

Àlgebra lineal numèrica

2

Un sistema de m equacions amb n incògnites és un sistema del tipus

$$F_2(x_1, \dots, x_n) = 0$$

• • •

$$F_m(x_1, \dots, x_n) = 0$$

on les funcions F_i poden ser lineals, algebraiques (polinomials) o analítiques. Així tenim

$$x + 2 - \frac{x}{3} = 0$$

→

una eq. lineal (a resoldre aïllant la incògnita)

$$x^2 - 2\sin x + 4 = 0$$

una eq. no lineal (a resoldre pel mètode de Newton)

$$x + y + z = 0$$

$$x - 2y - z = 1$$

un sistema d'eq. lineals (a resoldre per un mètode gaussià)

$$x + z = 3$$

$$x^2 + \cos y = 0$$

→

un sistema d'eq. no lineals (a resoldre pel mètode de Newton)

$$x - 2y \sin(x) = 1$$

3

Un sistema de m equacions lineals amb n incògnites s'escriu:

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

La seva formulació matricial pren la forma $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, on

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}, \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}.$$

- **A** és la matriu de coeficients,
- **b** és el vector de termes independents,
- **x** és el vector d'incògnites que cal trobar o aproximar.

4

Per a cada vector \mathbf{x} es defineix el seu vector **residu**:

$$\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax} = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_m \end{pmatrix}.$$

La solució del problema té residu 0. Fent servir la norma euclidiana dels vectors \mathbf{r} i \mathbf{b} :

$$\|\mathbf{r}\| = \sqrt{r_1^2 + \cdots + r_m^2}, \quad \|\mathbf{b}\| = \sqrt{b_1^2 + \cdots + b_m^2},$$

es pot fer una **estimació numèrica dels errors residuals absolut i relatiu d' \mathbf{x}** :

$$r_a = \|\mathbf{r}\|, \quad r_r = \frac{\|\mathbf{r}\|}{\|\mathbf{b}\|}.$$

Es tracta d'estimacions sobre el vector residu \mathbf{r} , no sobre el vector \mathbf{x} com a aproximació de la possible solució.

5

Problema: Resoldre el sistema lineal $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, amb \mathbf{A} quadrada suposant que la solució \mathbf{x} existeix i és única (sistema compatible i determinat: $\det \mathbf{A} \neq 0$).

- **Mètodes directes:** Pretenen trobar la solució exacta, llevat dels errors inherents als càlculs. Mètodes basats en l'eliminació gaussiana.
- **Mètodes iteratius:** Pretenen trobar una successió de vectors aproximats $\mathbf{x}^{(k)}$, via iteració, tal que $\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}\| \rightarrow 0$ quan $k \rightarrow \infty$, aturant les iteracions quan l'error residual tingui una norma menor que una **tolerància** prefixada).

6

Sistema diagonal $\mathbf{D}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ amb matriu quadrada D tal que $D_{ij} = 0$, $i \neq j$:

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} d_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_{nn} \end{pmatrix}$$

amb $d_{ii} \neq 0$ ($i = 1, \dots, n$) (sistema compatible determinat).

$$x_i = \frac{b_i}{d_{ii}} \quad (i = 1, \dots, n) .$$

amb un total de n operacions (divisions).

7

Sistema triangular inferior $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$ amb matriu quadrada tal que $l_{ij} = 0, i < j$:

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

La seva resolució és senzilla, via substitució cap endavant:

$$y_i = \frac{1}{l_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j \right) \quad (i = 1, 2, \dots, n) .$$

Requereix un total de n^2 operacions (exercici).

8

Sistema triangular superior $\mathbf{U}\mathbf{x} = \mathbf{y}$ amb matriu quadrada tal que $u_{ij} = 0, i > j$:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

La seva resolució és senzilla, via substitució cap enrere:

$$x_i = \frac{1}{u_{ii}} \left(y_i - \sum_{j=i+1}^n u_{ij} x_j \right) \quad (i = n, n-1, \dots, 1) .$$

Requereix un total de n^2 operacions (exercici).

9

Sistema lineal general $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ compatible i determinat ($\det \mathbf{A} \neq 0$).

Objectiu: Convertir-lo en un sistema d'equacions triangular superior $Ux = y$ que tingui la mateixa solució. Resoldre després el sistema triangular resultant.

El mètode d'eliminació gaussiana proposa fer aquesta triangularització anul·lant els coeficients de sota la diagonal per a cada columna k ($k = 1, \dots, n - 1$). Per anul·lar els coeficients de les files i de sota la diagonal de la columna k , es modifica l'equació i restant-li el múltiple adequat de l'equació k .

10

Exemple 1: Resoldre el sistema lineal

$$\begin{cases} x & & + & z & = & 1, \\ x & + & 0.0001y & + & 2z & = & 2, \\ x & + & & y & + & z & = & 0, \end{cases}$$

usant aritmètica de **punt flotant amb $t = 4$ dígits i arrodoniment**.
Es considera la matriu ampliada

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0.0001 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{array} \right).$$

i s'aplica a continuació el mètode de Gauss treballant amb 4 dígits significatius.

Mètode de Gauss

11

Exemple 1 (continuació)

Pas 1:

- Fila 2 \rightarrow Fila 2 – Fila 1.
- Fila 3 \rightarrow Fila 3 – Fila 1.

S'obté la matriu ampliada

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0.0001 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{array} \right).$$

Pas 2:

- Fila 3 \rightarrow Fila 3 – $\frac{1}{0.0001}$ Fila 2.

S'obté la matriu ampliada

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0.0001 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -10000 & -1 - \frac{1}{0.0001} 1 \simeq -10000 \end{array} \right).$$

Mètode de Gauss

12

Exemple 1 (continuació)

Cal ara resoldre el sistema triangular

$$\begin{cases} x & + & z & = & 1, \\ & 0.0001y & + & z & = & 1, \\ & & - & 10000z & = & -10000, \end{cases}$$

que és compatible i determinat amb solució $\mathbf{x}^T = (0, 0, 1)$.

El residu i els errors residuals són:

- $\mathbf{r}^T = (\mathbf{b} - \mathbf{Ax})^T = (0, 0, -1)$.
- $r_a = 1$ i $r_r = 0.4472 \dots$
- La solució exacta és $\mathbf{x}^T = (1.0001, -1, -0.0001)$. La solució numèrica trobada no té cap xifra significativa correcta!
- En el Pas 2 el terme $a_{22} = 0.0001$ és relativament molt petit.

Mètode de Gauss

13

Exemple 2

Exemple 2: Resoldre el sistema lineal

$$\begin{array}{rrcrcl}
 0.000135 x_1 & +0.00201 x_2 & -2.07 x_3 & +3.04 x_4 & = & 0.345 \\
 4.21 x_1 & +0.0432 x_2 & -0.183 x_3 & -12.3 x_4 & = & 87.4 \\
 -2.72 x_1 & +205 x_2 & -12.1 x_3 & +324 x_4 & = & -434 \\
 0.00871 x_1 & +332 x_2 & +23.4 x_3 & +0.0456 x_4 & = & 23
 \end{array}$$

treballant amb precisió simple.

14

$$\begin{pmatrix} 1.3499999e-04 & 2.0099999e-03 & -2.0699999e+00 & 3.0400000e+00 & 3.4500000e-01 \\ 4.2100000e+00 & 4.3200001e-02 & -1.8300000e-01 & -1.2300000e+01 & 8.7400002e+01 \\ -2.7200000e+00 & 2.0500000e+02 & -1.2100000e+01 & 3.2400000e+02 & -4.3400000e+02 \\ 8.7099997e-03 & 3.3200000e+02 & 2.3400000e+01 & 4.5600001e-02 & 2.3000000e+01 \end{pmatrix}$$

- (Fila 2) = (Fila 2) - (3.1185188e + 04) (Fila 1)
- (Fila 3) = (Fila 3) - (-2.0148148e + 04) (Fila 1)
- (Fila 4) = (Fila 4) - (6.4518517e + 01) (Fila 1)

$$\begin{pmatrix} 1.3499999e-04 & 2.0099999e-03 & -2.0699999e+00 & 3.0400000e+00 & 3.4500000e-01 \\ 0.0000000e+00 & -6.2639027e+01 & 6.4553152e+04 & -9.4815266e+04 & -1.0671489e+04 \\ 0.0000000e+00 & 2.4549777e+02 & -4.1718766e+04 & 6.1574371e+04 & 6.5171113e+03 \\ 0.0000000e+00 & 3.3187033e+02 & 1.5695332e+02 & -1.9609068e+02 & 7.4111187e-01 \end{pmatrix}$$

15

Mètode de Gauss

16

Exemple 2 (continuació)

Pas 4

- Sistema compatible determinat

Solució del sistema triangular

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1.6482010e + 01 \\ 2.2871000e - 01 \\ -2.2662044e + 00 \\ -1.4305025e + 00 \end{pmatrix}$$

Residu i estimació de l'error:

$$\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax} = \begin{pmatrix} -1.4901161e - 07 \\ 9.0408325e - 03 \\ -7.2631836e - 03 \\ -1.9132614e - 02 \end{pmatrix}, \quad r_a = 0.2237 \cdot 10^{-1}, \quad r_r = 0.5046 \cdot 10^{-4}$$

Mètode de Gauss

17

Cas general

Objectiu: Trobar el mètode de Gauss a aplicar en el cas general que se segueix dels dos casos particulars anteriors.

Partint d'un sistema lineal $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, cal construir els sistemes equivalents

$$(\mathbf{A}^{(1)}|\mathbf{b}^{(1)}) = (\mathbf{A}|\mathbf{b}) \mapsto (\mathbf{A}^{(2)}|\mathbf{b}^{(2)}) \mapsto \dots \mapsto (\mathbf{U}|\mathbf{y}) = (\mathbf{A}^{(n)}|\mathbf{b}^{(n)}).$$

que el redueixen al sistema triangular superior final $\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$ que es pot resoldre per substitució cap enrere.

Mètode de Gauss

18

Cas general

En el pas k cal fer l'eliminació gaussiana en la columna k :

- Per a cada fila i sota la fila k , és a dir, per a $i = k + 1, \dots, n$

$$m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \quad (\text{multiplicador})$$

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)} \quad (j = k + 1, \dots, n) \quad (\text{modificació de la matriu})$$

$$b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)} \quad (\text{modificació del terme independent})$$

Mètode de Gauss

19

Pivotatge

En el pas k de l'eliminació gaussiana, per trobar cada **multiplificador** $m_{ik} = a_{ik}/a_{kk}$ ($i = k + 1 \dots n$), cal dividir cada element per l'element diagonal a_{kk} , anomenat **pivot**. Per tant, el pivot ha de ser diferent de zero.

- Si $a_{kk} = 0$, caldria intercanviar l'equació k amb una de posterior per tal d'aconseguir un pivot diferent de zero. Si no fos possible, voldria dir que el determinant del sistema seria zero i el sistema no seria compatible i determinat.
- Si $a_{kk} \simeq 0$, pot crear inestabilitat numèrica i convé també fer l'intercanvi, **pivotatge**, amb una altra equació posterior, si es possible, per tal d'obtenir un pivot més gran si és possible.

20

El **pivotatge maximal per columnes** proposa, en el pas k , prendre com a pivot el coeficient, en una filera posterior de la columna k , de valor absolut més gran entre els a_{ik} ($i = k, \dots, n$).

- Es tria \bar{k} tal que

$$|a_{kk}^-| = \max_{i=k, \dots, n} |a_{ik}| \quad .$$

- S'intercanvien les files \bar{k} i k , si $\bar{k} \neq k$.
- S'aplica l'eliminació gaussiana a la columna k .

Mètode de Gauss

21

Pivotatge complet

El **pivotatge complet** proposa, en el pas k , prendre com a pivot el coeficient, en fileres i columnes posteriors a la k , de valor absolut més gran entre els a_{ij} ($i, j = k, \dots, n$).

Per això, en el pas k :

- Es trien \bar{k}, \hat{k} tal que

$$|a_{\bar{k}\hat{k}}| = \max_{i=k, \dots, n; j=k, \dots, n} |a_{ij}| \quad .$$

- S'intercanvien les files \bar{k} i k , si $\bar{k} \neq k$.
- S'intercanvien les columnes \hat{k} i k , si $\hat{k} \neq k$.
- S'aplica l'eliminació gaussiana a la columna k .

Un cop resolt el sistema amb pivotatge complet, cal intercanviar les components de la solució atenent als intercanvis de columnes.

Mètode de Gauss

22

Pivotatge maximal per columnes - Exemple 1

Exemple 1: Resoldre el sistema lineal

$$\begin{cases} x & & & + & z & = & 1, \\ x & + & 0.0001y & + & 2z & = & 2, \\ x & + & & y & + & z & = & 0, \end{cases}$$

usant aritmètica de punt flotant amb 4 dígit i arrodoniment.

Escrivim la matriu ampliada

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0.0001 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{array} \right).$$

Mètode de Gauss amb pivotatge

23

Pivotatge maximal per columnes - Exemple 1

Aplicació del mètode de Gauss amb pivotatge maximal per columnes.

Pas 1: No s'intercanvien files.

- Fila 2 \rightarrow Fila 2 – Fila 1.
- Fila 3 \rightarrow Fila 3 – Fila 1.

Resulta la matriu

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0.0001 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{array} \right).$$

Pas 2: S'intercanvien les files 2 \leftrightarrow 3.

- Fila 2 \leftrightarrow Fila 3.

Resulta la matriu

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0.0001 & 1 & 1 \end{array} \right).$$

24

■ Fila 3 \rightarrow Fila 3 - 0.0001 Fila 2.

Resulta la matriu

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{array} \right).$$

La solució del sistema és $x^T = (0, -1, 1)$.

- $\mathbf{r}^T = (0, 0, 0)$.
- En el Pas 2 s'ha fet intercanvi de files. El nou **pivot** ara és més gran i els errors no s'han disparat.

Mètode de Gauss amb pivotatge

25

Pivotatge maximal per columnes - Exemple 2

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 1.3499999e-04 & 2.0099999e-03 & -2.0699999e+00 & 3.0400000e+00 & 3.4500000e-01 \\ 4.2100000e+00 & 4.3200001e-02 & -1.8300000e-01 & -1.2300000e+01 & 8.7400002e+01 \\ -2.7200000e+00 & 2.0500000e+02 & -1.2100000e+01 & 3.2400000e+02 & -4.3400000e+02 \\ 8.7099997e-03 & 3.3200000e+02 & 2.3400000e+01 & 4.5600001e-02 & 2.3000000e+01 \end{array} \right)$$

Pas 1 S'intercanvien les files 1 ↔ 2.

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 4.2100000e+00 & 4.3200001e-02 & -1.8300000e-01 & -1.2300000e+01 & 8.7400002e+01 \\ 1.3499999e-04 & 2.0099999e-03 & -2.0699999e+00 & 3.0400000e+00 & 3.4500000e-01 \\ -2.7200000e+00 & 2.0500000e+02 & -1.2100000e+01 & 3.2400000e+02 & -4.3400000e+02 \\ 8.7099997e-03 & 3.3200000e+02 & 2.3400000e+01 & 4.5600001e-02 & 2.3000000e+01 \end{array} \right)$$

- (Fila 2) = (Fila 2) - (3.2066506e - 05) (Fila 1)
- (Fila 3) = (Fila 3) - (-6.4608073e - 01) (Fila 1)
- (Fila 4) = (Fila 4) - (2.0688835e - 03) (Fila 1)

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 4.2100000e+00 & 4.3200001e-02 & -1.8300000e-01 & -1.2300000e+01 & 8.7400002e+01 \\ 0.0000000e+00 & 2.0086146e-03 & -2.0699940e+00 & 3.0403943e+00 & 3.4219739e-01 \\ 0.0000000e+00 & 2.0502791e+02 & -1.2218233e+01 & 3.1605319e+02 & -3.7753253e+02 \\ 0.0000000e+00 & 3.3199991e+02 & 2.3400377e+01 & 7.1047269e-02 & 2.2819180e+01 \end{array} \right)$$

Mètode de Gauss amb pivotatge

26

Pivotatge maximal per columnes - Exemple 2

Pas 2 S'intercanvien les files 2 \leftrightarrow 4.

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 4.2100000e+00 & 4.3200001e-02 & -1.8300000e-01 & -1.2300000e+01 & 8.7400002e+01 \\ 0.0000000e+00 & 3.3199991e+02 & 2.3400377e+01 & 7.1047269e-02 & 2.2819180e+01 \\ 0.0000000e+00 & 2.0502791e+02 & -1.2218233e+01 & 3.1605319e+02 & -3.7753253e+02 \\ 0.0000000e+00 & 2.0086146e-03 & -2.0699940e+00 & 3.0403943e+00 & 3.4219739e-01 \end{array} \right)$$

■ (Fila 3) = (Fila 3) - (6.1755413e - 01) (Fila 2)

■ (Fila 4) = (Fila 4) - (6.0500456e - 06) (Fila 2)

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 4.2100000e+00 & 4.3200001e-02 & -1.8300000e-01 & -1.2300000e+01 & 8.7400002e+01 \\ 0.0000000e+00 & 3.3199991e+02 & 2.3400377e+01 & 7.1047269e-02 & 2.2819180e+01 \\ 0.0000000e+00 & 0.0000000e+00 & -2.6669233e+01 & 3.1600931e+02 & -3.9162460e+02 \\ 0.0000000e+00 & 0.0000000e+00 & -2.0701356e+00 & 3.0403938e+00 & 3.4205934e-01 \end{array} \right)$$

27

Pas 3: No s'intercanvien files.

- (Fila 4) = (Fila 4) - (7.7622615e - 02) (Fila 3)

$$\begin{pmatrix} 4.2100000e+00 & 4.3200001e-02 & -1.8300000e-01 & -1.2300000e+01 & 8.7400002e+01 \\ 0.0000000e+00 & 3.3199991e+02 & 2.3400377e+01 & 7.1047269e-02 & 2.2819180e+01 \\ 0.0000000e+00 & 0.0000000e+00 & -2.6669233e+01 & 3.1600931e+02 & -3.9162460e+02 \\ 0.0000000e+00 & 0.0000000e+00 & 0.0000000e+00 & -2.1489075e+01 & 3.0740986e+01 \end{pmatrix}$$

Pas 4

- Sistema compatible determinat

Solució del sistema triangular

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1.6479750e+01 \\ 2.2877161e-01 \\ -2.2662601e+00 \\ -1.4305402e+00 \end{pmatrix}$$

Residu i estimació de l'error:

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} 7.1525574e-07 \\ -7.6293945e-06 \\ -3.0517578e-05 \\ -9.5367432e-06 \end{pmatrix}, \quad r_a = 0.3287 \dots \cdot 10^{-4}, \quad r_r = 0.7416 \dots \cdot 10^{-7}$$

Resolució de sistemes lineals amb la mateixa matriu 28

Extensió del mètode de Gauss

Si es volen resoldre simultàniament els sistemes $\mathbf{Ax}^\ell = \mathbf{b}^\ell$ ($\ell = 1 \dots p$) amb la mateixa matriu \mathbf{A} però amb p termes independents diferents.

En l'etapa $k = 1, \dots, n - 1$:

- Per a cada fila i sota la fila k ($i = k + 1, \dots, n$):

$$m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \quad (\text{multiplicador})$$

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k+1)} \quad (j = k + 1, \dots, n) \quad (\text{modificació matriu})$$

$$b_i^{\ell(k+1)} = b_i^{\ell(k)} - m_{ik} b_k^{\ell(k)} \quad (\ell = 1, \dots, p) \quad (\text{modificació termes independents})$$

S'estén el mètode de Gauss a tots els termes independents en el bucle ($\ell = 1, \dots, p$). Després cal resoldre p sistemes triangulars per trobar les solucions \mathbf{x}^ℓ ($\ell = 1, \dots, p$).

29

Dues consideracions prèvies:

- Per resoldre un sistema lineal d'equacions per Gauss d'ordre n el nombre d'operacions és (exercici):

$$\frac{2}{3}n^3 + o(n^2) \quad (\text{ordre } n^3) .$$

- Quan cal resoldre $\mathbf{Ax}^\ell = \mathbf{b}^\ell$ ($\ell = 1 \dots p$) (la mateixa \mathbf{A} però amb p termes independents diferents), i no sabem els valors de \mathbf{b}^ℓ fins que no hem resolt els sistemes anteriors

$$\mathbf{Ax}^j = \mathbf{b}^j \quad (j = 1, \dots, \ell - 1).$$

Atenent a aquestes consideracions, es vol dissenyar un mètode per resoldre diversos sistemes lineals que comparteixen la mateixa matriu **A** fent menys operacions.

Descomposició LU

30

Sigui **A** una matriu quadrada amb $\det \mathbf{A} \neq 0$. La **descomposició LU** consisteix a trobar matrius **L** (lower) i **U** (upper) tals que

- **A** = **LU**,
- **L** és una matriu triangular inferior amb uns a la diagonal,
- **U** és una matriu triangular superior.

Si es pot fer aquesta descomposició, resoldre el sistema **Ax = b** equival resoldre el sistema **LUx = b**, que es pot fer resolent sistemes lineals triangulars (en un ordre concret):

- trobant **y** com a solució del sistema triangular inferior **Ly = b** per substitució cap endavant,
- trobant **x** com a solució del sistema triangular superior **Ux = y** per substitució cap endarrere.

Descomposició LU

31

Càlcul de les matrius **L** i **U**

Proposició: Sigui **A** una matriu $n \times n$ amb $\det \mathbf{A} \neq 0$.

- (a) Si existeix la descomposició LU de la matriu **A**, llavors aquesta és **única**.
- (b) Si es pot fer triangularització de Gauss de la matriu **A** sense pivotatge, llavors **A** admet descomposició LU i a més:

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ m_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \quad \text{i} \quad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}$$

on m_{ik} són els multiplicadors del mètode de Gauss sense pivotatge i $a_{ij}^{(k)}$ són els coeficients de la matriu $\mathbf{A}^{(k)}$ que no són modificats a partir des del pas k i que configuren la matriu triangular superior final.

Descomposició LU

32

Exemple

Es considera la matriu

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 \\ 0 & 2 & -1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Aplicant eliminació gaussiana resulta:

Pas 1:

■ Fila 3 → Fila 3 − m_{31} Fila 1, on $m_{31} = \frac{1}{1} = 1$.

s'obté la matriu

$$\mathbf{A}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & 2 & -2 \end{pmatrix}.$$

Descomposició LU

33

Exemple (continuació)

Pas 2:

- Fila 3 → Fila 3 − m_{32} Fila 2, on $m_{32} = \frac{2}{2} = 1$.

s'obté la matriu

$$\mathbf{A}^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Descomposició LU

34

Exemple (continuació)

El resultat de la descomposició és

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{i} \quad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Aplicacions a determinants i inverses

35

- (Determinants) El determinant d'una matriu \mathbf{A} es pot calcular a partir d'una triangularització d' \mathbf{A} fent ús del mètode de Gauss (amb o sense pivotatge):

$$\det \mathbf{A} = (-1)^s a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \cdots a_{nn}^{(n)}$$

on s és el nombre d'intercanvis de files o columnes realitzats.

- (Inverses) Per calcular la inversa d'una matriu \mathbf{A} es poden resoldre n sistemes lineals $\mathbf{A}\mathbf{x}^\ell = \mathbf{e}^\ell$, on \mathbf{e}^ℓ és el vector ℓ de la base canònica ($\ell = 1, \dots, n$). Això és, resolent el sistema matricial $\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{I}$. Aleshores, \mathbf{A}^{-1} és la matriu \mathbf{X} que té per columnes els vectors solució \mathbf{x}^ℓ ($\ell = 1, \dots, n$).

Mètodes iteratius

36

Mètode de Jacobi

El **mètode de Jacobi** proposa trobar una seqüència de vectors $\mathbf{x}^{(k)} \mapsto \mathbf{x}$ quan $k \mapsto \infty$, per resoldre el sistema lineal $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, com s'indica a continuació. Es considera que la matriu \mathbf{A} té els coeficients de la diagonal diferents de zero. En tal cas, es pot descompondre en la forma

$$\mathbf{A} = \mathbf{D}(\mathbf{L} + \mathbf{I} + \mathbf{U}),$$

on \mathbf{D} és diagonal (la diagonal de la matriu \mathbf{A}), \mathbf{I} és la matriu identitat, \mathbf{L} és triangular inferior amb zeros a la diagonal i \mathbf{U} és triangular superior amb zeros a la diagonal. És molt fàcil trobar les matrius \mathbf{L} i \mathbf{U} , només cal dividir cada fila d' \mathbf{A} per l'element de la diagonal, suposat no nul. La matriu resultant té uns a la part diagonal i les matrius \mathbf{L} i \mathbf{U} en conformen les parts triangular inferior i superior).

El sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ s'escriu de forma equivalent:

$$\mathbf{D}(\mathbf{L} + \mathbf{I} + \mathbf{U})\mathbf{x} = \mathbf{b} \iff (\mathbf{L} + \mathbf{I} + \mathbf{U})\mathbf{x} = \mathbf{D}^{-1}\mathbf{b} \iff \mathbf{x} = -(\mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{x} + \mathbf{D}^{-1}\mathbf{b}.$$

i se'n troba la solució \mathbf{x} de forma iterativa:

37

- Es pren qualsevol $\mathbf{x}^{(0)}$.
- S'aplica la recurrència: $\mathbf{x}^{(k+1)} = -(\mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{D}^{-1}\mathbf{b}$.

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

La matriu $\mathbf{B}_J = -(\mathbf{L} + \mathbf{U})$ s'anomena **matriu d'iteració**. El mètode iteratiu convergeix sii $\mathbf{B}_J^k \rightarrow \mathbf{0} \Leftrightarrow \rho(\mathbf{B}_J) < 1$, on $\rho(\mathbf{B}_J)$ és el mòdul màxim dels valors propis de \mathbf{B}_J . També convergeix si $\|\mathbf{B}_J\| < 1$ per alguna norma matricial associada a una norma vectorial, per exemple,

$$\|\mathbf{B}\|_{\infty} = \max_i \sum_j |b_{ij}|, \quad \|\mathbf{B}\|_1 = \max_j \sum_i |b_{ij}|.$$

38

Sigui **A** una matriu quadrada $n \times n$. Direm que $\mathbf{v} \neq 0$ és un vector propi d'**A** si existeix un nombre real λ tal que

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}.$$

λ s'anomena **valor propi d' \mathbf{A}** de **vector propi \mathbf{v}** . Els valors propis de la matriu

$$\begin{pmatrix} 4 & 0 & 4 \\ 8 & 4 & 0 \\ 16 & 0 & 4 \end{pmatrix}$$

són $\lambda_1 = 12$, $\lambda_2 = 4$ i $\lambda_3 = -4$. Els vectors propis amb component maximal unitària corresponents són, respectivament,

$$\mathbf{v}^1 = \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}^3 = \begin{pmatrix} -0.5 \\ 0.5 \\ 1 \end{pmatrix}$$

39

Tot i que no és un fet general s'assumeix que

- **A** admet n vectors propis (reals) linealment independents
- Els n valors propis corresponents (comptant multiplicitat) són reals i s'ordenen segons el seu mòdul com

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| > \dots > |\lambda_n|$$

És a dir, que només n'hi ha un de mòdul màxim.

El mètode de la potència considera les iteracions següents a partir d'una aproximació inicial $\mathbf{x}^{(0)}$:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)}, \quad k > 0$$

Es compleix que, genèricament,

$$q_i^{(k)} = \frac{x_i^{(k+1)}}{x_i^{(k)}} \rightarrow \lambda_1 \quad (i = 1, \dots, n) \quad , \quad \mathbf{y}^{(k)} = \frac{\mathbf{x}^{(k+1)}}{\lambda_1^{(k)}} \rightarrow \mathbf{v}^1,$$

on $\mathbf{v}^1 \neq 0$ és un vector propi associat al valor propi λ_1 .

Observació: La velocitat de convergència depèn del quocient $|\frac{\lambda_1}{\lambda_2}| > 1$. Quan

$|\lambda_1| > 1$ la velocitat pot ser molt lenta i cal esperar un límit d'iteracions

Càlcul de valors i vectors propis

40

Mètode de la potència

Excepte que $|\lambda_1| = 1$, la successió $\lambda_1^{(k)}$ o bé tendeix a zero o bé no està fitada. Això implica que, en el procés iteratiu (no mostrem aquí els detalls) hi hagi inconvenients numèrics (overflows, etc).

Per tal d'evitar-los a cada pas del procés iteratiu considerarem

$$\mathbf{z}^{(k)} = \frac{\mathbf{x}^{(k)}}{\|\mathbf{x}^{(k)}\|}$$

on $\|\cdot\|$ és alguna norma vectorial. Així, es proposa fer

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{A}\mathbf{z}^{(k)}$$

i es pot concloure que, genèricament,

$$\frac{x_i^{(k+1)}}{z_i^{(k)}} \rightarrow \lambda_1 \quad (\forall i = 1, \dots, n)$$

$$\mathbf{z}^{(k)} \rightarrow \mathbf{v}^1.$$

Càlcul de valors i vectors propis

41

Mètode de la potència: exemple

Problema: Per a la matriu

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 4 \\ 8 & 4 & 0 \\ 16 & 0 & 4 \end{pmatrix}$$

calcular $\lambda_1 = 12$, el valor propi de mòdul màxim pel **mètode de la potència**.Es troben les successions d'aproximacions del valor propi màxim λ_1 i del seu vector propi \mathbf{v}^1 amb component maximal unitària:

$$\begin{aligned}
 &20, \begin{pmatrix} 0.4 \\ 0.6 \\ 1 \end{pmatrix}; 10.4, \begin{pmatrix} 0.538462 \\ 0.538462 \\ 1 \end{pmatrix}; 12.6154, \begin{pmatrix} 0.487805 \\ 0.512195 \\ 1 \end{pmatrix}; 11.8049, \begin{pmatrix} 0.504132 \\ 0.504132 \\ 1 \end{pmatrix}; \\
 &12.0661, \begin{pmatrix} 0.49863 \\ 0.50137 \\ 1 \end{pmatrix}; 11.9781, \begin{pmatrix} 0.500457 \\ 0.500457 \\ 1 \end{pmatrix}; 12.0073, \begin{pmatrix} 0.499848 \\ 0.500152 \\ 1 \end{pmatrix}; \\
 &11.9976, \begin{pmatrix} 0.500051 \\ 0.500051 \\ 1 \end{pmatrix}; 12.0008, \begin{pmatrix} 0.499983 \\ 0.500017 \\ 1 \end{pmatrix}; 11.9997, \begin{pmatrix} 0.500006 \\ 0.500006 \\ 1 \end{pmatrix}; \\
 &12.0001, \begin{pmatrix} 0.499998 \\ 0.500002 \\ 1 \end{pmatrix}; 12, \begin{pmatrix} 0.500001 \\ 0.500001 \\ 1 \end{pmatrix}; 12, \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \\ 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

42

Observació: El mètode de la potència ens dona el valor propi de mòdul més gran (assumint és únic). Però, i els altres?

Potència inversa: Si \mathbf{A} es pot invertir (altrament $\lambda = 0$ seria valor propi d' \mathbf{A}), i existeix un únic valor propi de modul mínim λ_m d' \mathbf{A} , podem aplicar el mètode de la potència a la matriu \mathbf{A}^{-1} i trobar el seu valor propi màxim μ_M : $\lambda_m = \frac{1}{\mu_M}$.

Potència inversa desplaçada: Si $\mathbf{A} - d\mathbf{I}$ es pot invertir (altrament $\lambda = d$ seria valor propi d' \mathbf{A}), i existeix un únic valor propi $\lambda_m(d)$ d' \mathbf{A} a distància mínima de d , podem aplicar el mètode de la potència a la matriu $(\mathbf{A} - d\mathbf{I})^{-1}$ i trobar el seu valor propi màxim $\mu_M(d)$: $\lambda_m(d) = d + \frac{1}{\mu_M(d)}$.

Deflació: Quan es coneix un valor propi λ i un vector propi \mathbf{v} d'una matriu, els mètodes de deflació permeten construir una nova matriu de dimensió menor que tingui els mateixos valors propis de l'anterior sense λ o de la mateixa dimensió amb els mateixos valors propis en què s'ha substituït λ per 0. Els mètodes de deflació es poden encadenar amb mètodes de la potència que, de forma recursiva, a cada pas troben un valor propi i un vector propi de la matriu anterior, a la qual es torna aplicar la deflació.

Aquest tema no el tractarem

Càlcul de valors i vectors propis

43

Mètode de la potència inversa desplaçada: exemple

Es troben les successions d'aproximacions del valor propi λ_2 més proper a $d = 3$ i del seu vector propi \mathbf{v}^2 amb component maximal unitària:

$$\begin{aligned}
 &4.61538, \begin{pmatrix} 0.0769231 \\ 1 \\ 0.384615 \end{pmatrix}; \quad 4.22789, \begin{pmatrix} 0.0284858 \\ 1 \\ 0.0164918 \end{pmatrix}; \quad 4.00478, \begin{pmatrix} 5.97786 \cdot 10^{-4} \\ 1 \\ 7.00605 \cdot 10^{-3} \end{pmatrix}; \\
 &4.00349, \begin{pmatrix} 4.36861 \cdot 10^{-4} \\ 1 \\ 4.07534 \cdot 10^{-5} \end{pmatrix}; \quad 3.99997, \begin{pmatrix} -4.34664 \cdot 10^{-6} \\ 1 \\ 1.10298 \cdot 10^{-4} \end{pmatrix}; \\
 &4.00006, \begin{pmatrix} 7.07245 \cdot 10^{-6} \\ 1 \\ -2.85483 \cdot 10^{-6} \end{pmatrix}; \quad 4, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

Càlcul de valors i vectors propis

44

Mètode de la potència inversa desplaçada: exemple

Es troben les successions d'aproximacions del valor propi λ_3 més proper a $d = -3$ i del seu vector propi \mathbf{v}^3 amb component maximal unitària:

$$\begin{aligned}
 &-1.33333, \begin{pmatrix} -0.333333 \\ 0.619048 \\ 1 \end{pmatrix}; -4.21622, \begin{pmatrix} -0.513514 \\ 0.479316 \\ 1 \end{pmatrix}; -3.98579, \begin{pmatrix} -0.499112 \\ 0.502913 \\ 1 \end{pmatrix}; \\
 &-4.00095, \begin{pmatrix} -0.500059 \\ 0.499583 \\ 1 \end{pmatrix}; -3.99994, \begin{pmatrix} -0.499996 \\ 0.500059 \\ 1 \end{pmatrix}; \\
 &-4, \begin{pmatrix} -0.5 \\ 0.499992 \\ 1 \end{pmatrix}; -4, \begin{pmatrix} -0.5 \\ 0.5 \\ 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

Sistemes sobredeterminats

45

Exemple de càlcul de pesos atòmics

Els pesos atòmics de l'oxigen i del nitrogen són aproximadament $O = 16$ i $N = 14$. Es donen a continuació els pesos moleculars dels sis òxids de nitrogen:

Òxid	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

Pregunta: Com es poden calcular més acuradament els pesos atòmics de l'oxigen i del nitrogen, usant les dades de la taula anterior?

Observació: Tenim 2 incògnites i 6 equacions!

Idea: Trobar “la millor solució” del problema

Sistemes sobredeterminats

46

Definició i plantejament

Un sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, on

- \mathbf{A} és una matriu d'ordre $m \times n$ i de rang n ,
- $m > n$,

es diu **sistema sobredeterminat**.

Problema. Trobar la millor “solució” $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)^\top$.

Estratègia. Buscar \mathbf{x} tal que l'error quadràtic

$$r_a^2 = \|\mathbf{b} - \mathbf{Ax}\|_2^2 = \sum_{i=1}^m (b_i - a_{i1}x_1 - \dots - a_{in}x_n)^2$$

sigui el més petit possible.

La solució d'aquest problema d'optimització, es diu que és la solució del sistema sobredeterminat $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, en **el sentit dels mínims quadrats**.

Sistemes sobredeterminats

47

Problema analític

Trobar el mínim global de la funció

$$S(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^m \left(b_i - \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \right)^2 .$$

- La funció és positiva i tendeix a infinit quan \mathbf{x} tendeix a infinit. Per tant, S té un mínim global.
- Els extrems locals satisfan, per a tot $k = 1, \dots, n$,

$$0 = \frac{\partial S}{\partial x_k} = 2 \sum_{i=1}^m \left(b_i - \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \right) a_{ik} ,$$

$$\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_{ik} a_{ij} x_j = \sum_{i=1}^m a_{ik} b_k .$$

Sistemes sobredeterminats

48

Problema analític

- L'equació dels extrems locals es pot escriure, en forma compacta,

$$\mathbf{A}^\top \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{A}^\top \mathbf{b}$$

Es tracta d'un sistema lineal $n \times n$, on la matriu $\mathbf{A}^\top \mathbf{A}$ té rang n (perquè el rang d' \mathbf{A} és màxim, n), anomenat sistema d'*equacions normals*.

- Té solució única, que correspon a l'únic extrem local de la funció S , que és també mínim global.

En resum, la solució de $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ en el sentit dels mínims quadrats és la solució única del sistema d'equacions normals.

$$\mathbf{A}^\top \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{A}^\top \mathbf{b}.$$

49

Problema geomètric. Com

$$\mathbf{Ax} = x_1 \begin{pmatrix} a_{11} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{pmatrix} + \cdots + x_n \begin{pmatrix} a_{1n} \\ \vdots \\ a_{mn} \end{pmatrix},$$

es tracta de trobar la combinació lineal dels vectors columna d'**A** més propera a **b**.

Solució:

- La mínima longitud del residu $\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}$ es té quan \mathbf{r} és perpendicular al subespai generat pels vectors columna d' \mathbf{A} .
- Llavors, \mathbf{x} satisfà $\mathbf{A}^\top (\mathbf{b} - \mathbf{Ax}) = \mathbf{0}$, o equivalentment

$$(\mathbf{A}^\top \mathbf{A}) \mathbf{x} = \mathbf{A}^\top \mathbf{b}.$$

D'aquí el nom d'equacions normals.

Mínims quadrats

50

Exemple: Càlcul de pesos atòmics

Es volen calcular més acuradament els pesos atòmics de l'oxigen i del nitrogen, que són aproximadament $O = 16$ i $N = 14$, usant els pesos moleculars dels sis òxids de nitrogen donats a continuació.

Òxid	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

Siguin N i O els pesos atòmics del nitrogen i de l'oxigen, respectivament. Per estimar el seu valor, es planteja el sistema sobredeterminat següent:

$$\begin{array}{rclcl}
 N + O & = & 30.006 \\
 2N + O & = & 44.013 \\
 N + 2O & = & 46.006 \\
 2N + 3O & = & 76.012 \\
 2N + 5O & = & 108.010 \\
 2N + 4O & = & 92.011
 \end{array}
 \longrightarrow
 \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 1 & 2 \\ 2 & 3 \\ 2 & 5 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} N \\ O \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 30.006 \\ 44.013 \\ 46.006 \\ 76.012 \\ 108.010 \\ 92.011 \end{pmatrix}.$$

Mínims quadrats

51

Exemple: Càlcul de pesos atòmics

Sistema d'equacions normals $\mathbf{A}^\top \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{A}^\top \mathbf{b}$.

$$\mathbf{A}^\top \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 2 & 3 & 5 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 1 & 2 \\ 2 & 3 \\ 2 & 5 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 18 & 29 \\ 29 & 56 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{A}^\top \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 2 & 3 & 5 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 30.006 \\ 44.013 \\ 46.006 \\ 76.012 \\ 108.010 \\ 92.011 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 716.104 \\ 1302.161 \end{pmatrix}.$$

Mínims quadrats

52

Exemple: Càlcul de pesos atòmics

Aproximació mínim-quadràtica:

$$\begin{pmatrix} 18 & 29 \\ 29 & 56 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N \\ O \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 716.104 \\ 1302.161 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} N \\ O \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 14.00691616766468 \\ 15.99929341317365 \end{pmatrix}$$

Residu i estimació de l'error residual:

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} -2.09581 \cdot 10^{-4} \\ -1.25749 \cdot 10^{-4} \\ 4.97006 \cdot 10^{-4} \\ 2.87425 \cdot 10^{-4} \\ -2.99401 \cdot 10^{-4} \\ -5.988024 \cdot 10^{-6} \end{pmatrix}, r_a = 6.9213 \dots 10^{-4}, r_r = 3.93967 \dots 10^{-6}$$

53

Ajust de dades en models lineals

54

Models lineals

Sistema sobredeterminat $m \times n$, $\mathbf{F}\mathbf{a} = \mathbf{y}$:

$$\begin{pmatrix} f_1(\mathbf{x}_1) & f_2(\mathbf{x}_1) & \cdots & f_n(\mathbf{x}_1) \\ f_1(\mathbf{x}_2) & f_2(\mathbf{x}_2) & \cdots & f_n(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ f_1(\mathbf{x}_m) & f_2(\mathbf{x}_m) & \cdots & f_n(\mathbf{x}_m) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}$$

\mathbf{F} és la matriu de control, \mathbf{y} el vector de respostes, i \mathbf{a} el vector de paràmetres.

Resolució per mínims quadrats - sistema d'equacions normals:

$$\mathbf{F}^T \mathbf{F} \mathbf{a} = \mathbf{F}^T \mathbf{y}$$

55

Un exemple de regressió lineal

Per mesurar la concentració d'una solució hom pot utilitzar test coliomètrics, en els que un cert reactiu s'afegeix a la mostra, de forma que la intensitat del color obtingut depèn de la concentració. De fet, la intensitat de la llum depèn de l'absorbància de la substància, que caracteritza l'absorció d'energia per part d'aquesta.

Realitzem un test colorimètric per a la concentració de glucosa, obtenint les dades següents:

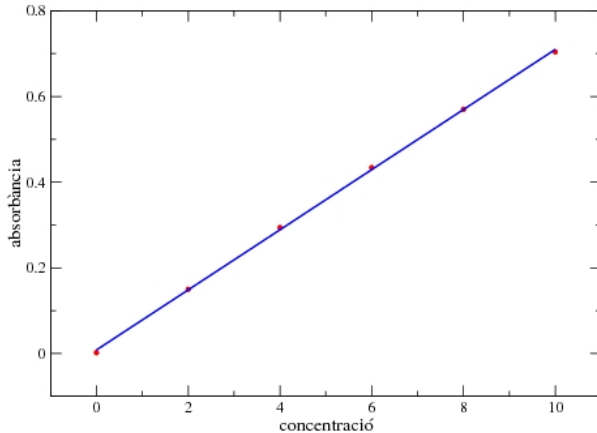
x= concentració (mM)	0	2	4	6	8	10
y= absorbància	0.002	0.150	0.294	0.434	0.570	0.704

La representació gràfica de les dades suggereix que la dependència de l'absorbància respecte a la concentració és lineal. Així, doncs, volem ajustar les dades a una recta

$$y = a_0 + a_1 x.$$

56

Un exemple de regressió lineal



57

Exemple de regressió lineal

Equacions normals i solució:

$$\mathbf{F}^\top \mathbf{F} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 4 & 6 & 8 & 10 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 2 \\ 1 & 4 \\ 1 & 6 \\ 1 & 8 \\ 1 & 10 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}^\top \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 4 & 6 & 8 & 10 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.002 \\ 0.150 \\ 0.294 \\ 0.434 \\ 0.570 \\ 0.704 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 6 & 30 \\ 30 & 220 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2.154 \\ 15.68 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.00829 \\ 0.07014 \end{pmatrix}$$

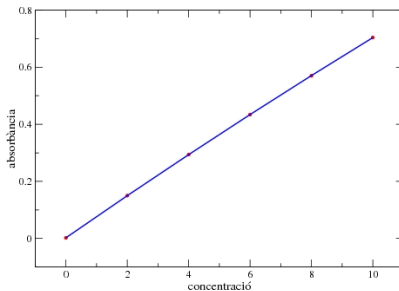
Residu i errors residuals:

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} 0.002 \\ 0.150 \\ 0.294 \\ 0.434 \\ 0.570 \\ 0.704 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 2 \\ 1 & 4 \\ 1 & 6 \\ 1 & 8 \\ 1 & 10 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.00828 \\ 0.07014 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.00628 \\ 0.00143 \\ 0.00514 \\ 0.00486 \\ 0.00057 \\ -0.00571 \end{pmatrix}, \quad r_a = 0.1115 \dots 10^{-1}, \quad r_r = 0.1055 \dots 10^{-1}$$

58

Model millor per mesurar l'absorbància en funció de la concentració de glucosa:

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2$$



Ajust de dades en models lineals

59

Exemple de regressió parabòlica

Equacions normals i solució:

$$\mathbf{F}^T \mathbf{F} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 4 & 6 & 8 & 10 \\ 0 & 4 & 16 & 36 & 64 & 100 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 4 & 16 \\ 1 & 6 & 36 \\ 1 & 8 & 64 \\ 1 & 10 & 100 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{F}^T \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 4 & 6 & 8 & 10 \\ 0 & 4 & 16 & 36 & 64 & 100 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.002 \\ 0.150 \\ 0.294 \\ 0.434 \\ 0.570 \\ 0.704 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 6 & 30 & 220 \\ 30 & 220 & 1800 \\ 220 & 1800 & 15664 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2.154 \\ 15.68 \\ 127.808 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.00221 \\ 0.07496 \\ -0.00046 \end{pmatrix}.$$

Residu i errors residuals:

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} 0.002 \\ 0.150 \\ 0.294 \\ 0.434 \\ 0.570 \\ 0.704 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 4 & 16 \\ 1 & 6 & 36 \\ 1 & 8 & 64 \\ 1 & 10 & 100 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.00221 \\ 0.07496 \\ -0.00046 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.00021 \\ -0.00021 \\ 0.00029 \\ 0.00000 \\ -0.00064 \\ 0.00036 \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} r_a &= 0.8435 \dots 10^{-3}, \\ r_r &= 0.7978 \dots 10^{-3}. \end{aligned}$$

60

Exemple de regressió lineal múltiple

Es realitza una investigació per tal d'explorar les condicions de reacció en les quals s'obté un polímer amb elasticitat màxima. Les variables amb influència rellevant sobre l'elasticitat E han estat reduïdes a tres en una fase anterior de la investigació: les concentracions (%) C_1 i C_2 de dos components, i la temperatura ($^{\circ}\text{C}$) de reacció T . En un experiment per avançar més en aquesta investigació s'han obtingut les dades de la taula.

C_1	C_2	T	E
15	2.3	135	25.74
21	2.3	135	48.94
15	3.1	135	42.78
21	3.1	135	35.94
15	2.3	155	41.50
21	2.3	155	50.10
15	3.1	155	46.06
21	3.1	155	27.70

Es proposa un model lineal del tipus

$$E = b_0 + b_1 C_1 + b_2 C_2 + b_3 T :$$

Font: G.E.P. Box & N.R. Draper (1986), *Empirical Model Building and Response Surfaces*, Wiley.

Ajust de dades en models lineals

61

Exemple de regressió lineal múltiple

$$\mathbf{F}\mathbf{x} = \mathbf{y} : \mathbf{F} = \begin{pmatrix} 1 & 15 & 2.3 & 135 \\ 1 & 21 & 2.3 & 135 \\ 1 & 15 & 3.1 & 135 \\ 1 & 21 & 3.1 & 135 \\ 1 & 15 & 2.3 & 155 \\ 1 & 21 & 2.3 & 155 \\ 1 & 15 & 3.1 & 155 \\ 1 & 21 & 3.1 & 155 \end{pmatrix}, \mathbf{x} = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}, \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 25.74 \\ 48.94 \\ 42.78 \\ 35.94 \\ 41.50 \\ 50.10 \\ 46.06 \\ 27.70 \end{pmatrix}$$

Equacions normals $\mathbf{F}^\top \mathbf{F}\mathbf{x} = \mathbf{F}^\top \mathbf{y}$:

$$\begin{pmatrix} 8 & 144 & 216 & 1160 \\ 144 & 2664 & 388.8 & 20880 \\ 216 & 388.8 & 59.6 & 3132 \\ 1160 & 20880 & 3132 & 169000 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 318.76 \\ 5757.48 \\ 855.132 \\ 46339.8 \end{pmatrix}$$

Aproximació mínim-quadràtica amb residu i errors residuals:

$$\begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 24.8612 \\ 0.275 \\ -4.3125 \\ 0.1495 \end{pmatrix}; \mathbf{r} = \begin{pmatrix} -13.51 \\ 8.04 \\ 6.98 \\ -1.51 \\ -0.74 \\ 6.21 \\ 7.27 \\ -12.74 \end{pmatrix}, r_a = 23.5039 \dots, r_r = 0.2038 \dots$$

Model resultant:

$$E = 24.8612 + 0.275C_1 - 4.3125C_2 + 0.1495T.$$

62

Exemple de regressió no lineal

Els problemes de regressió no lineal, en models en que els paràmetres no hi apareixen linealment, són més complicats que els problemes de regressió lineal, ja que s'han de resoldre sistemes d'equacions no lineals (utilitzant, per exemple, el mètode de Newton).

Afortunadament, hi ha casos en els que el problema no lineal es pot reduir a un de lineal mitjançant una transformació adequada de les variables de control i/o de resposta.

63

Els processos termodinàmics adiabàtics de sistemes físics caracteritzats per la pressió P , el volum V i la temperatura T (els gasos, per exemple) segueixen una llei del tipus $PV^\gamma = C$, on C és constant al llarg del procés (i depèn de la temperatura, que es manté constant).

Es volen ajustar els valors de C i de γ en un procés adiabàtic segons la taula de mesures experimentals següent:

P (atm)	1.62	1.00	0.75	0.62	0.52	0.46
V (litres)	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0

Prenent logaritmes a l'equació d'estat $PV^\gamma = C$, s'obté un 'model lineal':

$$\log P = \log C - \gamma \log V$$

escollint:

- $x = \log V$ com a variable de control,
- $y = \log P$ com a variable de resposta,
- $a_0 = \log C$, $a_1 = -\gamma$ com a paràmetres.

Ajust de dades en models no lineals

64

Un exemple de regressió no lineal

El problema queda reduït a una regressió lineal simple: $y = a_0 + a_1 x$ amb la taula de dades transformada:

$x = \log V$	-0.69314718	0	0.40546510	0.69314718	0.91629076	1.0986123
$y = \log P$	0.48242614	0	-0.28768209	-0.47803581	-0.65392649	-0.77652878

S'obté la solució següent de les equacions normals:

$$a_0 = -2.0496447 \cdot 10^{-3}, \quad a_1 = -7.0297122 \cdot 10^{-1}.$$

Finalment, com que $C = \exp(a_0)$ i $\gamma = -a_1$, els paràmetres cercats són:

$$C = 0.99795245, \quad \gamma = 0.70297122.$$

Nota: Si s'escullen $x = \log P$ com a variable de control i $y = \log V$ com a variable de resposta, llavors el model de regressió lineal és

$\log V = \frac{1}{\gamma} \log C - \frac{1}{\gamma} \log P$, de forma que $a_0 = \frac{1}{\gamma} \log C$, $a_1 = -\frac{1}{\gamma}$. Les estimacions obtingudes són ara:

$$C = 0.99800582, \quad \gamma = 0.70310375.$$