l_{ij})$ tal que $l_{ij} = 0$ si $_{1 \le i < j \le n}$

$$(L|b) = \left(\begin{array}{ccccc|c} l_{11} & 0 & 0 & \dots & 0 & b_1 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & \dots & 0 & b_2 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & \ddots & \vdots & b_3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & l_{nn} & b_n \end{array}\right) \tag{8}$$

La solució s'obté per substitució endavant,

$$x_1 = \frac{b_1}{l_{11}}, \quad x_i = \frac{1}{l_{ii}}\left(b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}x_k\right), \quad {\scriptstyle 1<i\le n}.$$

Nombre d'operacions

Exercici. Calculeu el nombre total de

- divisions que calen per resoldre un sistema diagonal.
- divisions que calen per resoldre un sistema triangular.
- multiplicacions que calen per resoldre un sistema triangular.
- sumes que calen per resoldre un sistema triangular.

Ajuda: $\sum_{i=1}^{m} i = \frac{(m+1)m}{2} \qquad \sum_{i=1}^{m} i^2 = \frac{m(m+1)(2m+1)}{6}.$

Nombre d'operacions

	$+/-$	$*$	$/$	total
Diag	0	0	n	n
Upper	$\dfrac{n^2-n}{2}$	$\dfrac{n^2-n}{2}$	n	n^2
Lower	$\dfrac{n^2-n}{2}$	$\dfrac{n^2-n}{2}$	n	n^2

Mètode de Gauss

Consta de dues fases. La primera fase consisteix en modificar el nostre sistema d'equacions per arribar a un sistema triangular superior. En la segona fase es resol el sistema triangular superior obtingut.

Quin tipus de modificacions són vàlides en la fase 1?

- Multiplicar una fila per un nombre no nul.
- Substituir una fila per una combinació lineal de les altres.
- Permutar files del sistema.
- Permutar columnes del sistema.

Les files són equacions i les columnes són incògnites.

Exemple. Mètode de Gauss

$$\begin{aligned} 2x_1 + 4x_2 + x_3 &= 1\,, \\ 8x_1 - x_2 + 3x_3 &= 0\,, \\ 2x_1 + 5x_2 &= 0\,. \end{aligned} \tag{9}$$

$$G^{(0)} = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 1 & 1 \\ 8 & -1 & 3 & 0 \\ 2 & 5 & 1 & 0 \end{pmatrix} \rightsquigarrow G^{(1)} = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 1 & 1 \\ 0 & -17 & -1 & -4 \\ 0 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$G^{(2)} = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 1 & 1 \\ 0 & -17 & -1 & -4 \\ 0 & 0 & -\frac{18}{17} & -\frac{21}{17} \end{pmatrix} \to x = \begin{pmatrix} -5/12 \\ 1/6 \\ 7/6 \end{pmatrix}$$

Mètode de Gauss

L'algoritme de Gauss, s'aplica sobre la matriu ampliada; i converteix la matriu en una matriu triangular superior. La matriu del sistema A és redueix a triangular superior en $n-1$ passos si A té n files.

$$\left(\begin{array}{ccccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} & b_3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} & b_n \end{array}\right) \rightsquigarrow \left(\begin{array}{ccccc|} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \dots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \dots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & u_{nn} \end{array}\right.$$

Mètode de Gauss. Pas 1

Escrivim el sistema lineal de partida com per $G^{(0)}$ la matriu $(A|b)$, el primer pas és

- verifico si $a_{11} \neq 0$, (pivot).
- s'escull la fila 1, (fila pivot).
- per cada fila per sota de la fila pivot calculo $m_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{a_{11}}$, (multiplicador).
- per cada fila per sota de la fila pivot resto m_{i1} vegades la fila pivot de la fila i.

El resultat és una matriu, $G^{(1)}$, amb la primera columna tot zero, llevat de a_{11}.
El nombre de divisions és $n-1$, i per cada fila són n productes i sumes; en total $n(n-1)$.

Mètode de Gauss. Pas 2

El segon pas és,

- fila pivot la fila 2 de la matriu $G^{(1)}$.
- verifico si el pivot no és nul, $a_{22}^{(1)} \neq 0$.
- per cada fila per sota de la fila pivot calculo

$$m_{i2} = a_{i2}^{(1)} / a_{12}^{(1)}.$$

- per cada fila per sota de la fila pivot resto m_{i1} vegades la fila pivot de la fila i.

El resultat és una matriu, $G^{(2)}$, amb la segona columna tot zero, llevat de $a_{22}^{(2)}$ i $a_{12}^{(2)}$.

El nombre de divisions és $n-2$, i per cada fila són $n-1$ productes i sumes; en total $(n-1)(n-2)$.

Mètode de Gauss. Pas k

En general, en el pas $k < n$, reduim la columna r de la matriu $G^{(k-1)}$, modificant des de la fila k fins a la n amb la fórmula

$$m_{i\,k} = \frac{a_{i\,k}^{(k-1)}}{a_{k\,k}^{(k-1)}}\,, \quad i = r+1\,\ldots\,n\,,$$

$$NovaFila(i) = Fila(i) - m_{ik} \cdot Fila(k)\,, i = k+1 \cdots n\,.$$

El nombre de divisions és $n-k$, i per cada fila són $n-k$ productes i sumes; en total $(n-k)(n-k+1)$.

Operacions triangular superior

El nombre total de divisions és

$$\sum_{k=1}^{n-1}(n-k) = \frac{1}{2}n(n-1) = \frac{n^2}{2} + o(n)\,.$$

El nombre total de multiplicacions/sumes és

$$\sum_{k=1}^{n-1}(n-k+1)(n-k) = \sum_{k=1}^{n-1}(n^2+n-k(2n+1)+k^2) =$$

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

$$= \frac{n(n-1)(n+2)}{3} = \frac{n^3}{3} + o(n^2)\,.$$

Nombre operacions

Algunos costes con el método de Gauss		
n	Coste del Método de Gauss	Tiempo (10^6 oper/s)
5	90	90 microsegundos
10	705	0,7 milisegundos
20	5510	5,5 milisegundos
100	671550	0,67 segundos
1000	667 millones	11 minutos

		Flops	
n	10^9 (Giga)	10^{12} (Tera)	10^{15} (Peta)
10^2	$7 \cdot 10^{-4}$sec	negligible	negligible
10^4	11 min	0.7 sec	$7 \cdot 10^{-4}$sec
10^6	21 years	7.7 months	11 min
10^8	o.r.	o.r.	21 years

Table 5.3. Time required to solve a full linear system of dimension n by MEG. “o.r.” stands for “out of reach”

Estratègies de pivotar

- Què passa si el pivot del pas k és zero?

  Pivot trivial Es busca la primera fila per sota de la fila k que tingui valor no nul, i s'intercanvien les dues files.

  Exemple.

$$\begin{aligned} x_1 + 3x_2 + x_3 &= -3\,, \\ 3x_1 + 9x_2 + 4x_3 &= -7\,, \\ 2x_1 - x_2 + x_3 &= 6\,. \end{aligned}$$

Estratègies de pivotar

- Què passa si el pivot del pas k és proper a zero?

  Pivot parcial. S'agafa com a pivot l'element de més gran magnitud de tota la columna k.

  Pivot parcial escalat. S'agafa com a pivot l'element de la columna k o per sota de la diagonal principal que té la grandària relativa més gran respecte dels altres elements de la fila.

  Exemple.

$$\begin{aligned} -10^{-5}x_1 + x_2 &= 1\,, \\ 2x_1 + x_2 &= 0\,. \end{aligned}$$

Mètode de Gauss-Jordan

Per a resoldre el sistema, es transforma la matriu A en una matriu diagonal:

$$(A|b) \Rightarrow \left(D|\bar{b}\right)$$

$$\left(\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & \dots & a_{3n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} & b_n \end{array}\right) \Rightarrow \left(\begin{array}{ccccc|c} a_{11} & 0 & 0 & \dots & 0 & b_1 \\ 0 & a_{22} & 0 & \dots & 0 & b_2 \\ 0 & 0 & a_{33} & \dots & 0 & b_3 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \\ 0 & 0 & \dots & 0 & a_{nn} & b_n \end{array}\right)$$

Mètode de Gauss-Jordan. Pas k

En general, en el pas $k < n$, reduim la columna k de la matriu $G^{(k-1)}$, modificant totes les files, llevat de la fila k, amb la fórmula

$$m_{i\,k} = \frac{a_{i\,k}^{(k-1)}}{a_{k\,k}^{(k-1)}}\,, \qquad i \neq k,$$

$$NovaFila(i) = Fila(i) - m_{ik} \cdot Fila(k)\,,\ \ i \neq k\,.$$

Comentari: el sistema diagonal és més fàcil de resoldre, però la reducció a sistema diagonal és més costosa.

Estabilitat.

El mètode de Gauss és numèricament estable i no cal fer intercanvis de files i columnes si

- si la matriu A és diagonal dominant.
- si la matriu A és simètrica i definida positiva.

Simètrica si $A^t = A$. Definida positiva si $x^t A x > 0\,,\ \forall x \neq 0$.

Diagonal dominant si $|a_{ii}| \geq \sum_{\substack{i \neq j \\ 1 \leq j \leq n}} |a_{ij}|\,,\ 1 \leq i \leq n$.

Aplicacions.

El mètode de Gauss s'usa:

- per a resoldre sistemes,
- per a calcular el determinant d'una matriu,
- per a calcular el rang d'una matriu.

El mètode de Gauss-Jordan s'usa per a trobar matrius inverses.

Exercici

Calculeu la inversa de la matriu

$$A = \begin{pmatrix} 6 & 2 & 1 & -1 \\ 2 & 4 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 4 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 3 \end{pmatrix}$$

Mètodes Compactes

El tret principal d'aquests mètodes es treballar sols amb la matriu A i presentar-la com $A = BC$ on B i C són matrius més fàcils d'invertir.

Descompossicions més conegudes són

- $A = LU$, L triangular inferior i U triangular superior.
- $A = QR$, Q ortogonal i R triangular superior i .
- $A = U\Sigma V'$, U i V ortogonals i Σ diagonal.

Factorització LU

$$A = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & \dots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \dots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \dots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

- És un sistema de n^2 equacions i $n^2 + n$ incògnites.
- Comentari 1: Mètode de Doolitle, $l_{ii} = 1$.
- Comentari 2: Mètode de Crout, $u_{ii} = 1$.
- Comentari 3: sense pivotar, L és la matriu dels multiplicadors i U és la matriu resultant del mètode de Gauss a la matriu A.

Algorisme

Algoritmo del la Factorización LU

Para $k = 1, \dots, n$,

$$\begin{aligned}
\ell_{kk} u_{kk} &= a_{kk} - \sum_{r=1}^{k-1} \ell_{kr} u_{rk}; \\
\ell_{ik} &= \frac{a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} \ell_{ir} u_{rk}}{u_{kk}}, \qquad i = k+1, \dots, n; \\
u_{kj} &= \frac{a_{kj} - \sum_{r=1}^{k-1} \ell_{kr} u_{rj}}{\ell_{kk}}, \qquad j = k+1, \dots, n.
\end{aligned}$$

El cost de la factorització és $\dfrac{4n^3 + 2n}{6}$.

Exercici

Calculeu la factorització LU de la matriu

$$A = \begin{pmatrix} 6 & 2 & 1 & -1 \\ 2 & 4 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 4 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 3 \end{pmatrix}$$

Matlab

A=[6,2,1,-1; 2,4,1,0;1,1,4,-1;-1,0,-1,3]

[L,U]=A o [L,U,P]=lu(A)

Factorització LU

Notem per A_i les submatrius de la matriu A formades per les i primeres files i les i columnes de la matriu A.

Existència

Una matriu A, regular, admet factorització LU si i només si totes les matrius A_i, $i = 1, \ldots, n$, són regulars.

- Si A és diagonal dominant, admet factorització LU.
- Si A és simètrica i definida positiva, admet factorització LU.

La resolució del sistema lineal $Ax = b$ fent ús de $PA = LU$, L triangular inferior i U triangular superior, és en dos passos:

- Pas 1, es calcula $Ly = Pb$ (endavant).
- Pas 2, es calcula $Ux = y$ (enrera).

Factorització Choleski

Trobeu la factorització $A = R^t R$ i resoleu després el sistema lineal $Ax = b$,

$$A = \begin{pmatrix} 16 & 4 & 0 & -4 \\ 4 & 5 & 2 & -1 \\ 0 & 2 & 2 & -2 \\ -4 & -1 & -2 & 6 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} 8 \\ -2 \\ -4 \\ 3 \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad R = \begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Existència

Tota matriu A simètrica i definida positiva es pot factoritzar com $A = R^t R$ per R triangular superior o $A = SS^t$ per S triangular inferior (factorització de Cholesky).

Serveix com a test per dir si una matriu és definida positiva.

Algorisme

Método de Cholesky

Para $k = 1, \ldots, n$,

$$\ell_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum_{r=1}^{k-1} \ell_{k,r}^2};$$

$$\ell_{i,k} = \frac{a_{i,k} - \sum_{r=1}^{k-1} \ell_{ir}\ell_{kr}}{\ell_{kk}}, \quad i = k+1, \ldots, n.$$

El cost de la factorització és $\mathcal{O}(n^3)$.

Factorització QR

La factorització QR expressa la matriu A com el producte de dues matrius, una ortogonal ($Q^tQ = I$) i l'altre triangular superior (R). Així, el sistema lineal $Ax = b$ es reduiex a resoldre $Rx = Q^tb$.

Aquesta factorització és més costosa que la **LU** però les matrius A i $R = Q^tA$ tenen el mateix nombre de condició.

La factorització **QR** no és única.

- Mètode de les rotacions de Givens.
- Mètode de Gram-Schmidt d'ortogonalització.
- Mètode de les reflexions de Householder (1958).

Factorització QR

Transformacions de Householder

Per $v \in \mathbb{R}^n$ definim la transformació associada a v per

$$H = \begin{cases} I, & v = 0, \\ I - \dfrac{2}{v^t v} v v^t, & v \neq 0. \end{cases}$$

Propietats

1. H és simètrica, ortogonal i $H^2 = I$.
2. Si $x \perp v, \Rightarrow Hx = x$.
3. Si $x \parallel v, \Rightarrow Hx = -x \;\; Hv = -v$.
4. Si $||x|| = ||v||, v = x - y \,, \Rightarrow Hx = y$.

Factorització QR

Per A és una matriu $m \times n$, les matrius ortogonals Q_k modifiquen les files $k, \cdots, m$ de la manera següent:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \end{bmatrix}}_{A} \xrightarrow{Q_1} \underbrace{\begin{bmatrix} * & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & * & * \end{bmatrix}}_{Q_1 A} \xrightarrow{Q_2} \underbrace{\begin{bmatrix} x & x & x \\ 0 & * & * \\ 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & * \end{bmatrix}}_{Q_2 Q_1 A} \xrightarrow{Q_3} \underbrace{\begin{bmatrix} x & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}}_{Q_3 Q_2 Q_1 A}$$

De $Q_n Q_{n-1} \cdots Q_1 A = R$, construïm

$$A = \underbrace{Q_1^t \dots Q_{n-1}^t Q_n^t}_{Q} R = QR$$

Són una successió de simetries per transformar les columnes de la matriu A a una forma triangular superior

Factorització QR

$$(\mathbf{Ax} = \mathbf{b}) \equiv \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 2 & 0 & 1 \\ -2 & 7 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 4 \\ -7 \end{pmatrix}$$

$$\left\| \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \right\| = 3, \quad \Rightarrow \quad y^{(1)} = \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$v^{(1)} = x^{(1)} - y^{(1)} = \begin{pmatrix} -2 \\ 2 \\ -2 \end{pmatrix}.$$

Factorització QR

$$H_1 = I - \frac{2}{v_1^* v_1} v_1 v_1^* = I - \frac{2}{12} \begin{pmatrix} -2 \\ 2 \\ -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -2 & 2 & -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/3 & 2/3 & -2/3 \\ 2/3 & 1/3 & 2/3 \\ -2/3 & 2/3 & 1/3 \end{pmatrix}$$

$$H_1 A = \begin{pmatrix} 1/3 & 2/3 & -2/3 \\ 2/3 & 1/3 & 2/3 \\ -2/3 & 2/3 & 1/3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 2 & 0 & 1 \\ -2 & 7 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & -5 & -1/3 \\ 0 & 4 & 1/3 \\ 0 & 3 & 5/3 \end{pmatrix}$$

$$x_2 = \begin{pmatrix} -5 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix} \quad y_2 = \begin{pmatrix} -5 \\ \sqrt{4^2 + 3^2} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -5 \\ 5 \\ 0 \end{pmatrix} \Longrightarrow v_2 = x_2 - y_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$H_2 = I - \frac{2}{v_2^* v_2} v_2 v_2^* = I - \frac{2}{10} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 4/5 & 3/5 \\ 0 & 3/5 & -4/5 \end{pmatrix}$$

Factorització QR

En Matlab la factorització QR s'obté per [Q ,R]=qr(A).

En aquest cas, la resolució del sistema lineal $Ax = b$ amb $AP = QR$, R triangular inferior i Q ortogonal, és en dos passos:

- Pas 1, es calcula $B = Q'b$.
- Pas 2, es resol el sistema triangular $Rx = B$.

Les matrius A i $R = Q'A$ tenen el mateix nombre de condició.

Sistemes d'equacions lineals

Vector residu i errors

Condicionament

$$(A|b) = \left(\begin{array}{cccc|c} 10 & 7 & 8 & 7 & 32 \\ 7 & 5 & 6 & 5 & 23 \\ 8 & 6 & 10 & 9 & 33 \\ 7 & 5 & 9 & 10 & 31 \end{array}\right) \xrightarrow{sol.exacte} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{10}$$

$$(A|b) = \left(\begin{array}{cccc|c} 10 & 7 & 8 & 7 & 32.1 \\ 7 & 5 & 6 & 5 & 22.9 \\ 8 & 6 & 10 & 9 & 33.1 \\ 7 & 5 & 9 & 10 & 30.9 \end{array}\right) \xrightarrow{sol.exacte} \begin{pmatrix} ? \\ ? \\ ? \\ ? \end{pmatrix} \tag{11}$$

Una petita modificació en les dades (terme independent) dóna lloc a una gran modificació en el resultat (solució)

Condicionament

Un sistema d'equacions lineals $Ax = b$ es diu *ben condicionat* quan els errors de la matriu de coeficients A i del vector terme independent b produeixen en la solució un error del mateix ordre.

Un sistema d'equacions lineals $Ax = b$ es diu *mal condicionat* quan els errors de la matriu de coeficients A i del vector terme independent b produeixen en la solució del sistema un error d'ordre superior en al de les dades.

$$\begin{array}{c} \|A-\bar{A}\| < \epsilon \\ \\ \|b-\bar{b}\| < \epsilon \end{array} \Longrightarrow \begin{cases} \|x-\bar{x}\| \simeq \epsilon\,, & \text{ben condicionat,} \\ \\ \|x-\bar{x}\| \gg \epsilon\,, & \text{mal condicionat,} \end{cases}$$

Nombre de condició

Es diu que el sistema $Ax = B$ està mal condicionat si A té un nombre de condició gran.

Nombre de condició

$$\mathcal{K}(A) = \begin{cases} \|A\|\|A^{-1}\|\,, & det(A) \neq 0 \\ \infty\,, & altrament \end{cases} \qquad (12)$$

Matlab

- ✓ `cond(A,p)` Mesura el mal condicionament

  `cond(eye)=1` `cond(matsingular)=`∞
- ✓ `rcond(A,p)` Mesura el bon condicionament

  `rcond(eye)=1` `rcond(matsingular)=0`

Vector residu

Com a criteri de comparació entre la solució exacta x, i la solució calculada $x^* = x + \delta x$, del sistema lineal $Ax = b$ definim el vector residu $r(x^*)$ per:

$$r(x^*) = Ax - Ax^* = b - Ax^* \,,$$

llavors es verifca:

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \mathcal{K}(A) \frac{\|\delta b\|}{\|b\|} \; = \mathcal{K}(A) \frac{\|r(x^*)\|}{\|b\|} \tag{13}$$

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x + \delta x\|} \leq \mathcal{K}(A) \frac{\|\delta A\|}{\|A\|} \tag{14}$$

Sistemes d'equacions lineals

Mètodes iteratius

Mètodes iteratius

Són mètodes que construeixen una successió de vectors convergent a la solució exacte amb nombre finit d'operacions en cada iteració, si no fos pels errors d'arrodoniment acumulats i les possibles imprecisions en el coneixement inicial de A i b.

Es consideren adients per a sistemes lineals d'ordre alt.

Treballarem dos mètodes,

- mètode de Jacobi.
- mètode de Gauss-Seidel
- mètode de Sobrerelaxació

Exemple

Determineu les matrius d'iteració del mètode de Jacobi i del mètode Gauss-Seidel del sistema $Ax = b$ donat per

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & -3 \end{pmatrix} \qquad b = \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \\ -4 \end{pmatrix}$$

que té per solució $x^* = (1\,,2\,,3)^\top$.

- **Mètodes iteratius**

Transformem el sistema lineal en un d'equivalent:

$$Ax = b \quad \Rightarrow \quad x = Bx + C$$

Resolem el nou sistema de forma iterativa, partim de $x^{(0)}$ arbitrari, i generem la successió de vectors $x^{(k)}$ convergent a x^*, solució de Ax=b

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + C$$

Vector residu de la iteració $x^{(k)}$: $r^{(k)} = Ax^{(k)} - b$

Vector residu de la solució x: $r(x) = 0$

- **Convergència**

TEOREMA I. Si A és no singular, $x^{(k)}$ és convergent a la solució x^* de $Ax=b$

$$\Updownarrow$$

$r^{(k)}$ és convergent a 0.

TEOREMA II. El mètode iteratiu $x^{(k+1)}=B\,x^{(k)}+C$ és convergent per tot $x^{(0)}$

$$\Updownarrow$$

$\rho(B)<1$.

Raó de convergència

$$x^{(k)}-x^{*}=B(x^{(k-1)}-x^{*})=\ldots=B^{(k)}(x^{(0)}-x^{*}) \Rightarrow$$

$$\|x^{(k)}-x^{*}\| \leq \|B\|^{k}\, \|x^{(0)}-x^{*}\|$$

Factor de convergència asimptòtic:

$$\alpha=\lim_{k\to\infty} \|x^{(k)}-x^{*}\|^{1/k}$$

Velocitat de convergència: $R=-\log(\rho(B))$

- **Estimació de l'error.**

$\pm Bx^{(k)}$

1. $x^{(k)}-x^{*}=-B(x^{(k)}-x^{(k-1)})+B(x^{(k)}-x^{*})$ i $\|B\|=\beta<1$

$$\Rightarrow \left\|x^{(k)}-x^{*}\right\| \leq \frac{\beta}{1-\beta}\left\|x^{(k)}-x^{(k-1)}\right\|$$

2. $B(x^{(k)}-x^{(k-1)}) = B^{k}(x^{(1)}-x^{(0)})$ i $\|B\|=\beta<1$

$$\Rightarrow \left\|x^{(k)}-x^{*}\right\| \leq \frac{\beta^{k}}{1-\beta}\left\|x^{(1)}-x^{(0)}\right\|$$

- **Mètode general:**

Per convertir Ax=b en un sistema de la forma x=Bx+c, expressem la matriu A com a suma de tres matrius,

$$\underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \ddots & a_{2N} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NN} \end{pmatrix}}_{\substack{\parallel \\ A}} = \underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & a_{NN} \end{pmatrix}}_{\substack{\parallel \\ D}} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ a_{N1} & \cdots & a_{NN-1} & 0 \end{pmatrix}}_{\substack{\parallel \\ L}} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & a_{N-1N} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{\substack{\parallel \\ U}}$$

Es a dir, A=D+L+U

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 Jacobi:**

Aïllem x_i de l'equació i-èsima:

$$\left.\begin{array}{r} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1N}x_N = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2N}x_N = b_2 \\ \ddots \quad \ddots \quad \ddots \quad \ddots \\ a_{N1}x_1 + a_{N2}x_2 + \cdots + a_{NN}x_N = b_N \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{l} x_i^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \displaystyle\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} a_{ij}x_j^{(k)} \right) \\ \quad i = 1, 2, \ldots, N \quad k \geq 0 \end{array}\right.$$

Si $a_{ii}=0$, però A invertible, es permuten equacions.

Les matrius d'iteració són: $B_J = -D^{-1}(L+U) \quad c_J = D^{-1}b$

Si A és diagonal dominant estricte, el mètode és convergent.

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} |a_{ij}| \Rightarrow \quad \|B_J\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq N} \left(\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \right) < 1$$

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.
- ✓ $B_{GS} = -CU$ 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.

• Mètode de Gauss-Seidel:

Aïllem x_i de l'equació i-èsima i fem ús de les components ja calculades en cada pas:

$$\left.\begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1N}x_N = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2N}x_N = b_2 \\ \quad \ddots \qquad \ddots \quad \ddots \qquad \ddots \\ a_{N1}x_1 + a_{N2}x_2 + \cdots + a_{NN}x_N = b_N \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{l} x_i^{(k+1)} = \dfrac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \displaystyle\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{N} a_{ij}x_j^{(k)}\right) \\ \qquad i=1,2,\ldots,N \quad k \geq 0 \end{array}\right.$$

Les matrius d'iteració són: $B_{GS} = -(D+L)^{-1}U \quad c_{GS} = (D+L)^{-1}b$

Si $a_{ii}=0$, però A invertible, es permuten equacions.

Si A és diagonal dominant estricte, el mètode és convergent.
Si A és simètrica definida positiva, el mètode és convergent.

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.

Convergència

Si la matriu A té tots els elements diagonals no nuls, llavors $|\omega - 1| \leq \rho(B_{sor})$.

Per convergència només possible $\omega \in (0, 2)$.

- ✓ Si $\omega = 1$ és el mètode de Gauss-Seidel.
- ✓ Si $0 < \omega < 1$ mètodes de subrelaxació.
- ✓ Si $1 < \omega < 2$ mètodes de sobrerelaxació.

TEOREMA. *Sigui A simètrica, definida positiva i tridiagonal en blocs:*

$$A = \begin{pmatrix} D_1 & U_1 & & & \\ L_2 & D_2 & U_2 & 0 & \\ & & & & \\ & 0 & & & U_{n-1} \\ & & & L_n & D_n \end{pmatrix}$$

on D_i, $i = 1, \ldots, n$ són submatrius diagonals, U_i, L_i, submatrius qualssevol que satisfan $L_{i+1} = U_i^T$, $i = 1, \ldots, n-1$. Llavors $\rho(B_{GS}) = \rho^2(B_J)$ i el paràmetre de relaxació $\bar{w}$ òptim és

$$\bar{w} = \frac{2}{1 + (1 - \rho(B_{GS}))^{1/2}}, \ \rho(B_{GS}) < 1,$$

on $\rho(B_J)$ és el radi espectral de la iteració de Jacobi corresponent a A . El valor òptim de $\rho(B_w)$ és

$$\rho(B_{\bar{w}}) = \bar{w} - 1.$$

Si la matriu A verifica les hipotesis del teorema anterior resulta que,

$$\rho(B_{GS}) = (\rho(B_J))^2 \ ,$$

per tant, si el mètode de Jacobi és convergent, també ho és el de Gauss-Seidel i el factor de convergència asimptòtica és el quadrat del de Jacobi.

Quin valor de $\omega_0 \in (0,2)$ minimitza el radi espectral $\rho(B_\omega)$?

ω - òptim

$$\omega_0 = \frac{2}{1+\sqrt{1-\rho(B_J)^2}} \quad \text{i} \quad \rho(B_\omega) = \omega_0 - 1 \, .$$

Exemple

Determineu les 10 primeres iteracions del mètode de Jacobi, del mètode Gauss-Seidel i del mètode de sobrerelaxació prenent $x^{(0)} = (0\,,0\,,0\,,0)^\top$ del sistema $Ax = b$ donat per

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

que té per solució $x^* = (1\,,2\,,-1\,,1)^\top$.

Estudieu el residu per cada mètode.

Exemple

k	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$x_1^{(k)}$	0.0000	0.6000	1.0473	0.9326	1.0152	0.9890	1.0032	0.9981	1.0006	0.9997	1.0001
$x_2^{(k)}$	0.0000	2.2727	1.7159	2.053	1.9537	2.0114	1.9922	2.0023	1.9987	2.0004	1.9998
$x_3^{(k)}$	0.0000	−1.1000	−0.8052	−1.0493	−0.9681	−1.0103	−0.9945	−1.0020	−0.9990	−1.0004	−0.9998
$x_4^{(k)}$	0.0000	1.8750	0.8852	1.1309	0.9739	1.0214	0.9944	1.0036	0.9989	1.0006	0.9998

Figura: Iteracions Jacobi

k	0	1	2	3	4	5
$x_1^{(k)}$	0.0000	0.6000	1.030	1.0065	1.0009	1.0001
$x_2^{(k)}$	0.0000	2.3272	2.037	2.0036	2.0003	2.0000
$x_3^{(k)}$	0.0000	−0.9873	−1.014	−1.0025	−1.0003	−1.0000
$x_4^{(k)}$	0.0000	0.8789	0.9844	0.9983	0.9999	1.0000

Figura: Iteracions Gaus-Seidel

Mètode del gradient conjugat

$Ax = b\,,\quad$ A simètrica i definida positiva.

Resoldre el sistema lineal $Ax = b$ és equivalent al problema de minimitzar la funció definida per

$$\phi(x) = \frac{1}{2}x^TAx - x^Tc \tag{15}$$

Obs. El gradient d'aquesta funció és $\nabla\phi(x) = Ax - b$.

Sistemes lineals SOBREDETERMINATS

- # Sistema lineal

$$
\begin{aligned}
x_1 + x_2 &= 1\\
x_1 + 2x_2 &= 2\\
x_1 + 3x_2 &= 5
\end{aligned}
$$

$$\left\langle \begin{aligned} x_1 + x_2 &= 1 \\ x_1 + 2x_2 &= 2 \end{aligned} \right. \Rightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \|r_x\| = 2$$

$$\left\langle \begin{aligned} x_1 + x_2 &= 1 \\ x_1 + 3x_2 &= 5 \end{aligned} \right. \Rightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} \quad \|r_x\| = 1$$

$$\left\langle \begin{aligned} x_1 + 2x_2 &= 2 \\ x_1 + 3x_2 &= 5 \end{aligned} \right. \Rightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -4 \\ 3 \end{pmatrix} \quad \|r_x\| = 2$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \Rightarrow A^t A = \begin{pmatrix} 3 & 6 \\ 6 & 14 \end{pmatrix} \Rightarrow x = \begin{pmatrix} -4/3 \\ 2 \end{pmatrix} \quad \|r_x\| = \frac{\sqrt{6}}{3} = 0.8165 < 1$$

Exemple

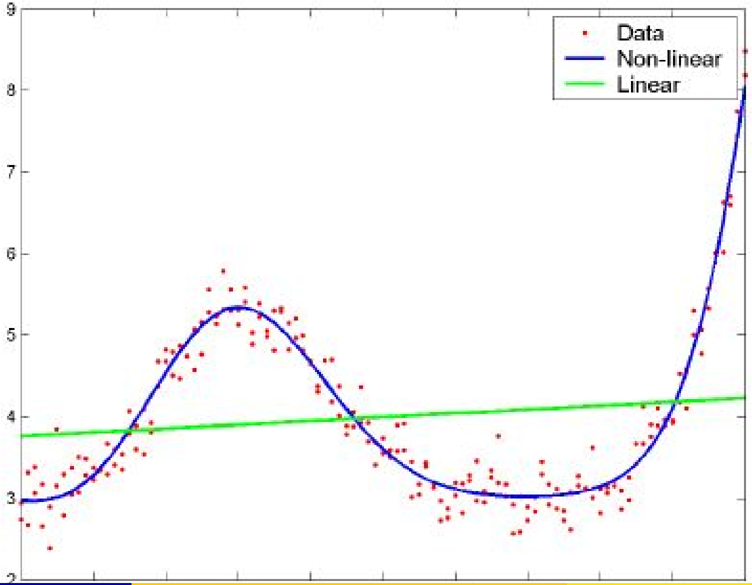
Exemple. Les dades de la Taula 5.2 s'han tret de J.C. Miller & J.N. Miller (1993), *Statistics in Analytical Chemistry*, Ellis Horwood. Corresponen a una investigació sobre un test colorimètric per a la concentració de glucosa, en la que es varen obtenir absorbàncies per a sis concentracions patró de glucosa.

En els experiments de calibratge de l'anàlisi instrumental es pren sempre com a variable de control x la concentració (de fet, al ser una concentració patró, el seu valor no és experimental, sinó prefixat per l'usuari). La variable resposta y és en aquest cas, l'absorbància. Ajustem per mínims quadrats un model $y = a + bx$.

TAULA 5.2

Concentració (mM)	0	2	4	6	8	10
Absorbància	0.002	0.150	0.294	0.434	0.570	0.704

Data Modeling – Curve Fitting



- **SISTEMES lineals sobredeterminats.**

Si A és M×N i M≥N, b vector M×1, Ax=b no té solució, llavors busquem x tal que Ax sigui "la millor" aproximació (pel mètode de mínims quadrats) de b: trobarem el vector x que minimitza la norma euclidiana del vector residu.

- **TEOREMA**

Equacions normals

Si x satisfà $A^T(b-Ax)=0$ llavors, $\forall y$ $y\in\mathbb{R}^N$ es verifica

$$\|b-Ax\|_2 \leq \|b-Ay\|_2$$

La matriu A^TA de $A^TAx=A^Tb$, és quadrada simètrica d'ordre N,

- **TEOREMA** A^TA és no singular $\Leftrightarrow$ rang(A)=N

Equacions normals

$Ax = b\,,$ 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.

Exercici 1

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

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

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

Exercici 2

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 de la taula 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.

Exercici 3

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?