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 parţială.

- Folosind algoritmul de eliminare Gauss cu pivotare parţială, să se decidă dacă matricea A este singulară sau nu şi în caz că matricea A este nesingulară, utilizând metoda substituţiei inverse, să se aproximeze soluţia sistemului, x_{Gauss}:
$$Ax = b. \tag{1}$$

- Fie x_{Gauss} soluţia aproximativă calculată. Să se verifice soluţia afişând următoarea normă:
$$||A^{init}x_{Gauss} - b^{init}||_2$$
A^{init} şi b^{init} sunt datele iniţiale, 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 aţi implementat corect metoda eliminării Gauss.

- Folosindu-se una din bibliotecile menţionate în pagina laboratorului, să se calculeze şi să se afişeze soluţia sistemului $Ax = b$ şi inversa matricei A, x_{bibl} şi A^{-1}_{bibl}. Să se afişeze următoarele norme:
$$||x_{Gauss} - x_{bibl}||_2$$
$$||x_{Gauss} - A^{-1}_{bibl}b^{init}||_2.$$
Aceste norme ar trebui să fie mai mici decât 10^{-6}.

- Folosind algoritmul de eliminare Gauss, calculaţi o aproximare a inversei acestei matrice, A^{-1}_{Gauss}. Să se afişeze:
$$||A^{-1}_{Gauss} - A^{-1}_{bibl}||$$
Folosiţi orice normă matriceală este implementată în bibliotecă.

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

Bonus (25pt): Să se adapteze algoritmul de eliminare Gauss cu pivotare parţială 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 soluţia sistemului $Ax = g$. La sfârşitul 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 .

Observaţie

Precizia calculelor ϵ, este un număr pozitiv de forma:

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

valoare care este dată de intrare în program (se citeşte de la tastatură sau din fişier) la fel ca şi dimensiunea n a datelor. Acest număr se foloseşte atunci când testăm dacă o variabilă este 0 sau nu înaintea unei operaţii de împărţire.

Dacă vrem să efectuăm operaţia de împărţire $s = \dfrac{1.0}{v}$ 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 substituţiei inverse

Fie sistemul liniar:

$$Ax = b \tag{2}$$

unde matricea sistemului A este triunghiulară superior . Pentru a găsi soluţia 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:

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

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

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

Necunoscutele x_1, x_2,...,x_n se deduc pe rând, folosind ecuaţiile sistemului de la ultima către prima. Din ultima ecuaţie, deducem valoarea lui x_n:

$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}} \tag{3}$$

Folosind valoarea lui x_n calculată mai sus, din penultima ecuaţie obţinem:

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

Continuăm să calculăm valori x_i din ecuaţiile sistemului:

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

Din prima ecuaţie găsim valoarea lui x_1:

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

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

$$x_i = \frac{\left(b_i - \sum\limits_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j\right)}{a_{ii}} \quad , \quad i = n, n-1, \ldots, 2, 1 \tag{4}$$

Algoritmul de eliminare Gauss

Ideea de rezolvare este de a transforma succesiv sistemul (1) folosind operaţii elementare (ce nu modifică soluţia sistemului) şi a aduce matricea A la o formă superior triunghiulară . Algoritmul se desfăşoară în $(n-1)$ paşi. 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 poziţia (l, l) numit şi element pivot este nenul, $a_{ll} \neq 0$. Pentru $i = l+1, ..., n$ se înmulţeşte linia l a matricei A cu $(-a_{il}/a_{ll})$ şi se adună la linia i. Schimbare se face şi asupra componentei i a vectorului b. Matricea A şi vectorul b se modifică astfel:

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

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

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

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

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

Alegerea pivotului $a_{ll} \neq 0$ $(|a_{ll}| > \epsilon)$
Pentru a aduce pe poziţia (l, l) un element nenul avem trei posibilităţi:

1. Varianta *fără pivotare*

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

2. Varianta cu *pivotare parţială*

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

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

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

3. Varianta cu *pivotare totală*

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

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

Se interschimbă liniile i_0 şi l , coloanele j_0 şi l ale matricei A şi componentele i_0 şi 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**.

Observaţii:

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

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

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

Algoritmul de eliminare Gauss (varianta 1) :

```
l = 1;
cauta_pivot();
interschimba_linii(); // (dacă e cazul)
while (l ≤ n − 1) and (|a_ll| > ε) do
  begin
    (5)+(6)+(7);
    l = l + 1;
    cauta_pivot();
    interschimba_linii(); // (dacă e cazul)
  end
if |a_ll| ≤ ε then print('matrice singulara');
else
  begin
   rezolva_sistem_superior_triunghiular();
   // (se foloseşte metoda substitiţiei inverse)
   verifica_solutie();
  end
```

Algoritmul de eliminare Gauss (varianta 2):

(Vectorul b este memorat in coloana $n+1$ a matricei A şi 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 (|a_ll| > ε) do
  begin
    for i = l + 1, ..., n
      a_il = a_il / a_ll;
      for j = l + 1, ..., n + 1
      // j = n + 1 corespunde transformării vectorului b
        a_ij = a_ij − a_il a_lj;
      l = l + 1;
    cauta_pivot();
    interschimba_linii(); // (dacă e cazul)
  end
if |a_ll| ≤ ε then print('matrice singulara');
else
  begin
    rezolva_sistem_superior_triunghiular();
    // (se foloseşte metoda substitiţiei inverse)
    verifica_solutie();
  end
```

Calculul unei aproximări a inversei unei matrice

Dacă se cunoaşte o metodă numerică de rezolvare a sistemelor liniare (în cazul de faţă 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:

$$\begin{aligned}&Ax = e_j \ , \ j = 1, 2, \ldots, n,\\ &e_j = (0, \ldots, 1, 0 \ldots, 0)^T \quad , 1 \text{ este pe poziţia } j \text{ în vectorul } e_j\end{aligned}$$

Procedura de calcul a matricei A^{-1}_{Gauss} 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 parţială, 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 $[R, I_{transformat}]$ unde R este forma superior triunghiulară a matricei A iar $I_{transformat}$ este matricea I_n modificată conform algoritmului de eliminare Gauss.

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

  1. b=coloana j a matricei $I_{transformat}$;
  2. se rezolvă sistemul superior triunghiular $Rx = b$, folosind metoda substituţiei inverse, se obţine soluţia x^* (x^* este soluţia sistemului liniar $Ax = e_j$);
  3. se memorează x^* în coloana j a matricei A^{-1}_{Gauss};

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

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

Exemplu

Sistemul liniar:

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

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

După aplicarea algoritmului de eliminare Gauss cu pivotare parţială (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 iniţial 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:

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

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

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

Inversa matricei A este:

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