Cap. 3 Rezolvarea numerică a sistemelor supradeterminate de ecuaţii algebrice liniare în sensul celor mai mici pătrate

3.1 Formularea problemei

$$A \cdot \underline{x} = \underline{b}, \quad A \in \Re^{m \times n}, \underline{b} \in \Re^{m \times 1}, \underline{x} \in \Re^{n \times 1}$$

$m > n$ - sistem supradeterminat

Definiţii:

- $A \in \Re^{m \times n}$ are *coloanele liniar independente (monică),* dacă vectorii coloană ai săi sunt liniar independenţi:

$$\sum_{j=1}^{n} \alpha_j \cdot \underline{a}_j = \underline{0}_m \quad \Rightarrow \quad \alpha_j = 0, \forall j = 1, \ldots, n$$

- *subspaţiul imagine* al matricei A: $\mathrm{Im}(A) = \{\underline{y} \in \Re^{m \times 1} / \underline{y} = A \cdot \underline{x}, \ \forall \underline{x} \in \Re^{n \times 1}\} \subseteq \Re^{m \times 1}$

- *subspaţiul nul (nucleu) al matricei* A: $N(A) = \{\underline{x} \in \Re^{n \times 1} / A \cdot \underline{x} = \underline{0}_m\} \subseteq \Re^{n \times 1}$

Propoziţie:

Pentru orice matrice $A \in \Re^{m\times n}, m > n$ *, următoarele afirmaţii sunt echivalente:*

❶ A *este o matrice monică*;

❷ $\mathrm{rang}(A) = n$;

❸ $N(A) = \{\underline{0}_n\}$;

❹ *matricea* $A^T \cdot A$ *este pozitiv definită, deci inversabilă (nesingulară)*.

Concluzie:

Problema de calcul are o soluţie unică dacă:

$$\underline{b} \in \mathrm{Im}(A)$$

în ipoteza că rang(A) = n.
Trebuie reformulată problema de calcul pentru a asigura existenţa unei soluţii în caz contrar.

⇓

Principiul folosit este minimizarea unei *funcţii criteriu* de tipul:

$$V_\alpha(\underline{x}) = \| \underline{b} - A \cdot \underline{x} \|_\alpha$$

$\underline{x}^*$ - pseudosoluţie a sistemului dacă $V_\alpha(\underline{x}^*) =$ minim

- Condiţii de minim:

$$\nabla_{\underline{x}}\{V_\alpha(\underline{x})\} = \left[\frac{\partial V_\alpha(\underline{x})}{\partial x_1} \quad \cdots \quad \frac{\partial V_\alpha(\underline{x})}{\partial x_n} \right]^T = \underline{0}_{nx1}$$

$$\nabla_{\underline{x}\underline{x}}\{V_\alpha(\underline{x})\} \overset{not}{=} \Delta_{\underline{x}}\{V_\alpha(\underline{x})\} = \nabla_{\underline{x}}\{\nabla^T_{\underline{x}}\{V_\alpha(\underline{x})\}\} > 0$$

$\Rightarrow$ V_α - diferenţiabilă

$$V(\underline{x}) = \frac{1}{2}\cdot \| \underline{b} - A\cdot \underline{x} \|_2^2 = \frac{1}{2}\cdot \| \underline{r} \|_2^2 = \frac{1}{2}\cdot \underline{r}^T \cdot \underline{r} = \frac{1}{2}\cdot \sum_{i=1}^{m} r_i^2$$

- Problema de calcul devine:

$$\| \underline{b} - A\cdot \underline{x}^* \|_2^2 = \min_{\underline{x}\in\Re^{n\times 1}} \{ \| \underline{b} - A\cdot \underline{x} \|_2^2 \}$$

$\underline{x}^*$ - *pseudosoluţie în sensul celor mai mici pătrate*

Condiţii de minim:

$$\nabla_{\underline{x}}\{V(\underline{x})\} = (1/2)\cdot 2\cdot \underbrace{(A^T\cdot A\cdot \underline{x} - A^T\cdot \underline{b}) = \underline{0}_n}_{\text{sistem de ecuaţii normale}}$$

$$\Delta_{\underline{x}}\{V(\underline{x})\} = (1/2)\cdot 2\cdot (A^T\cdot A) > 0$$

3.2 Triangularizarea ortogonală a matricelor

3.2.1 Matrici ortogonale

Definiţie:

Fie o matrice $Q \in \Re^{m \times m}$. *Matricea* Q *se numeşte ortogonală dacă este îndeplinită una din relaţiile:*

$$Q^T \cdot Q = I_m \qquad Q^T = Q^{-1}$$

$$Q = [\underline{q}_1 \;\vdots\; \underline{q}_i \;\vdots\; \underline{q}_j \;\vdots\; \underline{q}_m], \quad \underline{q}_i \in \Re^{m \times 1}, \quad i = 1, \ldots, m$$

$$\underline{q}_i^T \cdot \underline{q}_j = 0, \quad \forall i \neq j, \quad i, j = 1, \ldots, m; \quad \| \underline{q}_i \|_2^2 = 1$$

- Proprietate ⇒ *o matrice ortogonală păstrează norma vectorială euclidiană*:

$$\forall \underline{z} \in \Re^{m \times 1}, \quad \| Q \cdot \underline{z} \|_2^2 = \| \underline{z} \|_2^2$$

- *matricele Householder:* $U = I_m - \dfrac{\underline{u} \cdot \underline{u}^T}{\beta}$

$\underline{u} \in \Re^{m\times 1}$ - *vector Houseolder* $\beta = \dfrac{1}{2} \cdot \underline{u}^T \cdot \underline{u} = \dfrac{1}{2} \cdot \|\underline{u}\|_2^2$

proprietate: $U^T = U = U^{-1}$

3.2.2 Procedura de triangularizare ortogonală a unei matrici de rang complet

***Propoziţie*:**
Oricare ar fi matricea $A \in \Re^{m\times n}, m > n$ *de rang complet pe coloane, există o matrice* $Q \in \Re^{m\times m}$ *ortogonală, astfel încât matricea* A *se poate scrie:* $A = Q \cdot R$ *unde matricea* $R \in \Re^{m\times n}$ *are următoarea structură:*

$$R = \begin{bmatrix} R_1 \\ \vdots \\ \mathbf{0}_{(m-n)\times n} \end{bmatrix}$$

unde matricea $R_1 \in \Re^{n\times n}$ *este superior triunghiulară nesingulară cu* $r_{ii} \neq 0, \forall i = 1,\dots,n$

<u>Demonstraţia</u> este constructivă şi constituie însuşi algoritmul de triangularizare ortogonală a matricei A (factorizare QR a matricii A):

<u>atribuie</u> $A_1 \leftarrow A$
<u>pentru</u> $k = \overline{1, n}$ <u>execută</u>
⌈* determinare matrice Householder U_k astfel încât:
| $(U_k \cdot A_k)_{i,k} = 0, \quad i = k+1, \dots, m$
| <u>atribuie</u> $A_{k+1} \leftarrow U_k \cdot A_k$
⌊•
<u>atribuie</u> $R \leftarrow A_{n+1}$ ✧

- Fie $\underline{\xi} = [\xi_1 \ \cdots \ \xi_{k-1} \ \xi_k \ \xi_{k+1} \ \cdots \ \xi_m]^T \in \Re^{m \times 1}$ coloana k a matricii A_k

$\sigma_k^2 = \sum_{i=k}^{m} \xi_i^2 \neq 0 \Rightarrow \quad \exists U_k \in \Re^{m \times m}$ astfel încât $U_k \cdot \underline{\xi} = [\xi_1 \ \cdots \ \xi_{k-1} \ \rho_k \ 0 \ \cdots \ 0]^T, \quad \rho_k^2 = \sigma_k^2$

$$U_k = I_m - \underline{u}_k \cdot \underline{u}_k^T / \beta_k, \quad \beta_k = \| \underline{u}_k \|_2^2 / 2 \quad \underline{u}_k = [0 \ \cdots \ 0 \ u_{k,k} \ u_{k+1,k} \ \cdots \ u_{m,k}]^T$$

$$\sigma_k = \mathrm{sign}(\xi_k) \cdot \sqrt{\sum_{i=k}^{m} \xi_i^2}, \quad u_{k,k} = \xi_k + \sigma_k, \quad u_{i,k} = \xi_i, i = k+1, \dots, m,$$

$$\beta_k = \sigma_k \cdot u_{k,k}, \quad \rho_k = -\sigma_k .$$

- Daca $\sigma_k^2 = \sum_{i=k}^{m} \xi_i^2 = 0 \Rightarrow \xi_i = 0,\ \forall i = k,\dots,m \Rightarrow \begin{cases} \sigma_k = 0 \\ \underline{u}_k = \underline{0}_m \\ \beta_k = 0 \quad (|\beta_k| \le \varepsilon_{impus}) \end{cases} \Rightarrow U_k$ nu există

- Fie $\underline{\eta} = [\eta_1 \ \cdots \ \eta_m]^T \neq \underline{\xi}$

$$\left.\begin{aligned} U_k \cdot \underline{\eta} &= \left(I_m - \frac{\underline{u}_k \cdot \underline{u}_k^T}{\beta_k} \right) \cdot \underline{\eta} = \underline{\eta} - \frac{\underline{u}_k \cdot \underline{u}_k^T}{\beta_k} \cdot \underline{\eta} \\ \tau &= \frac{\underline{u}_k^T \cdot \underline{\eta}}{\beta_k} = \sum_{j=k}^{m} \frac{u_{j,k} \cdot \eta_j}{\beta_k} \end{aligned}\right\} \Rightarrow \boxed{U_k \cdot \underline{\eta} = \underline{\eta} - \tau \cdot \underline{u}_k}$$

$$\Downarrow$$

$$\left(U_k \cdot \underline{\eta}\right)_i = \begin{cases} \eta_i, & i = 1,\dots,k-1 \\ \eta_i - \tau \cdot u_{i,k}, & i = k,\dots,m \end{cases}$$

- Daca $\underline{\eta}_{[j]} = [\eta_1 \ \cdots \ \eta_j \ 0 \ \cdots \ 0]^T \in \Re^{m \times 1} \quad j = 1,\dots,k-1 \Rightarrow U_k \cdot \underline{\eta}_{[j]} = \underline{\eta}_{[j]}$

METODE NUMERICE – curs 5

- Tabloul general al transformărilor:

$$\left.\begin{array}{l} U_n \cdot U_{n-1} \cdot \ldots \cdot U_1 \cdot A = R \\ U = U_n \cdot U_{n-1} \cdot \ldots \cdot U_1 \end{array}\right\} \Rightarrow \left.\begin{array}{l} U \cdot A = R \\ \Downarrow \\ Q = U^{-1} = U^T = U_1 \cdot U_2 \cdot \ldots \cdot U_n \end{array}\right\} \Rightarrow \boxed{A = Q \cdot R}$$

3.3 Rezolvarea sistemelor supradeterminate

$$A \cdot \underline{x} = \underline{b}, \quad A \in \Re^{m\times n}, \underline{b} \in \Re^{m\times 1}, \underline{x} \in \Re^{n\times 1} \xrightarrow{U\cdot} U \cdot A \cdot \underline{x} = U \cdot \underline{b}$$

$$A \in \Re^{m\times n} \quad \mathrm{rang}(A) = n \quad m > n$$

$$\Downarrow$$

$$R \cdot \underline{x} = \underline{d}; \quad R = U \cdot A, \quad \underline{d} = U \cdot \underline{b}$$

$$\begin{bmatrix} R_1 \\ \ldots \\ \mathbf{0}_{(m-n)\times n} \end{bmatrix} \cdot \underline{x} = \begin{bmatrix} \underline{d}_1 \\ \ldots \\ \underline{d}_2 \end{bmatrix}, \quad \underline{d}_1 \in \Re^{n\times 1}, \quad \underline{d}_2 \in \Re^{(m-n)\times 1}$$

$$\left.\begin{array}{l} \underline{r} = \underline{b} - A \cdot \underline{x}, \qquad V(\underline{x}) = \| \underline{r} \|_2^2 = \| U \cdot \underline{r} \|_2^2 = \| \underline{d}_1 - R_1 \cdot \underline{x} \|_2^2 + \| \underline{d}_2 \|_2^2 \\ \underline{d}_2 \neq \underline{0}_{(m-n)} \end{array}\right\} \Rightarrow \| \underline{d}_1 - R_1 \cdot \underline{x} \|_2^2 \overset{!}{=} 0$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{R_1 \cdot \underline{x}^* = \underline{d}_1}$$

exemplu

Cap. 4 Calculul valorilor şi vectorilor proprii

4.1 Formularea problemei

- Se consideră o matrice reală, pătratică, de ordin *n*: $A \in \Re^{n\times n}$

Definiţie:

Oricare ar fi matricea $A \in \Re^{n\times n}$ *, un număr în general complex,* λ *, se numeşte* ***valoare proprie*** *a matricei A dacă există un vector,* $\underline{x} \in \mathbf{C}^{n\times 1}$*,* $\underline{x} \neq \underline{0}_n$ *astfel încât:*

$$A \cdot \underline{x} = \lambda \cdot \underline{x}$$

$\underline{x}$ – vector propriu al matricii A asociat valorii proprii λ

$$(\lambda \cdot I_n - A) \cdot \underline{x} = \underline{0}_n \qquad \underline{x} \neq \underline{0}_n$$

$$\Downarrow$$

$\lambda \cdot I_n - A$ - singulară

$$\Downarrow$$

ecuaţie caracteristică $\longrightarrow$ $p_n(\lambda) = \det(\lambda \cdot I_n - A) = 0$

polinom caracteristic $\longrightarrow$ $p_n(\lambda) = \lambda^n + \alpha_1 \cdot \lambda^{n-1} + \dots + \alpha_{n-1} \cdot \lambda + \alpha_n \qquad \alpha_i \in \Re, i = 1, \dots, n$

Teoremă de existenţă:

Orice matrice pătratică reală, de ordin n, *are exact* n *valori proprii, în general complexe şi nu neapărat distincte, care coincid cu rădăcinile polinomului caracteristic ataşat matricei. Dacă există valori proprii complexe, atunci acestea apar în perechi complex conjugate.*

⇓

Orice matrice $A \in \Re^{n\times n}$ *are cel puţin un vector propriu.*

 Nu se recomandă calculul numeric al valorilor proprii prin rezolvarea ecuaţiei caracteristice deoarece:

- rezolvarea ecuaţiilor polinomiale este o problemă prost condiţionată;
- coeficienţii polinomului caracteristic volum mare de calcule erori

 Metodele practice pentru calculul numeric al valorilor proprii proceduri iterative

- matricea A adusă la *formă canonică Schur* prin transformări ortogonale de asemănare

4.2 Forma canonică Schur

Definiţie:

Două matrici, $A, A' \in \Re^{n\times n}$ *, se numesc ortogonal asemenea, dacă există o matrice ortogonală ,* $Q \in \Re^{n\times n}$ *astfel încât:*

$$A' = Q^T \cdot A \cdot Q$$

- **Proprietăţi:**

❶ Matricile ortogonal asemenea au aceleaşi valori proprii:

$$\lambda_i(A) = \lambda'_i(A'), \quad i = 1,\dots,n$$

❷ Relaţia dintre vectorii proprii ai două matrici ortogonal asemenea:

$$\underline{x}_i(A) = Q \cdot \underline{x}'_i(A'), \quad i = 1,\dots,n$$

Definiţie:

O matrice se spune că este în formă bloc superior triunghiulară, dacă are următoarea structură:

$$T = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & \cdots & T_{1m} \\ \mathbf{0} & T_{22} & \cdots & T_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & T_{mm} \end{bmatrix}, \quad T_{ii} \in \Re^{p_i \times p_i}$$

$T_{ii}, i = 1,\dots,m$ - matrici pătratice

$p_i \in \{1, 2\}, \forall i = \overline{1, m}$ → *formă cvasi-superior triunghiulară*

METODE NUMERICE – curs 5

Teoremă de existenţă:

Oricare ar fi matricea $A \in \Re^{n \times n}$ *, există o matrice ortogonală* $\tilde{Q} \in \Re^{n \times n}$*, astfel încât matricea:*

forma canonică Schur reală a matricei A $\longrightarrow$ $S = \tilde{Q}^T \cdot A \cdot \tilde{Q}$

este în formă cvasi-superior triunghiulară. Blocurile diagonale de ordin întâi ale matricei S *reprezintă valorile proprii reale ale matricei* A *şi ale matricei* S*, iar blocurile diagonale de ordin doi au valori proprii complex conjugate reprezentând valori proprii complex conjugate ale matricelor* A *şi* S.

Observaţii:

❶ coloanele matricii $\tilde{Q} \in \Re^{n \times n}$ $\underline{\tilde{q}}_k, k = 1, \ldots, n$ $\square$ *vectori Schur ai matricii A*

❷ Demonstraţia teoremei este constructivă $\square$ **algoritmul QR**

4.3 Algoritmul QR pentru calculul formei canonice Schur

$\square$ **Principiu:** construcţia unui şir de matrici ortogonal asemenea convergent la forma canonică Schur

$$A_0 = A, A_1, \ldots, A_k, \ldots \qquad A_k \xrightarrow{k \to \infty} S$$

$$\Downarrow$$

$$A_k = \left[a_{ij}^{[k]}\right]_{1 \le i, j \le n} \qquad a_{ij}^{[k]} \xrightarrow{k \to \infty} 0 \qquad i \ge j + 2$$

$$\exists \; a_{i+1,i}^{[k]} \xrightarrow{k \to \infty} 0 \qquad i=1,\ldots,n-1$$

METODE NUMERICE – curs 5

 se defineşte şirul de matrici $\{A_k\}_{k\geq 0}$, $A_0 = A$

pas QR cu deplasare explicită → $A_k - \mu_k \cdot I_n = Q_k \cdot R_k, \quad A_{k+1} = R_k \cdot Q_k + \mu_k \cdot I_n$

$Q_k \in \Re^{n\times n}$ - ortogonală; $R_k \in \Re^{n\times n}$ - superior triunghiulară

$\mu_k \in \Re$ - deplasare (cu rol de accelerare a convergenţei)

Propoziţie:

Matricele şirului QR sunt ortogonal asemenea: $A_{k+1} = Q_k^T \cdot A_k \cdot Q_k$

 Observaţie:

- algoritmul original QR consumator de timp se foloseşte o formă optimizată

Forma implementabilă a algoritmului QR cu deplasare explicită

 parcurge <u>două faze de lucru</u>:

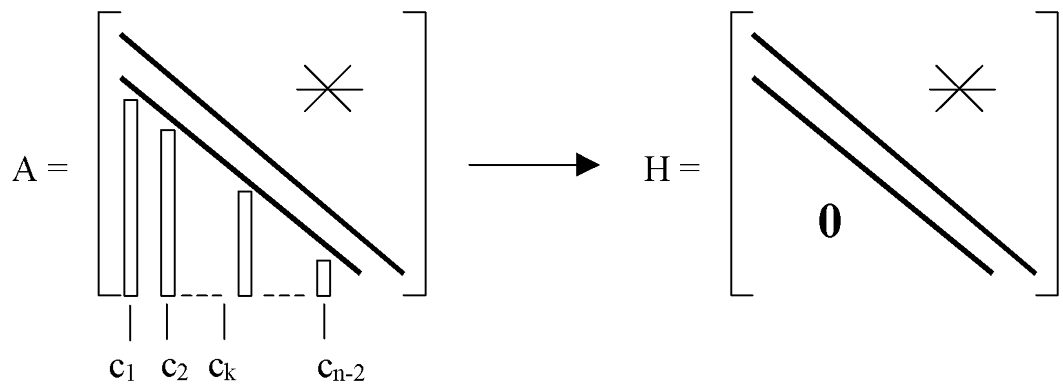
❶ faza 1 – pregătitoare (zerorizare elemente de sub sub-diagonala principală)
❷ faza 2 – aplicare algoritm QR matricii obţinută la faza 1

↓

se obţine forma canonică Schur

□ ***Faza 1***

- procedură directă de aducere a matricei A la forma superior Hessenberg (H)



- se folosesc matrici Householder în scopul anulării, coloană cu coloană, a elementelor matricei A situate sub sub-diagonala principală

- *algoritm*:

<u>atribuie</u> $A_1 \leftarrow A$

<u>pentru</u> $k = 1, n-2$ <u>execută</u>

⌈ * determinare matrice Householder astfel încât:

| $(U_{k+1} \cdot A_k)_{i,k} = 0, i = k+2, \ldots, n$

| <u>atribuie</u> $A'_{k+1} \leftarrow U_{k+1} \cdot A_k$

| <u>atribuie</u> $A_{k+1} \leftarrow A'_{k+1} \cdot U_{k+1}^T = A'_{k+1} \cdot U_{k+1}$

⌊ •

<u>atribuie</u> $H \leftarrow A_{n-1}$

METODE NUMERICE – curs 5

· sinteza matricii Householder, U_{k+1}

$$U_{k+1} = I_n - (\underline{u}_{k+1} \cdot \underline{u}_{k+1}^T / \beta_{k+1}) \quad \left\{ \begin{array}{l} \underline{u}_{k+1} = [0 \ \cdots \ 0 \ \ u_{k+1,k+1} \ \cdots \ u_{n,k+1}]^T \\[2ex] \sigma_{k+1} = \operatorname{sign}(a_{k+1,k}^{[k]}) \cdot \sqrt{\sum_{i=k+1}^{n} (a_{i,k}^{[k]})^2}, \ \ u_{k+1,k+1} = a_{k+1,k}^{[k]} + \sigma_{k+1} \\[2ex] u_{i,k} = a_{i,k}^{[k]}, \ \ i = k+2, \ldots, n, \ \ \beta_{k+1} = \sigma_{k+1} \cdot u_{k+1,k+1} \end{array} \right.$$

· tabloul general al transformărilor:

$$\underbrace{U_{n-1} \cdot \cdots \cdot U_2}_{U} \cdot A \cdot \underbrace{U_2 \cdot \cdots \cdot U_{n-1}}_{U^T} = H$$

$$H = U \cdot A \cdot U^T$$

· sunt parcurse exact (n – 2) iteraţii