Mètodes Numèrics — Grau de Matemàtiques
Àlgebra Lineal numèrica

Lluís Alsedà

adaptat dels *Apunts de Mètodes Numèrics* de Josep Maria Mondelo, 2009

Departament de Matemàtiques
Universitat Autònoma de Barcelona

http://www.mat.uab.cat/∼alseda

juny de 2016 (versió 1.5.0)

UAB Universitat Autònoma de Barcelona DEPARTAMENT DE **MATEMÀTIQUES**

Continguts

En aquest tema estudiarem:

- Mètodes *directes* per a la resolució de sistemes d'equacions lineals (és a dir, mètodes que, llevat dels errors d'arrodoniment, construeixen la solució exacta en un nombre finit de passos).
- Mètodes *iteratius* per a la resolució de sistemes d'equacions lineals (és a dir, mètodes que, com en el cas de zeros de funcions, aproximen iterativament la solució del sistema).
- Càlcul numèric de valors i vectors propis

Pel que fa als sistemes lineals, considerarem sistemes com ara

$$\left.\begin{array}{rcrcrcrcr} x_1 & + & x_2 & & & + & 3x_4 & = & 4 \\ 2x_1 & + & x_2 & - & x_3 & + & x_4 & = & 1 \\ 3x_1 & - & x_2 & - & x_3 & + & 2x_4 & = & -3 \\ -x_1 & + & 2x_2 & + & 2x_3 & - & x_4 & = & 4 \end{array}\right\},$$

que, matricialment, s'escriu $Ax = b$ essent

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 3 \\ 2 & 1 & -1 & 1 \\ 3 & -1 & -1 & 2 \\ -1 & 2 & 2 & -1 \end{pmatrix}, \qquad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}, \qquad b = \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \\ -3 \\ 4 \end{pmatrix},$$

on A és la *matriu de coeficients*, x és el *vector d'incògnites* i b és el *terme independent*.

Hi ha una llarga llista de sistemes lineals amb matrius de forma *especial* que es resolen amb mètodes ad-hoc. Per exemple matrius *triangulars*, *Hessenberg*, *diagonals*, *tridiagonals*, *pentadiagonals*, *banda*...

Una matriu $A = (a_{i,j})$ tal que $a_{i,j} = 0$ sempre que $i > j$ s'anomena *triangular superior*:

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,n-1} & a_{1,n} \\ & a_{2,2} & \cdots & a_{2,n-1} & a_{2,n} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ & & & & a_{n,n} \end{pmatrix}$$

Anàlogament, una matriu $A = (a_{i,j})$ tal que $a_{i,j} = 0$ sempre que $i < j$ s'anomena *triangular inferior*:

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & & & & \\ a_{2,1} & a_{2,2} & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ a_{n-1,1} & a_{n-1,2} & \dots & a_{n-1,n-1} & \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \dots & a_{n,n-1} & a_{n,n} \end{pmatrix}$$

Una matriu $A = (a_{i,j})$ tal que $a_{i,j} = 0$ sempre que $i \neq j$ s'anomena *diagonal*:

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{2,2} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & a_{n,n} \end{pmatrix}$$

Introducció (cont.)

Definició

Un sistema lineal amb matriu triangular s'anomena *sistema triangular*.

Perquè ens interessen els sistemes triangulars?

Molts mètodes directes acaben reduint el sistema general a un sistema triangular que es resol fàcilment, com veurem més endavant.

Introducció (cont.)

Determinants

Primer de tot, s'ha de remarcar que el determinant no és una quantitat gaire rellevant numèricament. En particular, NO és una bona mesura de "com a prop de singular" es troba una matriu. És molt fàcil trobar matrius gairebé singulars amb determinant molt gran, i també matrius "fortament" regulars amb determinant molt petit.

Per altra banda, notem que el determinant d'una matriu triangular $A = (a_{i,j})$ és el producte dels elements de la diagonal $\prod_{i=1}^{n} a_{i,i}$.

Així el mètode més senzill de calcular determinants és convertir la matriu en una matriu triangular $A = (a_{i,j})$ mitjançant transformacions que preservin el determinant (llevat del signe, que canvia cada cop que intercanviem files). Llavors, el determinant és pot calcular com $(-1)^{\kappa} \prod_{i=1}^{n} a_{i,i}$ on κ denota el nombre d'intercanvis de files o columnes que hem realitzat.

El problema és aquest enfoc és *mal condicionat* (ja veurem més endavant què vol dir això i perquè és dolent).

Observació (inverses de matrius)

La regla bàsica és que **mai mai mai s'ha d'invertir una matriu** (excepte en el cas de matrius molt concretes amb propietats especials).

Aquest és un problema *molt mal condicionat* com mostra el següent exemple:

Exemple

Considerem la matriu

$$A = \begin{pmatrix} 6566 & -5202 & -4040 & -5524 & 1420 & 6229 \\ 4104 & 7449 & -2518 & -4588 & -8841 & 4040 \\ 5266 & -4008 & 6803 & -4702 & 1240 & 5060 \\ -9306 & 7213 & 5723 & 7961 & -1981 & -8834 \\ -3782 & 3840 & 2464 & -8389 & 9781 & -3334 \\ -6903 & 5610 & 4306 & 5548 & -1380 & 3539 \end{pmatrix}.$$

Exemple (cont.)

Amb aritmètica de 16 dígits (encara que el format d'escriptura és de 8 dígits) té com a inversa la matriu $\widetilde{A^{-1}}$:

$$10^5 \cdot \begin{pmatrix} -8.6217487\cdot 10^6 & -86217.487 & -862.17487 & -6.0964970\cdot 10^6 & -60964.970 & -609.64970 \\ -6.1574706\cdot 10^6 & -61574.706 & -615.74706 & -4.3539892\cdot 10^6 & -43539.892 & -435.39892 \\ -862.29682 & -8.6229682 & -0.0862297 & -609.73593 & -6.0973593 & -0.0609736 \\ -6.0102673\cdot 10^6 & -60102.673 & -601.02673 & -4.2499008\cdot 10^6 & -42499.008 & -424.99008 \\ -6.0712409\cdot 10^6 & -60712.409 & -607.12409 & -4.2930156\cdot 10^6 & -42930.156 & -429.30156 \\ -609.73593 & -6.0973593 & -0.0609736 & -431.14841 & -4.3114841 & -0.0431148 \end{pmatrix}$$

i $A \cdot \widetilde{A^{-1}}$ (que hauria de ser la identitat) és:

$$\begin{pmatrix} 1.3373 & -0.009012 & 0.00028176 & 0.6079 & 0.001105 & -0.00010799 \\ -1.8215 & 0.989801 & -0.00012774 & 0.5784 & -0.016475 & -0.00017368 \\ 0.5305 & 0.016919 & 1.00023071 & 0.3908 & 0.001227 & 0.00004949 \\ 0.5171 & -0.017956 & -0.00051494 & 1.2634 & -0.002623 & 0.00008375 \\ 1.0720 & 0.009347 & -0.00040766 & 1.0360 & 1.022710 & -0.00000637 \\ 0.3041 & -0.007657 & -0.00032962 & 0.3282 & -0.004138 & 0.99992667 \end{pmatrix},$$

que és un **desastre de matriu identitat** es miri per on es miri.

Un dels casos més freqüents en què sembla que s'ha d'invertir una matriu però no cal és per a calcular el producte $x = A^{-1}b$ on A és una matriu $n \times n$ i $b \in \mathbb{R}^n$.

Aquest producte és equivalent a $Ax = b$ on x és el vector que volem calcular, que és un sistema lineal d'n equacions amb n incògnites. Així, el calcul del producte de la inversa d'una matriu per un vector es pot canviar per la resolució d'un sistema d'equacions.

Aquest procés està mes ben condicionat que la inversió de matrius i, a més, *és molt més ràpid*, com veurem a continuació.

Si no hi ha més remei que invertir una matriu com es fa?:

Volem calcular una matriu X tal que $AX = \mathrm{Id}$ on Id denota la matriu identitat de la mateixa dimensió que la matriu A.

Observem que si escrivim les matrius X i Id per columnes tenim: $X = \big([x_1]\,[x_2]\,\cdots\,[x_n]\big)$ i $\mathrm{Id} = \big([e_1]\,[e_2]\,\cdots\,[e_n]\big)$ on e_i denota l'$i-$èssim vector de la base canònica d'$\mathbb{R}^n$. Llavors, l'equació

$$A\big([x_1]\,[x_2]\,\cdots\,[x_n]\big) = \big([e_1]\,[e_2]\,\cdots\,[e_n]\big),$$

(per les propietats del producte de matrius) és equivalent a:

$$Ax_i = e_i \quad \text{per } i = 1, 2, \ldots, n.$$

És a dir, a resoldre n sistemes lineals d'n equacions amb n incògnites *tots ells amb la mateixa matriu* (això redueix considerablement la complexitat de càlcul).

En aquest apartat estudiarem la resolució de sistemes lineals triangulars superiorment i inferiorment, donat que són cassos particulars interessants i que molts altres mètodes generals acaben reduïts a un sistema triangular.

Considerem un sistema lineal triangular superior :

$$\begin{pmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & \cdots & u_{1,n-1} & u_{1,n} \\ & u_{2,2} & \cdots & u_{2,n-1} & u_{2,n} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & u_{n-1,n-1} & u_{n-1,n} \\ & & & & u_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{n-1} \\ b_n \end{pmatrix}.$$

Observem que el sistema té solució única si i només si tots els $u_{i,i}$ són no nuls.

Un sistema triangular superior es resol fent *substitució endarrere*:

$$x_n = \frac{b_n}{u_{n,n}},$$

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

$$\vdots$$

$$x_2 = \frac{b_2 - u_{2,3}x_3 - u_{2,4}x_4 - \cdots - u_{2,n}x_n}{u_{2,2}},$$

$$x_1 = \frac{b_1 - u_{1,2}x_2 - u_{1,3}x_3 - \cdots - u_{1,n}x_n}{u_{1,1}}.$$

Aquest procediment es pot formalitzar en el següent:

Algorisme (substitució endarrere)

for $i = n \div 1$ **do**
  $x_i \leftarrow b_i;$
  for $j = i+1 \div n$ **do**
    $x_i \leftarrow x_i - u_{i,j}x_j;$
  end for
  $x_i \leftarrow x_i / u_{i,i};$
end for

Mètodes directes per sistemes triangulars (cont.)

Comptem el nombre d'operacions:

- Divisions: n (una per cada valor de i).
- Productes: fem un producte per cada terme del sumatori:

$$\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=i+1}^{n} 1 = \sum_{i=1}^{n} (n-i) = \frac{n(n-1)}{2}.$$

- Sumes i restes: si tenim en compte la resta juntament amb les sumes, fem una suma o resta per cada terme del sumatori. Per tant, el nombre de sumes i restes és el mateix que el de productes.

Si sumem totes les operacions, obtenim

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

Un sistema lineal triangular inferior és de la forma

$$\begin{pmatrix} l_{1,1} & & & & \\ l_{2,1} & l_{2,2} & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ l_{n-1,1} & l_{n-1,2} & \cdots & l_{n-1,n-1} & \\ l_{n,1} & l_{n,2} & \cdots & l_{n,n-1} & l_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{n-1} \\ b_n \end{pmatrix}$$

i es resol fent *substitució endavant*.

Exercici

Formuleu analíticament i algorísmicament la substitució endavant i compteu el nombre d'operacions necessari per dur-la a terme.

Considerem ara el cas d'un sistema diagonal:

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{2,2} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & a_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix},$$

amb $a_{1,1}, \ldots, a_{n,n} \neq 0$.

En aquest cas la solució és

$$x_i = \frac{b_i}{a_{i,i}}$$

per $i = 1, 2, \ldots, n$.

Algorisme

for $i = 1 \div n$ **do**
  $x_i \leftarrow \frac{b_i}{a_{i,i}}$;
end for

El nombre d'operacions en aquest cas és n divisions.

Aquest mètode pertany a la família dels *mètodes directes* (per resoldre sistemes lineals).

La diferència amb l'ús del mètode de Gauss a què esteu habituats és que aquí pensarem en implementacions que siguin fàcils de fer per a una màquina (és a dir, fàcils de programar), en comptes de fàcils de fer per a un humà.

Pensant en descriure un algorisme general, desenvolupem el mètode de Gauss per resoldre un sistema lineal general 3×3 $Ax = b$, amb

$$A^{(1)} := A = \begin{pmatrix} a_{1,1}^{(1)} & a_{1,2}^{(1)} & a_{1,3}^{(1)} \\ a_{2,1}^{(1)} & a_{2,2}^{(1)} & a_{2,3}^{(1)} \\ a_{3,1}^{(1)} & a_{3,2}^{(1)} & a_{3,3}^{(1)} \end{pmatrix}, \qquad b_1 := b = \begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(1)} \end{pmatrix}.$$

Mètode de Gauss (cont.)

El primer pas del mètode de Gauss és

$$\begin{pmatrix} a_{1,1}^{(1)} & a_{1,2}^{(1)} & a_{1,3}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{2,1}^{(1)} & a_{2,2}^{(1)} & a_{2,3}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ a_{3,1}^{(1)} & a_{3,2}^{(1)} & a_{3,3}^{(1)} & b_3^{(1)} \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow[F_3 \leftarrow F_3 - \left(a_{3,1}^{(1)}/a_{1,1}^{(1)}\right) F_1]{F_2 \leftarrow F_2 - \left(a_{2,1}^{(1)}/a_{1,1}^{(1)}\right) F_1} \left(\begin{array}{cccc|c} a_{1,1}^{(1)} & a_{1,2}^{(1)} & a_{1,3}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{2,2}^{(1)} - m_{2,1} a_{1,2}^{(1)} & a_{2,3}^{(1)} - m_{2,1} a_{1,3}^{(1)} & b_2^{(1)} - m_{2,1} b_1^{(1)} \\ 0 & a_{3,2}^{(1)} - m_{3,1} a_{1,2}^{(1)} & a_{3,3}^{(1)} - m_{3,1} a_{1,3}^{(1)} & b_3^{(1)} - m_{3,1} b_1^{(1)} \end{array}\right),$$

on hem pres $m_{2,1} = \frac{a_{2,1}^{(1)}}{a_{1,1}^{(1)}}$ i $m_{3,1} = \frac{a_{3,1}^{(1)}}{a_{1,1}^{(1)}}$ com a *multiplicadors* del pas 1 de l'eliminació gaussiana. L'element $a_{1,1}^{(1)}$ s'anomena *pivot*.

Anomenem $A^{(2)}$ a aquesta darrera matriu i fem un pas més:

$$A^{(2)} =: \left(\begin{array}{ccc|c} a_{1,1}^{(1)} & a_{1,2}^{(1)} & a_{1,3}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{2,2}^{(2)} & a_{2,3}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & a_{3,2}^{(2)} & a_{3,3}^{(2)} & b_3^{(2)} \end{array}\right)$$

$$\xrightarrow{F_3 \leftarrow F_3 - \left(a_{3,2}^{(2)}/a_{2,2}^{(2)}\right) F_2} \left(\begin{array}{ccc|c} a_{1,1}^{(1)} & a_{1,2}^{(1)} & a_{1,3}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{2,2}^{(2)} & a_{2,3}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{3,3}^{(2)} - m_{3,2} a_{2,3}^{(2)} & b_3^{(2)} - m_{3,2} b_2^{(2)} \end{array}\right)$$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} a_{1,1}^{(1)} & a_{1,2}^{(1)} & a_{1,3}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{2,2}^{(2)} & a_{2,3}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{3,3}^{(3)} & b_3^{(3)} \end{array}\right) =: A^{(3)},$$

on hem pres el *multiplicador* $m_{3,2} = \frac{a_{3,2}^{(2)}}{a_{2,2}^{(2)}}$ i $a_{2,2}^{(2)}$ com a *pivot*.

Mètode de Gauss (cont.)

Ara, el sistema lineal original $Ax = b$ és equivalent a $A^{(3)}x = b^{(3)}$:

$$\left.\begin{array}{rcrcrcl} a_{1,1}^{(1)}x_1 & + & a_{1,2}^{(1)}x_2 & + & a_{1,3}^{(1)}x_3 & = & b_1^{(1)} \\ & & a_{2,2}^{(2)}x_2 & + & a_{2,3}^{(2)}x_3 & = & b_2^{(2)} \\ & & & & a_{3,3}^{(3)}x_3 & = & b_3^{(3)} \end{array}\right\},$$

que es pot resoldre mitjançant substitució endarrere.

El procediment general el podem formalitzar en el següent

Algorisme (Mètode de Gauss)

for $k = 1 \div n-1$ **do** ▻ *Pas de la matriu $A^{(k)}$ a la matriu $A^{(k+1)}$*
  for $i = k+1 \div n$ **do** ▻ *Arreglem la fila i*
    $m_{i,k} \leftarrow \frac{a_{i,k}^{(k)}}{a_{k,k}^{(k)}}$; ▻ *Multiplicador corresponent a la fila i*
    $b_i^{(k+1)} \leftarrow b_i^{(k)} - m_{i,k} b_k^{(k)}$; ▻ *Arreglem la $i-$èssima component del terme independent*
    for $j = k+1 \div n$ **do** ▻ *Columna*
      $a_{i,j}^{(k+1)} \leftarrow a_{i,j}^{(k)} - m_{i,k} a_{k,j}^{(k)}$; ▻ *Arreglem els elements de la fila i columna j*
    end for
  end for
end for

Més en general, suposem que volem resoldre alhora p sistemes lineals amb la mateixa matriu A de coeficients:

$$Ax_1 = b_1, \; Ax_2 = b_2, \; \ldots, \; Ax_p = b_p.$$

Observació

Això és, precisament, el procediment per a invertir una matriu (amb $p = n$), com hem explicat abans.

En aquest cas, el mètode de Gauss es duu a terme mitjançant la reducció simultània de tots els termes independents. La matriu inicial que permet fer això és:

$$A^{(1)} := \left(\begin{array}{ccc|ccc} a_{1,1}^{(1)} & \dots & a_{1,n}^{(1)} & b_{1,1}^{(1)} & \dots & b_{1,p}^{(1)} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n,1}^{(1)} & \dots & a_{n,n}^{(1)} & b_{n,1}^{(1)} & \dots & b_{n,p}^{(1)} \end{array}\right).$$

Aplicant el mètode anterior amb reducció simultània de tots els termes independents obtenim la matriu final:

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc} a_{1,1}^{(1)} & \dots & a_{1,n}^{(1)} & b_{1,1}^{(1)} & \dots & b_{1,p}^{(1)} \\ & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & a_{n,n}^{(n)} & b_{n,1}^{(n)} & \dots & b_{n,p}^{(n)} \end{array}\right).$$

El pas d'una a l'altra es duu a terme mitjançant el següent

Algorisme (Mètode de Gauss per resoldre p sistemes simultàniament)

for $k = 1 \div n - 1$ **do** ▷ *Pas de la matriu $A^{(k)}$ a la matriu $A^{(k+1)}$*
  for $i = k + 1 \div n$ **do** ▷ *Arreglem la fila i*
    $m_{i,k} \leftarrow \frac{a_{i,k}^{(k)}}{a_{k,k}^{(k)}}$; ▷ *Multiplicador corresponent a la fila i*
    for $j = k + 1 \div n$ **do** ▷ *Columna de la matriu*
      $a_{i,j}^{(k+1)} \leftarrow a_{i,j}^{(k)} - m_{i,k} a_{k,j}^{(k)}$; ▷ *Arreglem els elements de la fila i columna j*
    end for
    for $j = 1 \div p$ **do** ▷ *Columna del terme independent*
      $b_{i,j}^{(k+1)} \leftarrow b_{i,j}^{(k)} - m_{i,k} b_{k,j}^{(k)}$; ▷ *Arreglem la fila i columna j del terme independent*
    end for
  end for
end for

A continuació comptarem el nombre d'operacions del mètode de Gauss.

Separarem el càlcul del nombre de

- divisions (n'hi ha una per cada arranjament de fila) del de
- productes i restes: els podem comptar simultàniament donat que per cada valor de j als dos bucles més interns efectuem tant un producte com una resta.

- Càlcul del nombre de divisions:

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

- Càlcul del nombre de productes i restes:

$$\sum_{k=1}^{n-1}\sum_{i=k+1}^{n}\left(\underbrace{\sum_{j=k+1}^{n} 1}_{\text{tros de la matriu}} + \underbrace{\sum_{j=1}^{p} 1}_{\text{tros del terme independent}}\right)$$

$$= \sum_{k=1}^{n-1}\sum_{i=k+1}^{n}\Big(\underbrace{n-k+p}_{\text{no depèn de } i}\Big) = \sum_{k=1}^{n-1}(n-k)(n-k+p)$$

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

$$= \frac{n}{3}(n-1)\left(n-\tfrac{1}{2}\right) + p\frac{n(n-1)}{2}$$

$$= \frac{2n^3-(3-3p)n^2+(1-3p)n}{6}.$$

Mètode de Gauss 10/11

Llavors, el nombre total d'operacions és:

$$\begin{aligned}\#\{\text{ops}\} &= 2\#\{\text{restes i productes}\} + \#\{\text{divisions}\}\\ &= 2\frac{2n^3-(3-3p)n^2+(1-3p)n}{6} + \frac{3n(n-1)}{6}\\ &= \frac{4n^3-(3-6p)n^2+(-1-6p)n}{6}.\end{aligned}$$

Si $p \ll n$ (per exemple per $p=1$)

$$\#\{\text{ops}\} = \frac{2n^3}{3} + O(n^2).$$

Si $p = n$ (cas d'invertir una matriu)

$$\#\{\text{ops}\} = \frac{5n^3}{3} + O(n^2).$$

Observació

A molts llibres es compta una suma i un producte com una operació, de manera que donen $\frac{n^3}{3} + O(n^2)$ com el nombre d'operacions al mètode de Gauss.

Tal com hem descrit l'eliminació gaussiana, podria ser que, enmig del procés, algun dels $a_{k,k}^{(k)}$ sortís zero i no poguéssim continuar.

Veurem que si $\det(A) \neq 0$ existeix una fila $i > k$ tal que $a_{i,k}^{(k)} \neq 0$. Aleshores cal intercanviar les files i i k (això dóna lloc a un sistema d'equacions lineals equivalent, que te per tant la mateixa solució). D'aquest procés se'n diu *pivotar per files*.

Proposició

Si $\det(A) \neq 0$, *l'eliminació gaussiana es pot dur a terme pivotant (si cal) només files.*

Demostració

Suposem que anem fent eliminació gaussiana i obtenim pivots

$$a_{1,1}^{(1)} \neq 0,\ a_{2,2}^{(2)} \neq 0,\ \ldots,\ a_{k-1,k-1}^{(k-1)} \neq 0,\ a_{k,k}^{(k)} = 0.$$

Denotem per $A^{(k)}$ la matriu al començament del pas k:

$$A^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{1,1}^{(1)} & a_{1,2}^{(1)} & \ldots & a_{1,k}^{(1)} & \ldots & a_{1,n}^{(1)} \\ & a_{2,2}^{(2)} & \ldots & a_{2,k}^{(2)} & \ldots & a_{2,n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{k,k}^{(k)} & \ldots & a_{k,n}^{(k)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{n,k}^{(k)} & \ldots & a_{n,n}^{(k)} \end{pmatrix}, \tag{1}$$

on la submatriu requadrada, que anomenem $B^{(k)}$, és la part que queda per reduir.

Demostració (cont.)

Anem a veure per reducció a l'absurd que $\exists\ i \in \{k, \dots, n\}$ tal que $a_{i,k}^{(k)} \neq 0$. Suposem que no. És a dir: $a_{i,k}^{(k)} = 0\ \forall i = k \div n$ (que implica $\det(B^{(k)}) = 0$). Aleshores, d'una banda,

$$0 \neq \det(A) = \det(A)^{(k)},$$

donat que per hipòtesi A és no-singular, i cada pas d'eliminació gaussiana deixa invariant el determinant. D'altra banda, d'acord amb (1),

$$\det(A)^{(k)} = a_{1,1}^{(1)} a_{2,2}^{(2)} \dots a_{k-1,k-1}^{(k-1)} \det(B^{(k)}) = 0,$$

que contradiu l'afirmació anterior. □

Estratègies de pivotatge (cont.)

Amb aquest procediment (o sigui, intercanviant files només si el pivot surt zero), podem resoldre qualsevol sistema lineal no-singular suposant que treballem amb precisió infinita (a mà o amb un manipulador simbòlic com *Maple* o *Mathematica*).

Desafortunadament no és possible treballar sempre en precisió infinita perquè:

- Hauríem de treballar amb coeficients racionals, nombres irracionals coneguts com π o e, o funcions elementals d'aquestos. No té sentit fer-ho amb dades experimentals, perquè porten error.
- Amb un manipulador simbòlic no té sentit plantejar-nos resoldre sistemes lineals grans, com ara 2500×2500 degut a la seva lentitud.

Amb aritmètica finita, no té sentit preguntar-se si $a_{k,k}^{(k)}$ és igual a zero, donat que pot ser que teòricament sigui zero però a la pràctica no degut als errors d'arrodoniment, o viceversa. Podem considerar que $a_{k,k}^{(k)} = 0$ si $\left|a_{k,k}^{(k)}\right|$ es troba per sota certa tolerància, però llavors hi ha el problema de triar la tolerància, que no és trivial.

A més d'això, pivotar només quan tenim certa certesa que $a_{k,k} = 0$ pot donar inestabilitats numèriques, com podem veure al següent

Exemple

Volem resoldre amb aritmètica de punt flotant amb $b = 10$, $t = 4$, el sistema

$$\left.\begin{array}{rcl} x_1 & & + \;\; x_3 = 1 \\ x_1 + 0.0001x_2 & & + \; 2x_3 = 2 \\ x_1 + \quad\quad\; x_2 & & + \;\; x_3 = 0 \end{array}\right\}.$$

Apliquem el mètode de Gauss:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0.0001 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{array}\right) \xrightarrow[]{\substack{F_2 \leftarrow F_2 - F_1 \\ F_3 \leftarrow F_3 - F_1}} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0.0001 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{array}\right)$$

$$\xrightarrow{F_3 \leftarrow F_3 - 10^4 F_2} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0.0001 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -10000 & \boxed{-10000} \end{array}\right)$$

(requadrem el número que s'ha arrodonit degut a l'aritmètica de 4 dígits).

Exemple (cont.)

Si ara resolem fent substitució enrere, obtenim:

$$\begin{aligned} x_3 &= -10000/(-10000) = 1, \\ x_2 &= (1 - x_3)/0.0001 = 0, \\ x_1 &= 1 - x_3 = 0. \end{aligned}$$

Si haguéssim aplicat el mètode de Gauss sense cometre errors d'arrodoniment, a l'últim pas haguéssim obtingut

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0.0001 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -10000 & -10001 \end{array}\right),$$

d'on la solució exacta és:

$$\begin{aligned} x_3 &= -10001/-10000 = 1.0001, \\ x_2 &= (1 - x_3)/0.0001 = -1, \\ x_1 &= 1 - x_3 = -0.0001. \end{aligned}$$

En particular, a l'x_2 trobat amb 4 dígits no tenim cap xifra significativa!!

Exemple (cont.)

Canviem d'estratègia: a cada pas d'eliminació gaussiana, prenem com a pivot el màxim element en valor absolut de la columna. D'aquesta estratègia se'n diu *pivotatge maximal per columnes*. Si ho fem en el sistema anterior, el primer pas de Gauss queda igual i el segon és:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0.0001 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{array}\right) \xrightarrow{F_2 \longleftrightarrow F_3} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0.0001 & 1 & 1 \end{array}\right)$$

$$\xrightarrow{F_3 \leftarrow F_3 - 10^{-4} F_2} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & \boxed{1.000} \end{array}\right)$$

d'on, fent substitució enrere, obtenim

$$x_3 = 1.000/1 = 1, \quad x_2 = -1/1 = -1, \quad x_1 = 1 - x_3 = 0.$$

En aquesta solució aproximada, totes les components tenen totes les xifres significatives.

Algorisme (Mètode de Gauss amb pivotatge maximal per columnes)

for $k = 1 \div n-1$ **do** $\max \leftarrow \left|a_{k,k}^{(k)}\right|$; $i_{\max} \leftarrow k$; ▷ *Pas de la matriu $A^{(k)}$ a la matriu $A^{(k+1)}$*

  for $i = k+1 \div n$ **do** ▷ *Buscant el pivot maximal a la columna k*

    if $\left|a_{i,k}^{(k)}\right| > \max$ **then** $\max \leftarrow \left|a_{i,k}^{(k)}\right|$; $i_{\max} \leftarrow i$; **end if**

  end for

  for $j = k \div n$ **do** ▷ *Columna de la matriu*

    $s \leftarrow a_{k,j}^{(k)}$; $a_{k,j}^{(k)} \leftarrow a_{i_{\max},j}^{(k)}$; $a_{i_{\max},j}^{(k)} \leftarrow s$; ▷ *Intercanviem les files k i i_{max}*

  end for

  for $i = k+1 \div n$ **do** ▷ *Arreglem la fila i*

    $m_{i,k} \leftarrow \frac{a_{i,k}^{(k)}}{a_{k,k}^{(k)}}$; ▷ *Multiplicador corresponent a la fila i*

    for $j = k+1 \div n$ **do** ▷ *Columna de la matriu*

      $a_{i,j}^{(k+1)} \leftarrow a_{i,j}^{(k)} - m_{i,k} a_{k,j}^{(k)}$; ▷ *Arreglem els elements de la fila i columna j*

    end for

    for $j = 1 \div p$ **do** ▷ *Columna del terme independent*

      $b_{i,j}^{(k+1)} \leftarrow b_{i,j}^{(k)} - m_{i,k} b_{k,j}^{(k)}$; ▷ *Arreglem la fila i columna j del terme independent*

    end for

  end for

end for

No obstant, també es poden trobar exemples en els quals el pivotatge maximal per columnes també fracassa.

Exercici

Resoleu, amb aritmètica en punt flotant amb $b = 10$ i $t = 4$, el sistema

$$\left.\begin{array}{rcrcrcr} x_1 & & & + & x_3 & = & 1 \\ 10000x_1 & + & x_2 & + & 20000x_3 & = & 20000 \\ x_1 & + & x_2 & + & x_3 & = & 0 \end{array}\right\},$$

i comproveu que s'obté el mateix que en resoldre el sistema de l'exemple anterior sense fer pivotatge

El problema en aquest últim exemple és que la matriu del sistema està *desequilibrada*, és a dir, entre els seus coeficients n'hi ha d'ordre de magnitud molt diferent. Existeixen *mètodes per equilibrar matrius*, que fan que el pivotatge maximal per columnes vagi bé en la pràctica totalitat dels cassos.

Estratègies de pivotatge (cont.)

El pivotatge maximal per columnes es pot substituir per *pivotatge complet*:

Algorisme (Mètode de Gauss amb pivotatge complet)

for $k = 1 \div n-1$ **do** $\max \leftarrow -1$; ▻ *Pas de la matriu $A^{(k)}$ a la matriu $A^{(k+1)}$*

  for $i = k \div n$; $j = k \div n$; **do** ▻ *Buscant el pivot maximal*

    if $\left|a_{i,j}^{(k)}\right| > \max$ **then** $\max \leftarrow \left|a_{i,j}^{(k)}\right|$; $i_{\max} \leftarrow i$; $j_{\max} \leftarrow j$; **end if**

  end for ▻ *Intercanviem les les files k i i_{max} i les columnes k i j_{max}*

  for $j = k \div n$ **do** $s \leftarrow a_{k,j}^{(k)}$; $a_{k,j}^{(k)} \leftarrow a_{i_{\max},j}^{(k)}$; $a_{i_{\max},j}^{(k)} \leftarrow s$; **end for**

  for $i = 1 \div n$ **do** $s \leftarrow a_{i,k}^{(k)}$; $a_{i,k}^{(k)} \leftarrow a_{i,j_{\max}}^{(k)}$; $a_{i,j_{\max}}^{(k)} \leftarrow s$; **end for**

  for $i = k+1 \div n$ **do** ▻ *Arreglem la fila i*

    $m_{i,k} \leftarrow \frac{a_{i,k}^{(k)}}{a_{k,k}^{(k)}}$; ▻ *Multiplicador corresponent a la fila i*

    for $j = k+1 \div n$ **do** ▻ *Columna de la matriu*

      $a_{i,j}^{(k+1)} \leftarrow a_{i,j}^{(k)} - m_{i,k} a_{k,j}^{(k)}$; ▻ *Arreglem els elements de la fila i columna j*

    end for

    for $j = 1 \div p$ **do** ▻ *Columna del terme independent*

      $b_{i,j}^{(k+1)} \leftarrow b_{i,j}^{(k)} - m_{i,k} b_{k,j}^{(k)}$; ▻ *Arreglem la fila i columna j del terme independent*

    end for

  end for

end for

Notem que, si fem pivotatge complet, intercanviar columnes implica reordenar les incògnites, i això ho hem d'"enregistrar" d'alguna manera per, en acabar, saber a quina incògnita es refereix cada columna (no ho hem especificat a l'algorisme anterior).

Això es fa mantenint un *vector de permutació* que registri tots el canvis de columnes. Més endavant veurem com crear, usar i mantenir aquest vector.

Existeixen estudis de propagació dels errors d'arrodoniment que donen fites millors per al pivotatge complet que per al pivotatge maximal per columnes. No obstant, l'experiència pràctica demostra que aquesta millora teòrica no compensa la complicació addicional de reordenar incògnites i el temps de còmput addicional requerit per la cerca del pivot.

Definició (Descomposició LU)

Sigui A una matriu no-singular (és a dir, $\det(A) \neq 0$).

Anomenarem descomposició LU d'A tota descomposició $A = LU$ amb L, U matrius $n \times n$ de la forma

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_{2,1} & 1 & & & \\ l_{3,1} & l_{3,2} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n,1} & l_{n,2} & l_{n,3} & \dots & 1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & u_{1,3} & \dots & u_{1,n} \\ & u_{2,2} & u_{2,3} & \dots & u_{2,n} \\ & & u_{3,3} & \dots & u_{3,n} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & u_{n,n} \end{pmatrix},$$

és a dir, L és triangular inferior amb 1's a la diagonal i U és triangular superior.

Una de les utilitats d'aquest tipus de descomposició és que, si tenim $A = LU$, podem resoldre un sistema lineal $LUx = Ax = b$ en dues etapes:

- trobem $y \in \mathbb{R}^n$ tal que $Ly = b$,
- trobem $x \in \mathbb{R}^n$ tal que $Ux = y$.

Cadascun d'aquests sistemes és triangular i requereix n^2 operacions (de fet $Ly = b$ requereix n operacions menys, degut als 1's de la diagonal de L). Així, un cop tenim la descomposició LU, per resoldre diversos sistemes lineals amb la mateixa matriu de coeficients,

$$Ax_1 = b_1,\ Ax_2 = b_2,\ Ax_3 = b_3,\ \ldots,$$

podem resoldre cadascun en $2n^2$ operacions ($2n^2 - n$, de fet), contra les $2n^3/3 + O(n^2)$ de fer tota l'eliminació gaussiana.

Descomposició LU 2/17

Podem obtenir la descomposició LU com a producte de l'eliminació gaussiana, tal com mostra la següent

Proposició

Sigui A matriu $n \times n$ no-singular.

1. *Si existeix la descomposició LU d'A, és única.*
2. *Si es pot dur a terme l'eliminació gaussiana de A sense pivotatges, llavors existeix la descomposició LU d'A, i és*

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ m_{2,1} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ m_{n,1} & m_{n,2} & \dots & 1 \end{pmatrix}, \quad U = A^{(n)} = \begin{pmatrix} a_{1,1}^{(1)} & a_{1,2}^{(1)} & \dots & a_{1,n}^{(1)} \\ & a_{2,2}^{(2)} & \dots & a_{2,n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{n,n}^{(n)} \end{pmatrix}$$

Demostració

Vegem primer la unicitat. Suposem que $A = L_1U_1 = L_2U_2$, on L_1, L_2 són triangulars inferiors amb 1's a la diagonal, i U_1, U_2 són triangulars superiors. Aleshores tenim

$$L_1U_1 = L_2U_2.$$

Com que A és no-singular també ho són U_1 i U_2. Multiplicant per la dreta per U_1^{-1} als dos costats de la igualtat, obtenim

$$L_1 = L_2U_2U_1^{-1},$$

i multiplicant per l'esquerra per L_2^{-1} a les dues bandes de la igualtat, obtenim

$$L_2^{-1}L_1 = U_2U_1^{-1}. \tag{2}$$

Demostració (cont.)

Ara hem de tenir en compte que

- El producte dues matrius triangulars superiors és una matriu triangular superior.
- La inversa d'una matriu triangular superior no-singular és una matriu triangular superior.
- El producte de dues matrius triangulars inferiors amb 1's a la diagonal és una matriu triangular inferior amb 1's a la diagonal.
- La inversa d'una matriu triangular inferior amb 1's a la diagonal és una matriu triangular inferior amb 1's a la diagonal.

Exercici (per lliurament suplementari)

Demostreu totes aquestes afirmacions.

Descomposició LU (cont.)

Demostració (cont.)

Aleshores, podem representar esquemàticament la igualtat (2) així:

$$\begin{pmatrix} 1 & & & \\ * & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ * & * & \dots & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \times & \square & \dots & \square \\ & \times & \dots & \square \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & \times \end{pmatrix}.$$

D'aquí es dedueix que els símbols $\times$ són 1 necessàriament, i tant els símbols $*$ com $\square$ són necessàriament zero. Per tant,

$$L_2^{-1} L_1 = U_2 U_1^{-1} = \mathrm{Id},$$

d'on $L_1 = L_2$ i $U_1 = U_2$.
Ara anem a provar (2) usant el mètode de Gauss aplicat a la matriu A (sense terme independent).

Demostració (cont.)

El pas k el podem escriure matricialment com segueix:

$$F_k A^{(k)} := \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -m_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -m_{n,k} & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1,1}^{(1)} & \dots & a_{1,k}^{(1)} & a_{1,k+1}^{(1)} & \dots & a_{1,n}^{(1)} \\ & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & a_{k,k}^{(k)} & a_{k,k+1}^{(k)} & \dots & a_{k,n}^{(k)} \\ & & a_{k+1,k}^{(k)} & a_{k+1,k+1}^{(k)} & \dots & a_{k+1,n}^{(k)} \\ & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & a_{n,k}^{(k)} & a_{n,k+1}^{(k)} & \dots & a_{n,n}^{(k)} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} a_{1,1}^{(1)} & \dots & a_{1,k}^{(1)} & a_{1,k+1}^{(1)} & \dots & a_{1,n}^{(1)} \\ & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & a_{k,k}^{(k)} & a_{k,k+1}^{(k)} & \dots & a_{k,n}^{(k)} \\ & & 0 & a_{k+1,k+1}^{(k+1)} & \dots & a_{k+1,n}^{(k+1)} \\ & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & 0 & a_{n,k+1}^{(k+1)} & \dots & a_{n,n}^{(k+1)} \end{pmatrix} := A^{(k+1)}.$$

Demostració (cont.)

Iterant la relació anterior, obtenim

$$U := A^{(n)} = F_{n-1}F_{n-2}\dots F_2F_1A^{(1)},$$

que és triangular superior. Aïllant $A^{(1)}$ de la igualtat anterior, obtenim

$$F_1^{-1}F_2^{-1}\dots F_{n-2}^{-1}F_{n-1}^{-1}U = A^{(1)} = A.$$

Per a acabar, només hem de veure que, si definim

$$L := F_1^{-1}F_2^{-1}\dots F_{n-2}^{-1}F_{n-1}^{-1},$$

es verifica la primera igualtat de l'apartat (2) de la Proposició.

Demostració (cont.)

Per a això, escrivim les matrius F_k en forma més manipulable. Considerem els vectors

$$m_k := \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & m_{k+1,k} & m_{k+2,k} & \cdots & m_{n,k} \end{pmatrix}^\top$$

i e_k, el k–èssim vector de la base canònica d'$\mathbb{R}^n$.
Aleshores:

$$m_k e_k^\top = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ m_{k+1,k} \\ \vdots \\ m_{n,k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 0 & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & m_{k+1,k} & 0 & \\ & & & \vdots & & \ddots & \\ & & & m_{n,k} & & & 0 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

i, per tant, $$F_k = \mathrm{Id} - m_k e_k^\top.$$

Demostració (cont.)

Anem a comprovar que

$$F_k^{-1} = \mathrm{Id} + m_k e_k^\top.$$

En efecte,

$$\begin{aligned}(\mathrm{Id} + m_k e_k^\top)(\mathrm{Id} - m_k e_k^\top) &= \mathrm{Id} - m_k e_k^\top + m_k e_k^\top - m_k e_k^\top m_k e_k^\top \\ &= \mathrm{Id} - m_k (e_k^\top m_k) e_k^\top = \mathrm{Id},\end{aligned}$$

donat que

$$e_k^\top m_k = \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ m_{k+1,k} \\ m_{k+2,k} \\ \vdots \\ m_{n,k} \end{pmatrix} = 0.$$

Descomposició LU (cont.)

Demostració (cont.)

Aleshores

$$L = F_1^{-1} F_2^{-1} \dots F_{n-1}^{-1} = (\mathrm{Id} + m_1 e_1^\top)(\mathrm{Id} + m_2 e_2^\top) \dots (\mathrm{Id} + m_{n-1} e_{n-1}^\top)$$
$$= \mathrm{Id} + m_1 e_1^\top + m_2 e_2^\top + \dots + m_{n-1} e_{n-1}^\top.$$

Anem a justificar la última igualtat. El resultat del producte $(\mathrm{Id} + m_1 e_1^\top) \dots (\mathrm{Id} + m_{n-1} e_{n-1}^\top)$ s'obté sumant tots els monomis que s'obtenen d'agafar un terme de cada parèntesi i multiplicar. Hi ha tres possibilitats:

- Agafar Id a tots els parèntesis, que només dóna el monomi Id.
- Agafar Id a tots els parèntesis llevat d'un. D'aquesta manera s'obtenen els monomis
$$m_1 e_1^\top, \ m_2 e_2^\top, \ \dots, \ m_{n-1} e_{n-1}^\top.$$
- Agafar almenys dos $m_i e_i^\top$. D'aquesta manera s'obtenen monomis de la forma $\dots m_i e_i^\top m_j e_j^\top \dots = \dots m_i (e_i^\top m_j) e_j^\top \dots$ per a $i < j$.

Demostració (cont.)

Tots aquests monomis són zero, donat que

$$e_i^\top m_j = \left(\underbrace{0 \ \dots \ 0 \ 1}_{i} \ 0 \ \dots \ 0 \right) \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ m_{j+1,j} \\ \vdots \\ m_{n,j} \end{pmatrix} \overset{j \geq i}{=} 0$$

Finalment, usant (3) amb $k = i$, obtenim

$$L = \mathrm{Id} + m_1 e_1^\top + m_2 e_2^\top + \cdots + m_{n-1} e_{n-1}^\top = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ m_{2,1} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ m_{n,1} & m_{n,2} & \dots & 1 \end{pmatrix},$$

tal com volíem veure. □

A la pràctica, la descomposició LU s'implementa usant el mètode de Gauss aplicat a la matriu A sense terme independent reescrivint cada matriu $A^{(k+1)}$ a sobre de la matriu anterior $A^{(k)}$.

A més, s'aprofiten les posicions zero de la matriu de coeficients $A^{(k+1)}$ (que òbviament no cal guardar) per emmagatzemar els multiplicadors (estalviant memòria).

Això s'anomena *descomposició LU amb reemplaçament*.

Així, començant amb $A^{(1)} = A$, a l'inici del pas k tindrem

$$\left(\begin{array}{ccc|cccc}
a^{(1)}_{1,1} & a^{(1)}_{1,2} & \dots & a^{(1)}_{1,k} & a^{(1)}_{1,k+1} & \dots & a^{(1)}_{1,n} \\
{\color{blue}m_{2,1}} & a^{(2)}_{2,2} & \dots & a^{(2)}_{2,k} & a^{(2)}_{2,k+1} & \dots & a^{(2)}_{2,n} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
\cline{4-7}
{\color{blue}m_{k,1}} & {\color{blue}m_{k,2}} & \dots & a^{(k)}_{k,k} & a^{(k)}_{k,k+1} & \dots & a^{(k)}_{k,n} \\
{\color{blue}m_{k+1,1}} & {\color{blue}m_{k+1,2}} & \dots & a^{(k)}_{k+1,k} & a^{(k)}_{k+1,k+1} & \dots & a^{(k)}_{k+1,n} \\
\vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\
{\color{blue}m_{n,1}} & {\color{blue}m_{n,2}} & \dots & a^{(k)}_{n,k} & a^{(k)}_{n,k+1} & \dots & a^{(k)}_{n,n}
\end{array}\right),$$

mentre que, un cop finalitzat el pas k, tindrem

$$
\left(\begin{array}{cccc|ccc}
a_{1,1}^{(1)} & a_{1,2}^{(1)} & \dots & a_{1,k}^{(1)} & a_{1,k+1}^{(1)} & \dots & a_{1,n}^{(1)} \\
m_{2,1} & a_{2,2}^{(2)} & \dots & a_{2,k}^{(2)} & a_{2,k+1}^{(2)} & \dots & a_{2,n}^{(2)} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
m_{k,1} & m_{k,2} & \dots & a_{k,k}^{(k)} & a_{k,k+1}^{(k)} & \dots & a_{k,n}^{(k)} \\
\cline{5-7}
m_{k+1,1} & m_{k+1,2} & \dots & m_{k+1,k} & a_{k+1,k+1}^{(k+1)} & \dots & a_{k+1,n}^{(k+1)} \\
\vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\
m_{n,1} & m_{n,2} & \dots & m_{n,k} & a_{n,k+1}^{(k+1)} & \dots & a_{n,n}^{(k+1)}
\end{array}\right)
$$

En acabar (al final del pas $n-1$), tindrem

$$\begin{pmatrix} a_{1,1}^{(1)} & a_{1,2}^{(1)} & \dots & \dots & a_{1,n}^{(1)} \\ m_{2,1} & a_{2,2}^{(2)} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & a_{n-1,n-1}^{(n-1)} & a_{n-1,n}^{(n-1)} \\ m_{n,1} & \dots & \dots & m_{n,n-1} & a_{n,n}^{(n)} \end{pmatrix},$$

de manera que a la part de sota de la diagonal tenim L, i la diagonal juntament amb la part de sobre formen U.

Descomposició LU (cont.)

Exercici

Descriviu en forma algorísmica la resolució d'un sistema lineal $Ax = b$ un cop es té la descomposició LU. Recordeu que cal resoldre dos sistemes,

$$Ly = b, \qquad Ux = y,$$

el primer dels quals és triangular inferior amb 1's a la diagonal i el segon és triangular superior.

Algorisme LU amb pivotatge maximal per columnes

Tal com hem plantejat, la descomposició LU, presenta dos inconvenients

- Existeixen matrius no-singulars sense descomposició LU.
- Tot i que la descomposició LU existeixi, la seva obtenció pot ser numèricament inestable.

Ens preguntem llavors si el mètode de Gauss amb pivotatge maximal per columnes dóna algun tipus de descomposició LU. La resposta és afirmativa, i aquesta descomposició no és la de la matriu inicial sinó la d'una permutació de les seves files. Abans d'enunciar-ho en forma de proposició, introduïm les matrius de permutació.

Definició

Direm que una matriu $n \times n$, P, és una *matriu de permutació* si les seves files (o, equivalentment, les seves columnes) són una reordenació de les de la identitat.

En particular una matriu de permutació és una matriu de zeros i uns que té un 1 exactament a cada fila i a cada columna.

La utilitat de les matrius de permutació consisteix en que multiplicades per l'esquerra reordenen files, mentre que multiplicades per la dreta reordenen columnes.

Exemple

Siguin

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{i} \quad A = \begin{pmatrix} 11 & 12 & 13 \\ 21 & 22 & 23 \\ 31 & 32 & 33 \end{pmatrix}$$

Llavors

$$PA = \begin{pmatrix} 31 & 32 & 33 \\ 11 & 12 & 13 \\ 21 & 22 & 23 \end{pmatrix}$$

ja que la permutació P mirada per columnes és: $1 \mapsto 2$, $2 \mapsto 3$ i $3 \mapsto 1$.

$$AP = \begin{pmatrix} 12 & 13 & 11 \\ 22 & 23 & 21 \\ 32 & 33 & 31 \end{pmatrix}$$

ja que la permutació P mirada per files és: $1 \mapsto 3$, $2 \mapsto 1$ i $3 \mapsto 2$.

Esquemàticament, suposem que

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [& e_3 &] \\ [& e_1 &] \\ [& e_2 &] \end{pmatrix} = \left(\begin{bmatrix} \\ e_2 \\ \\ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \\ e_3 \\ \\ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \\ e_1 \\ \\ \end{bmatrix} \right),$$

on e_1, e_2, e_3 són els vectors de la base canònica de $\mathbb{R}^3$, i els usem indistintament com a files o columnes.

Aleshores, si f_1, f_2, f_3 són vectors fila qualssevol,

$$P \begin{pmatrix} [& f_1 &] \\ [& f_2 &] \\ [& f_3 &] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [& f_3 &] \\ [& f_1 &] \\ [& f_2 &] \end{pmatrix}.$$

i, si c_1, c_2, c_3 són vectors columna qualssevol,

$$\left(\begin{bmatrix} \\ c_1 \\ \\ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \\ c_2 \\ \\ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \\ c_3 \\ \\ \end{bmatrix} \right) P = \left(\begin{bmatrix} \\ c_2 \\ \\ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \\ c_3 \\ \\ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \\ c_1 \\ \\ \end{bmatrix} \right).$$

Proposició

Sigui A matriu $n \times n$ amb $\det(A) \neq 0$. Aleshores existeix P matriu de permutació i existeixen L, U de la forma

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_{2,1} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n,1} & \dots & l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & \dots & u_{1,n} \\ & u_{2,2} & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & u_{n-1,n} \\ & & & u_{n,n} \end{pmatrix},$$

tals que

$$PA = LU.$$

Demostració

No la fem. La podeu trobar a Golub & Van Loan: *Matrix Computations*, 3a edició. És el Teorema 3.4.1. □

Com hem dit abans, quan tenim la descomposició $A = LU$, la resolució del sistema $Ax = b$ consisteix en resoldre per ordre el dos sistemes triangulars:

$$Ly = b, \qquad Ux = y,$$

Si la descomposició que tenim és de la forma $PA = LU$ amb P matriu de permutació, llavors tenim:

$$Ax = b \Longleftrightarrow LUx = PAx = Pb$$

i, per tant, ara hem de resoldre els sistemes

$$Ly = Pb, \qquad Ux = y.$$

Algorisme LU amb pivotatge maximal per columnes (cont.)

Exercici (per lliurament suplementari)

Sigui π un vector de permutació i sigui P la corresponent matriu de permutació per files. És a dir:

$$P = \begin{pmatrix} [& e_{\pi_1} &] \\ [& \vdots &] \\ [& e_{\pi_n} &] \end{pmatrix}.$$

Donat un vector $b \in R^n$, descriviu en forma algorísmica el càlcul de Pb permutant les components de b a partir del vector de permutació π.

No es pot usar la matriu P donat que, en la pràctica, no s'arriba a construir mai.

Algorisme LU amb pivotatge maximal per columnes (cont.)

El següent algorisme és una revisió dels que s'han presentat abans, amb dues variacions:

- Manté un vector de permutacions que "recorda" els canvis de files que s'han realitzat.
- El bucle d'intercanvi de files ara afecta a *tota* la fila ja que també hem de canviar la part a l'esquerra de la columna k que, ara, conté multiplicadors $m_{i,j}$ (veure els exemples de les transparències 50/203 i 51/203).

Observació

A la pràctica, a nivell de codi, no es treballa amb matrius de permutació si no que s'utilitzen els corresponents *vectors de permutació*. Això estalvia espai d'emmagatzematge i aritmètica ja que, de fet, no cal multiplicar per la matriu de permutació si no solament reordenar les files de les matrius o components de vectors d'acord amb la permutació.

Algorisme (Descomposició LU amb reemplaçament i pivotatge maximal per columnes)

for $i = 1 \div n$ **do** $\pi_i \leftarrow i$; **end for** ▷ *Vector π de permutacions de columnes = identitat*

for $k = 1 \div n-1$ **do** $\max \leftarrow \left|a_{k,k}^{(k)}\right|$; $i_{\max} \leftarrow k$; ▷ *Pas de la matriu $A^{(k)}$ a la matriu $A^{(k+1)}$*

  for $i = k+1 \div n$ **do** ▷ *Buscant el pivot maximal a la columna k*

    if $\left|a_{i,k}^{(k)}\right| > \max$ **then** $\max \leftarrow \left|a_{i,k}^{(k)}\right|$; $i_{\max} \leftarrow i$; **end if**

  end for

  $s \leftarrow \pi_k$; $\pi_k \leftarrow \pi_{i_{\max}}$; $\pi_{i_{\max}} \leftarrow s$; ▷ *Registrem l'intercanvi de la fila π_k per la fila $\pi_{i_{max}}$*

  for $j = 1 \div n$ **do** ▷ *Columna de la matriu*

    $s \leftarrow a_{k,j}$; $a_{k,j} \leftarrow a_{i_{\max},j}$; $a_{i_{\max},j} \leftarrow s$; ▷ *Intercanviem les files k i i_{max} SENCERES*

  end for

  for $i = k+1 \div n$ **do** ▷ *Arreglem la fila i*

    $a_{i,k} \leftarrow \frac{a_{i,k}}{a_{k,k}}$; ▷ *Multiplicador corresponent a la fila i*

    for $j = k+1 \div n$ **do** ▷ *Columna de la matriu*

      $a_{i,j} \leftarrow a_{i,j} - a_{i,k}a_{k,j}$; ▷ *Arreglem els elements de la fila i columna j*

    end for

  end for

end for

A continuació, il·lustrem l'aplicació d'aquesta proposició amb un

Exemple

Anem a fer la descomposició LU amb pivotatge de la següent matriu.

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

Com a l'algorisme anterior inicialitzem $\pi = (1, 2, 3)$.

Exemple (cont.)

$$A^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 6 \end{pmatrix} \xrightarrow[\pi=(3,2,1)]{F_1 \leftrightarrow F_3} \begin{pmatrix} 3 & 4 & 6 \\ 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow[F_3 \leftarrow F_3 - (1/3)F_1]{F_2 \leftarrow F_2 - (2/3)F_1} \begin{pmatrix} 3 & 4 & 6 \\ \boxed{2/3} & 1/3 & 0 \\ \boxed{1/3} & 2/3 & 1 \end{pmatrix} =: A^{(2)}$$

$$\xrightarrow[\pi=(3,1,2)]{F_2 \leftrightarrow F_3} \begin{pmatrix} 3 & 4 & 6 \\ 1/3 & 2/3 & 1 \\ 2/3 & 1/3 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{F_3 \leftarrow F_3 - (1/2)F_2} \begin{pmatrix} 3 & 4 & 6 \\ 1/3 & 2/3 & 1 \\ 2/3 & \boxed{1/2} & -1/2 \end{pmatrix} =: A^{(3)}$$

Exemple (cont.)

Per tant, en acabar, tenim $\pi = (3, 1, 2)$,

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/3 & 1 & 0 \\ 2/3 & 1/2 & 1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 3 & 4 & 6 \\ 0 & 2/3 & 1 \\ 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \quad \text{i} \quad P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Comproveu que, efectivament, $PA = LU$.

Normes de matrius

$\mathcal{M}_n$ denota el conjunt de les matrius $n \times n$.

Norma de vectors

És tota funció $\|\cdot\| : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^+$ amb les propietats següents:

1. $\|x\| = 0$ si i només si $x = 0$.
2. $\|\alpha x\| = |\alpha| \, \|x\|$ amb $\alpha \in \mathbb{R}$.
3. **Desigualtat triangular:** $\|x + y\| \leqslant \|x\| + \|y\|$.

Norma de matrius

És tota funció $\|\cdot\| : \mathcal{M}_n \longrightarrow \mathbb{R}^+$ amb les propietats següents:

1. $\|A\| = 0$ si i només si $A = 0$.
2. $\|\alpha A\| = |\alpha| \, \|A\|$ amb $\alpha \in \mathbb{R}$.
3. **Desigualtat triangular:** $\|A + B\| \leqslant \|A\| + \|B\|$.
4. **Submultiplicativitat:** $\|AB\| \leqslant \|A\| \cdot \|B\|$.

Normes de matrius 1/10

Definició

Sigui $\|\cdot\|$ una norma de vectors. Direm que la norma de matrius $|||\cdot|||$ és *compatible* si

$$\|Ax\| \leqslant |||A||| \cdot \|x\| .$$

Observació

Usualment no distingirem a nivell notacional entre una norma de matrius i una norma de vectors. Se sap quin tipus de norma és a partir de l'objecte sobre el que s'avalua.

Normes de matrius (cont.)

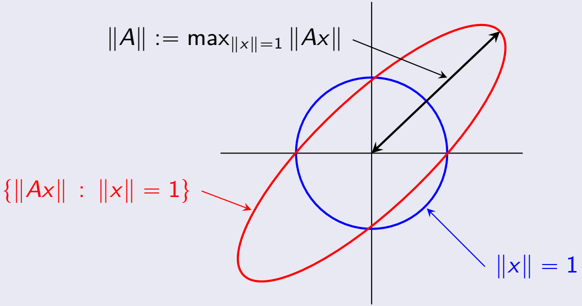
Definició

La norma de matrius

$$\|A\| := \max_{\|x\|=1} \|Ax\| = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}$$

s'anomena *natural* o *subordinada* a la norma de vectors $\|\cdot\|$.

Idea geomètrica de la definició de norma subordinada



Observació

Donat que tota norma és una funció contínua, $\{x \in \mathbb{R} : \ \|x\| = 1\} = \|\cdot\|^{-1}(1)$ és un tancat. Per tant, pel Teorema de Bolzano-Weierstrass, el màxim de la definició anterior existeix.

Normes de matrius (cont.)

Lema

Tota norma de matrius subordinada és compatible.

Demostració

Si $x = 0$ és obvi que $0 = \|Ax\| \leqslant \|A\| \cdot \|x\| = 0$. Si $x \neq 0$ tenim:

$$\|A\| = \sup_{y \neq 0} \frac{\|Ay\|}{\|y\|} \geqslant \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \Longleftrightarrow \|x\| \, \|A\| \geqslant \|Ax\| \, .$$

$\square$

Lema

Per tota norma subordinada a una norma de vectors $\|\mathrm{Id}\| = 1$.

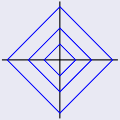
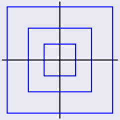
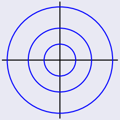
Demostració

$$\|\mathrm{Id}\| = \max_{\|x\|=1} \|\mathrm{Id}\, x\| = \max_{\|x\|=1} \|x\| = 1.$$

$\square$

Normes de matrius (cont.)

Exemples de normes de vectors i matrius subordinades

Norma de vectors	**Norma subordinada**	**Boles a $\mathbb{R}^n$**
$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} \|x_i\|$	$\|A\|_1 = \max_{1 \leqslant j \leqslant n} \sum_{i=1}^{n} \|a_{ij}\|$	
$\|x\|_\infty = \max_{1 \leqslant i \leqslant n} \|x_i\|$	$\|A\|_\infty = \max_{1 \leqslant i \leqslant n} \sum_{j=1}^{n} \|a_{ij}\|$	
$\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i^2}$	$\|A\|_2 = \sqrt{\rho\left(A^\top A\right)}$	

on $\rho(M) := \max\{|\lambda| \; : \; \lambda$ és un valor propi d'$M\}$ denota el *radi espectral d'una matriu*.

Normes de matrius (cont.)

Exemple de càlcul de normes subordinades: $\|A\|_2 = \sqrt{\rho\left(A^\top A\right)}$

Observem que $\left(A^\top A\right)^\top = A^\top A^{\top\top} = A^\top A$. Llavors, $A^\top A$ és simètrica i, per tant, té una base ortonormal de vectors propis. És a dir, existeixen $v_1, v_2, \dots, v_n \in \mathbb{R}^n$ i $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n \in \mathbb{R}$ diferents dos a dos tals que $\left(A^\top A\right) v_i = \lambda_i v_i$ i $v_i^\top v_j = \delta_{i,j}$ per a tot $i, j = 1, 2, \dots, n$. A més

$$0 \leqslant \|Av_i\|_2^2 = (Av_i)^\top A v_i = v_i^\top \left(A^\top A\right) v_i = \lambda_i v_i^\top v_i = \lambda_i.$$

Per tant, $\lambda_i \leqslant \rho\left(A^\top A\right)$ per a cada i.

Prenem $z \in \mathbb{R}^n$ tal que $\|z\|_2 = 1$ i $\|A\|_2 = \|Az\|_2$. Podem escriure z en components en la base de vectors propis: $z = \sum_{i=1}^n \alpha_i v_i$. Observem que l'ortonormalitat dels vectors propis implica:

$$1 = \|z\|_2^2 = z^\top z = \sum_{i,j=1}^n \alpha_i \alpha_j v_i^\top v_j = \sum_{i=1}^n |\alpha_i|^2.$$

Exemple de càlcul de normes subordinades: $\|A\|_2 = \sqrt{\rho\left(A^\top A\right)}$

Tenim,

$$\begin{aligned}
\|A\|_2^2 = \|Az\|_2^2 = (Az)^\top Az = z^\top A^\top Az = z^\top \sum_{i=1}^n \alpha_i \left(A^\top A\right) v_i \\
= \left(\sum_{j=1}^n \alpha_j v_j\right)^\top \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i v_i\right) = \sum_{i=1}^n \lambda_i \left|\alpha_i\right|^2 \\
\leqslant \rho\left(A^\top A\right) \sum_{i=1}^n \left|\alpha_i\right|^2 = \rho\left(A^\top A\right).
\end{aligned}$$

Ara hem de provar la desigualtat inversa. Sigui k tal que $\lambda_k = \rho\left(A^\top A\right)$. Tenim que $\|v_k\|_2 = 1$ i

$$\|A\|_2^2 \geqslant \|Av_k\|_2^2 = v_k^\top \left(A^\top A\right) v_k = \lambda_k v_k^\top v_k = \lambda_k = \rho\left(A^\top A\right).$$

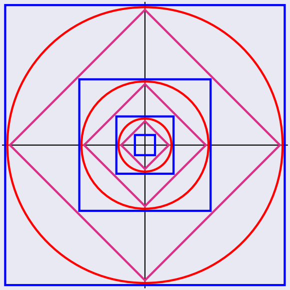
Observació

El càlcul i caracterització de les normes subordinades sempre es fa seguint el mateix patró (veure l'exemple que hi a més avall). Primer es troba un candidat per $\|A\| := \max_{\|x\|=1} \|Ax\|$ i es demostra que el candidat és una fita superior del conjunt $\{\|Ax\| \,:\, \|x\| = 1\}$. Finalment es demostra que existeix un vector z de norma 1 pel qual $\|Az\|$ ateny la fita.

Proposició (Propietats de les normes de matrius)

1. *Tota norma de matrius és una funció contínua dels seus coeficients.*
2. *Donades dues normes de matrius* $\|\cdot\|$ *i* $|||\cdot|||$ *existeixen constants positives* ℓ *i* L *tals que per a tota matriu* M*:*
$$\ell |||M||| \leqslant \|M\| \leqslant L |||M|||.$$
En particular, dues normes de matrius són equivalents
3. *Per a qualsevol norma de matrius subordinada* $\|\cdot\|$ *i per tota matriu* M *es té:* $\rho(M) \leqslant \|M\|$.
4. *Donada una matriu* M *i donat* $\varepsilon > 0$ *existeix una norma de matrius* $\|\cdot\|_{M,\varepsilon}$ *tal que* $\rho(M) \leqslant \|M\|_{M,\varepsilon} \leqslant \rho(M) + \varepsilon$.

Normes equivalents



Demostració (de l'apartat (3) de la proposició anterior)

Siguin λ i v una parella valor/vector propi d'M tals que $\|v\| = 1$. Tenim

$$\|M\| \geqslant \|Mv\| = \|\lambda v\| = |\lambda| \, \|v\| = |\lambda| \, .$$

Per tant,

$$\|M\| \geqslant \max\{|\lambda| \; : \lambda \text{ és un valor propi d'} M\} = \rho(M).$$

$\square$

Exercici (per lliurament suplementari)

Demostreu l'apartat (1) de la proposició anterior.

Les propietats (2) i (4) no les demostrarem ja que són una mica més complicades.

Definició

Una matriu M es diu *convergent* si $\lim_{k\to\infty} M^k = 0$.

Teorema (de caracterització de les matrius convergents)

Les afirmacions següents son equivalents:

1. *M és convergent.*
2. $\lim_{k\to\infty} \left\| M^k \right\| = 0$ *per alguna norma de matrius.*
3. $\rho(M) < 1$.

Demostració

(1) $\Longrightarrow$ (2): Per l'apartat (1) de la proposició anterior $\|M\|$ depèn contínuament dels coeficients M. Per tant,

$$\lim_{k\to\infty} \left\| M^k \right\| = \left\| \lim_{k\to\infty} M^k \right\| = \|0\| = 0.$$

Demostració (cont.)

(2) $\Longrightarrow$ (1): Per l'apartat (2) de la proposició anterior existeixen constants ℓ i L tals que

$$\ell \left\| M^k \right\| \leqslant \left\| M^k \right\|_\infty \leqslant L \left\| M^k \right\|.$$

Per tant, per tot i, j,

$$0 = \lim_{k\to\infty} \left\| M^k \right\| = \lim_{k\to\infty} \left\| M^k \right\|_\infty = \lim_{k\to\infty} \max_{1\leqslant i\leqslant n} \sum_{j=1}^{n} \left| m_{ij}^{(k)} \right|$$

$$\geqslant \lim_{k\to\infty} \sum_{j=1}^{n} \left| m_{ij}^{(k)} \right| \geqslant \lim_{k\to\infty} \left| m_{ij}^{(k)} \right| \geqslant 0$$

on hem denotat $M^k = \left(m_{ij}^{(k)} \right)$.

Llavors, $\lim_{k\to\infty} m_{ij}^{(k)} = 0$ i, per tant, $\lim_{k\to\infty} M^k = 0$.

Demostració (cont.)

(2) $\Longrightarrow$ (3): Usant l'apartat (2) de la proposició anterior:

$$\ell \left\| M \right\| \leqslant \left|\left|\left| M \right|\right|\right| \leqslant L \left\| M \right\|$$

podem suposar que existeix una norma subordinada $|||\cdot|||$ tal que $\lim_{k\to\infty} \left|\left|\left| M^k \right|\right|\right| = 0$. Llavors, usant l'apartat (3) de la proposició anterior i el fet que els valors propis d'M^k són els valors propis d'M elevats a la k,

$$0 \leqslant \rho(M)^k = \rho(M^k) \leqslant \left|\left|\left| M^k \right|\right|\right|.$$

Per tant, $\lim_{k\to\infty} \rho(M)^k = 0$, que implica $\rho(M) < 1$.

(3) $\Longrightarrow$ (2): Ara usarem l'apartat (4) de la proposició anterior. Prenem $\varepsilon > 0$ tal que $\rho(M) + \varepsilon < 1$. Llavors, existeix una norma de matrius $\|\cdot\|$ tal que $\|M\| < \rho(M) + \varepsilon < 1$. Per la submultiplicativitat,

$$\lim_{k\to\infty} \left\| M^k \right\| \leqslant \lim_{k\to\infty} \left\| M \right\|^k = 0. \qquad \square$$

Del teorema anterior i la seva demostració obtenim:

Corol·lari (Condició suficient de convergència)

Si $\|M\| < 1$ *per alguna norma de matrius, llavors* M *és convergent.*

El resultat principal sobre matrius convergents es:

Teorema (Sobre inverses de matrius convergents)

1. *La sèrie* $\mathrm{Id} + M + M^2 + \cdots + M^k + \cdots$ *és convergent (com a sèrie) si i només si la matriu* M *és convergent (com a matriu).*
2. *Si* M *és convergent, llavors* $\mathrm{Id} - M$ *és no-singular i* $(\mathrm{Id} - M)^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} M^k$.

Demostració

(1): Si $\mathrm{Id} + M + M^2 + \cdots + M^k + \cdots$ és convergent, llavors $\lim_{k\to\infty} \left\|M^k\right\| = 0$ i, per tant, M és convergent. Si M és convergent, $\rho(M) < 1$. Llavors, prenent $\varepsilon > 0$ tal que $\rho(M) + \varepsilon < 1$, existeix una norma de matrius $\|\cdot\|$ tal que $\|M\| < 1$. Llavors, tenim convergència en norma de la sèrie:

$$\left\|\sum_{k=0}^{\infty} M^k\right\| \leqslant \sum_{k=0}^{\infty} \left\|M^k\right\| < +\infty.$$

(2): Solament cal usar l'apartat (1) i comprovar l'afirmació sobre la inversa:

$$(\mathrm{Id} - M) \sum_{k=0}^{\infty} M^k = \sum_{k=0}^{\infty} M^k - \sum_{k=1}^{\infty} M^k = M^0 = \mathrm{Id}\,.$$

□

Corol·lari

Si per alguna norma subordinada $\|M\| < 1$, *llavors* $\mathrm{Id} - M$ *és no-singular i*

$$\frac{1}{1+\|M\|} \leqslant \left\|(\mathrm{Id} - M)^{-1}\right\| \leqslant \frac{1}{1-\|M\|}.$$

Demostració

Si $\|M\| < 1$, M és convergent pel corol·lari anterior. Llavors, pel Teorema sobre inverses de matrius convergents, $\mathrm{Id} - M$ és no-singular.

Ara usarem que $\|\mathrm{Id}\| = 1$ (veure el Lema de la transparència 69/203):

$$\begin{aligned} 1 = \|\mathrm{Id}\| &= \left\|(\mathrm{Id} - M)(\mathrm{Id} - M)^{-1}\right\| \leqslant \|\mathrm{Id} - M\| \cdot \left\|(\mathrm{Id} - M)^{-1}\right\| \\ &\leqslant (\|\mathrm{Id}\| + \|M\|) \left\|(\mathrm{Id} - M)^{-1}\right\| = (1 + \|M\|) \left\|(\mathrm{Id} - M)^{-1}\right\|. \end{aligned}$$

Això demostra la primera desigualtat del corol·lari.

Matrius Convergents (cont.)

Demostració (cont.)

Ara anem a demostrar la segona desigualtat. Tenim:
$\mathrm{Id} = (\mathrm{Id} - M)^{-1}(\mathrm{Id} - M) = (\mathrm{Id} - M)^{-1} - (\mathrm{Id} - M)^{-1} M.$
Per tant, $(\mathrm{Id} - M)^{-1} = \mathrm{Id} + (\mathrm{Id} - M)^{-1} M$. Llavors,

$$\left\| (\mathrm{Id} - M)^{-1} \right\| \leqslant 1 + \left\| (\mathrm{Id} - M)^{-1} \right\| \cdot \|M\| .$$

En conseqüència,

$$1 \geqslant \left\| (\mathrm{Id} - M)^{-1} \right\| - \left\| (\mathrm{Id} - M)^{-1} \right\| \cdot \|M\| = \left\| (\mathrm{Id} - M)^{-1} \right\| (1 - \|M\|),$$

que demostra la segona desigualtat. $\square$

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals

Suposem que volem resoldre el sistema $Ax = b$.

En realitat, degut als errors ens les dades i als errors de representació en punt flotant, no tenim A i b si no que tenim $A + \Delta A$ i $b + \delta b$. Per tant el sistema que resoldrem (sense considerar els errors del mètode de resolució) és

$$(A + \Delta A)(x + \delta x) = b + \delta b,$$

on δx és l'error absolut de la solució del sistema (induït pels errors en les dades inicials). L'error relatiu de la solució és:

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}.$$

El seguent teorema afita aquest error.

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals (cont.)

Teorema

Sigui M és no-singular i sigui $\|\cdot\|$ una norma subordinada. Suposem que $\|\Delta A\| \leqslant \frac{1}{\|A^{-1}\|}$. Llavors,

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leqslant \frac{\operatorname{cond}(A)}{1 - \|A^{-1}\| \cdot \|\Delta A\|} \left(\frac{\|\delta b\|}{\|b\|} + \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \right).$$

Definició

El nombre $\operatorname{cond}(A) := \|A\| \cdot \left\|A^{-1}\right\|$ s'anomena *nombre de condició de la matriu A*.

Observem que, per la submultiplicativitat,

$$\operatorname{cond}(A) = \|A\| \cdot \left\|A^{-1}\right\| \geqslant \left\|AA^{-1}\right\| = \|\mathrm{Id}\| = 1$$

sempre que usem una norma subordinada.

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals (cont.)

Observació

1. De la mateixa manera que $\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}$ és l'error relatiu de la solució, $\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$ i $\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}$ són els errors relatius del terme independent i de la matriu del sistema, respectivament.

2. Es raonable pensar que $\|\Delta A\|$ es petit donat que són errors a les dades inicials. Llavors, la hipòtesi $\|\Delta A\| \leqslant \frac{1}{\|A^{-1}\|}$ és raonable i fixa la mida màxima dels errors permesos a la matriu A. Per altra banda, aquesta hipòtesi implica
$$\left\|A^{-1}(\Delta A)\right\| \leqslant \left\|A^{-1}\right\| \cdot \|\Delta A\| < 1$$
o, equivalentment, $1 - \left\|A^{-1}\right\| \cdot \|\Delta A\| > 0$.

3. Si $\|\Delta A\|$ és prou petit tenim $\frac{\operatorname{cond}(A)}{1-\|A^{-1}\|\cdot\|\Delta A\|} \approx \operatorname{cond}(A)$. És a dir, *$\operatorname{cond}(A)$ és, essencialment, el factor d'amplificació dels errors finals respecte dels errors inicials*. Òbviament, ens interessa que $\operatorname{cond}(A)$ sigui el més petit possible (encara que no el podem triar).

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals (cont.)

Demostració

Tenim

$$(A + \Delta A)(x + \delta x) = b + \delta b \iff$$
$$Ax + A(\delta x) + (\Delta A)x + (\Delta A)(\delta x) = b + \delta b.$$

Com que $Ax = b$ i A és no-singular,la darrera identitat és equivalent a:

$$A(\delta x) + (\Delta A)(\delta x) = \delta b - (\Delta A)x \iff$$
$$\delta x + A^{-1}(\Delta A)(\delta x) = A^{-1}(\delta b) - A^{-1}(\Delta A)x \iff$$
$$\left(\mathrm{Id} + A^{-1}(\Delta A)\right)(\delta x) = A^{-1}\big(\delta b - (\Delta A)x\big).$$

Com hem dit abans, per hipòtesi, $\left\|A^{-1}(\Delta A)\right\| < 1$ i, pel corol·lari anterior, $\mathrm{Id} + A^{-1}(\Delta A)$ és invertible. Per tant,

$$\delta x = \left(\mathrm{Id} + A^{-1}(\Delta A)\right)^{-1} A^{-1}\big(\delta b - (\Delta A)x\big).$$

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals (cont.)

Demostració (cont.)

Ara calculem normes. Pel corol·lari anterior, la submultiplicativitat i la desigualtat triangular,

$$\begin{aligned}
\|\delta x\| &\leqslant \left\| \left(\mathrm{Id} + A^{-1}(\Delta A)\right)^{-1} \right\| \cdot \left\|A^{-1}\right\| \cdot \left(\|\delta b\| + \|\Delta A\| \cdot \|x\|\right) \\
&\leqslant \frac{\left\|A^{-1}\right\| \cdot \left(\|\delta b\| + \|\Delta A\| \cdot \|x\|\right)}{1 - \|A^{-1}(\Delta A)\|} \\
&\leqslant \frac{\left\|A^{-1}\right\| \cdot \|A\|}{1 - \|A^{-1}\| \cdot \|\Delta A\|} \left(\frac{\|\delta b\|}{\|A\|} + \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \|x\| \right),
\end{aligned}$$

que és equivalent a

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leqslant \frac{\mathrm{cond}(A)}{1 - \|A^{-1}\| \cdot \|\Delta A\|} \left(\frac{\|\delta b\|}{\|A\| \cdot \|x\|} + \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \right).$$

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals (cont.)

Demostració (cont.)

Com que la norma és subordinada i per tant consistent,

$$\|A\| \cdot \|x\| \geqslant \|Ax\| = \|b\| .$$

Per tant, la darrera desigualtat dona

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leqslant \frac{\operatorname{cond}(A)}{1 - \|A^{-1}\| \cdot \|\Delta A\|} \left(\frac{\|\delta b\|}{\|b\|} + \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \right),$$

que és el que volíem demostrar. □

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals (cont.)

Teorema (Fitacions del nombre de condició)

Per a tota norma $\|\cdot\|$ subordinada a una norma de vectors es té:

1. $\operatorname{cond}(A) \geqslant \rho(A)\rho\big(A^{-1}\big)$.
2. *Sigui $c \in \mathbb{R}^n$ i sigui z la solució del sistema $Az = c$. Llavors,*
$$\big\|A^{-1}\big\| \geqslant \frac{\|z\|}{\|c\|}.$$
3. *(Gastinel)*
$$\frac{1}{\|A^{-1}\|} = \min\{\|B - A\| \ : B \textit{ és una matriu singular}\},$$
que és equivalent a
$$\frac{1}{\operatorname{cond}(A)} = \min\left\{\frac{\|A - B\|}{\|A\|} : B \textit{ és una matriu singular}\right\}.$$

Demostració

(1): És conseqüència directa de l'apartat (3) de la Proposició sobre les propietats de les normes de matrius.

(2): $Az = c$ és equivalent a $z = A^{-1}c$. Llavors, com que tota norma subordinada és consistent tenim:
$\|z\| = \left\|A^{-1}c\right\| \leqslant \left\|A^{-1}\right\| \|c\|$.

(3): Primer demostrarem que si B és singular, llavors
$\|B - A\| \geqslant \frac{1}{\|A^{-1}\|}$.

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals (cont.)

Demostració (cont.)

Per la submultiplicativitat de les normes de matrius, $\left\|A^{-1}P\right\| \leqslant \left\|A^{-1}\right\| \cdot \|P\| < 1$ per tota matriu P tal que $\|P\| < \frac{1}{\|A^{-1}\|}$. En particular, $A^{-1}P$ és convergent.

Pel Teorema sobre inverses de matrius convergents, $\|P\| < \frac{1}{\|A^{-1}\|}$ implica que $\mathrm{Id} + A^{-1}P$ és no-singular. Llavors, com que A és no-singular, $A + P = A(\mathrm{Id} + A^{-1}P)$ és no-singular. Equivalentment, $A + P$ singular implica $\|P\| \geqslant \frac{1}{\|A^{-1}\|}$ i, per tant,

$$\frac{1}{\|A^{-1}\|} \leqslant \min\{\|B - A\| \ : \ B \text{ és singular}\}.$$

Ara demostrarem la igualtat a la fórmula anterior.

Demostració (cont.)

Per la definició de norma subordinada, existeixen $x, y \in \mathbb{R}^n$ tals que $x = A^{-1}y$ (equivalentment, $Ax = y$) i $\left\|A^{-1}\right\| = \frac{\|x\|}{\|y\|}$ (de fet podem prendre y de manera que $\|y\| = 1$).

Per altra banda usarem el següent resultat (que no demostrarem)

Lema

Donats $x, y \in \mathbb{R}^n$ amb $x \neq 0$ existeix una matriu $\overline{P}$ tal que $\overline{P}x = -y$ i $\left\|\overline{P}\right\| = \frac{\|y\|}{\|x\|}$.

Llavors, si prenem $\overline{B} := A + \overline{P}$,

$$\frac{1}{\|A^{-1}\|} = \frac{\|y\|}{\|x\|} = \left\|\overline{P}\right\| = \left\|\overline{B} - A\right\|$$

i $\overline{B}$ és singular ja que $\overline{B}x = Ax + \overline{P}x = y - y = 0$. $\square$

Exemple

Considerem el sistema

$$\begin{pmatrix} 1.01 & 0.99 \\ 0.99 & 1.01 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}$$

que té $x = (1, 1)^\top$ com a solució. Ara pertorbem el terme independent $b = (2, 2)^\top$ a $b + \delta b = (2.02, 1.98)^\top$. La solució del sistema $A(x + \delta x) = b + \delta b$ ara és $x + \delta x = (2, 0)^\top$.

Anem a explicar això a la vista de les fórmules anteriors.

Exemple (cont.)

- **Nombre de condició:** La matriu A és propera a la matriu

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Per tant,

$$\frac{\|A - B\|_\infty}{\|A\|_\infty} = \frac{0.02}{2} = 0.01.$$

Llavors, per la fórmula de Gastinel,

$$\frac{1}{\operatorname{cond}(A)_\infty} \leqslant 0.01 \Longleftrightarrow \operatorname{cond}(A)_\infty \geqslant 100.$$

Nota: De fet es pot comprovar que $\operatorname{cond}(A)_\infty = 100$.

Exemple (cont.)

- **Fita de l'error:** Notem que, en aquest exemple, $\Delta A = 0$. Per tant,

$$\frac{\|\delta x\|_\infty}{\|x\|_\infty} \leqslant \operatorname{cond}(A)_\infty \frac{\|\delta b\|_\infty}{\|b\|_\infty} \approx 100 \frac{\left\|(0.02, -0.02)^\top\right\|_\infty}{\|(2,2)^\top\|_\infty} = 100 \frac{0.02}{2} = 1.$$

Per altra banda,

$$\frac{\|\delta x\|_\infty}{\|x\|_\infty} = \frac{\left\|(2,0)^\top - (1,1)^\top\right\|_\infty}{\|(1,1)^\top\|_\infty} = \frac{\left\|(1,-1)^\top\right\|_\infty}{\|(1,1)^\top\|_\infty} = \frac{1}{1} = 1,$$

que és compatible amb la fita anterior.

Descomposició QR

Definició (Descomposició QR)

Sigui A una matriu no-singular. Anomenarem descomposició QR d'A tota descomposició $A = QR$ amb Q, R matrius $n \times n$ tals que Q és ortogonal i R és triangular superior.

Definició

Una matriu Q es diu *ortogonal* si

$$Q^\top Q = QQ^\top = \mathrm{Id}\,.$$

Resolució de sistemes amb la descomposició QR

Si tenim $A = QR$, el sistema lineal $Ax = b$ és equivalent a $QRx = b$ que és equivalent a $Rx = Q^\top b$. Llavors la solució del sistema $Ax = b$ es redueix a resoldre un sistema triangular superior $Rx = Q^T b$ amb terme independent $Q^\top b$, que és fàcil de calcular.

Descomposició QR (cont.)

El seguent resultat explica la importància d'usar matrius ortogonals.

Lema

Sigui Q una matriu ortogonal. Llavors,

1. $\det(Q) = \pm 1$.
2. $\|Q\|_2 = 1$.

Observació

L'apartat (2) del lema anterior ens diu que multiplicar per una matriu ortogonal no incrementa l'error. Aquest és el motiu pel qual l'algorisme QR és millor que l'LU.

Descomposició QR (cont.)

Demostració (del lema sobre matrius ortogonals)

(1): Per les propietats del determinant tenim:

$$1 = \det(\mathrm{Id}) = \det(Q^\top Q) = \det(Q^\top)\det(Q) = (\det(Q))^2.$$

(2):

$$\begin{aligned} \|Qw\|_2^2 &= (Qw)^\top Qw = w^\top Q^\top Qw \\ &= w^\top w = \|w\|_2^2 . \end{aligned}$$

Això dóna

$$\|Q\|_2 = \max_{\|w\|_2=1} \|Qw\|_2 = \max_{\|w\|_2=1} \|w\|_2 = 1$$

$\square$

Aplicacions de la descomposició QR: Sistemes lineals sobredeterminats i el model lineal

Sigui A una matriu $m \times n$ amb $m > n$. El sistema $Ax = b$ s'anomena *sistema lineal sobredeterminat* ja que té més equacions (m) que incògnites (n).

El mètode QR es pot aplicar a matrius no quadrades

Com veurem més endavant, donada una matriu A $m \times n$ amb $m > n$, encara podem obtenir la descomposició $A = QR$ on Q és una matriu ortogonal $m \times m$ i R és una matriu $m \times n$ triangular superior. Això ens permetrà resoldre sistemes lineals sobredeterminats.

En aquest cas ($m > n$) el que, de fet, s'utilitza és la *descomposició QR econòmica*.

Com que $m > n$, podem escriure

$$R = \begin{pmatrix} R_{\mathrm{u}} \\ 0_{m-n\times n} \end{pmatrix} \quad \text{i} \quad Q = \begin{pmatrix} Q_\ell & Q_{\mathrm{r}} \end{pmatrix},$$

on R_{u} és el bloc superior de mida $n \times n$ de la matriu R, que és triangular superior, $0_{m-n\times n}$ denota la matriu zero de mida $m - n \times n$, Q_ℓ és el bloc de mida $m \times n$ format per les primeres n columnes de la matriu Q i Q_{r} denota el bloc de mida $m \times m - n$ format per les darreres $m - n$ columnes de la matriu Q.

Llavors,

$$A = QR = \begin{pmatrix} Q_\ell & Q_{\mathrm{r}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{\mathrm{u}} \\ 0_{m-n\times n} \end{pmatrix} = Q_\ell R_{\mathrm{u}}.$$

Aquesta és la *descomposició QR econòmica d'A*.

Per altra banda, observem que l'ortogonalitat de Q ens dóna:

$$\mathrm{Id} = Q^\top Q = \begin{pmatrix} Q_\ell^\top \\ Q_{\mathrm{r}}^\top \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_\ell & Q_{\mathrm{r}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_\ell^\top Q_\ell & Q_\ell^\top Q_{\mathrm{r}} \\ Q_{\mathrm{r}}^\top Q_\ell & Q_{\mathrm{r}}^\top Q_{\mathrm{r}} \end{pmatrix}$$

i, per tant, $Q_\ell^\top Q_\ell = \mathrm{Id}$.

Aplicacions de la descomposició QR: Sistemes lineals sobredeterminats i el model lineal (cont.)

Aplicació: El model general lineal: Suposem que tenim m punts a $\mathbb{R}^n$:

$$\left(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \ldots, x_{n-1}^{(i)}, y^{(i)}\right)$$

amb $i = 1, 2, \ldots, m$ i volem trobar l'hiperplà

$$\beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 \cdots + \beta_{n-1} x_{n-1} + \beta_n x_n = b$$

d'$\mathbb{R}^n$ que millor ajusta el núvol de punts. En el cas excepcional en que els punts donats viuen a l'hiperplà, per a cada $i = 1, 2, \ldots, m$ tenim:

$$\beta_1 x_1^{(i)} + \beta_2 x_2^{(i)} + \cdots + \beta_{n-1} x_{n-1}^{(i)} + \beta_n y^{(i)} = b \Longleftrightarrow$$
$$\alpha_0 + \alpha_1 x_1^{(i)} + \alpha_2 x_2^{(i)} + \cdots + \alpha_{n-1} x_{n-1}^{(i)} = y^{(i)}$$

amb $\alpha_0 = \frac{b}{\beta_n}$ i $\alpha_j = -\frac{\beta_j}{\beta_n}$ per $j = 1, 2, \ldots, n-1$.

Aplicacions de la descomposició QR: Sistemes lineals sobredeterminats i el model lineal (cont.)

El sistema d'equacions anterior es pot escriure en forma matricial com:

$$\overset{\displaystyle A}{\overset{\|}{\begin{pmatrix} 1 & x_1^{(1)} & x_2^{(1)} & \cdots & x_{n-1}^{(1)} \\ 1 & x_1^{(2)} & x_2^{(2)} & \cdots & x_{n-1}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_1^{(m-1)} & x_2^{(m-1)} & \cdots & x_{n-1}^{(m-1)} \\ 1 & x_1^{(m)} & x_2^{(m)} & \cdots & x_{n-1}^{(m)} \end{pmatrix}}} \overset{\displaystyle \vec{\alpha}}{\overset{\|}{\begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_{n-1} \end{pmatrix}}} = \overset{\displaystyle b}{\overset{\|}{\begin{pmatrix} y^{(1)} \\ y^{(2)} \\ \vdots \\ \vdots \\ y^{(m-1)} \\ y^{(m)} \end{pmatrix}}},$$

i suposarem que A té rang (màxim) n.

Aplicacions de la descomposició QR: Sistemes lineals sobredeterminats i el model lineal (cont.)

En general no podem aspirar a resoldre el sistema anterior precisament perquè està sobredeterminat. El que si podem aspirar és a trobar x tal que

$$\|b - A\vec{\alpha}\|_2^2 = (b - A\vec{\alpha})^\top (b - A\vec{\alpha})$$

sigui mínim. El vector $\vec{\alpha}$ que minimitza la quantitat anterior ens dona *l'aproximació mínim quadràtica dels $y^{(i)}$ en funció dels punts $\left(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_{n-1}^{(i)}\right)$*.

Si definim la funció $F\colon \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ per $F(x) = (b - Ax)^\top (b - Ax)$, donat que F és quadràtica en x, $\vec{\alpha}$ minimitza F si i només si $\nabla F(x)\big|_{x=\vec{\alpha}} = 0$.

Aplicacions de la descomposició QR: Sistemes lineals sobredeterminats i el model lineal (cont.)

Per a caracteritzar $\vec{\alpha}$ anem a calcular $F(x)$.

Denotem $A = (a_{i,j})$, $b = (b_1, b_2, \ldots, b_m)$ i $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$. Llavors,

$$b - Ax = \left(b_i - \sum_{j=1}^{n} a_{i,j} x_j \right)$$

i, per tant,

$$F(x) = (b - Ax)^{\top}(b - Ax) = \sum_{i=1}^{m} \left[b_i - \sum_{j=1}^{n} a_{i,j} x_j \right]^2 .$$

Aplicacions de la descomposició QR: Sistemes lineals sobredeterminats i el model lineal (cont.)

Derivant obtenim,

$$\frac{\partial F(x)}{\partial x_j} = -2\sum_{i=1}^{m} a_{i,j}\left[b_i - \sum_{j=1}^{n} a_{i,j}x_j\right] = -2\begin{pmatrix} a_{1,j} \\ a_{2,j} \\ \vdots \\ a_{m,j} \end{pmatrix}^{\top} (b - Ax).$$

En conseqüència,

$$\nabla F(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial F(x)}{\partial x_1} \\ \frac{\partial F(x)}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial F(x)}{\partial x_n} \end{pmatrix} = -2A^{\top}(b - Ax) = -2\left(A^{\top}b - A^{\top}Ax\right).$$

Llavors, la condició $\nabla F(x)\big|_{x=\vec{\alpha}} = 0$ és equivalent a les *equacions normals*:

$$\boxed{A^{\top}A\vec{\alpha} = A^{\top}b.}$$

Aplicacions de la descomposició *QR*: Sistemes lineals sobredeterminats i el model lineal (cont.)

Ara usarem la descomposició QR econòmica d'A: $A = Q_\ell R_\mathrm{u}$ amb Q_ℓ $m \times n$ ortogonal ($Q_\ell^\top Q_\ell = \mathrm{Id}$) i R_u $n \times n$ triangular superior. A més com que A té rang n, R_u és no-singular.

Les equacions normals $A^\top A\vec{\alpha} = A^\top b$ queden:

$$\begin{aligned}
&(Q_\ell R_\mathrm{u})^\top (Q_\ell R_\mathrm{u})\vec{\alpha} = (Q_\ell R_\mathrm{u})^\top b \\
&\qquad \iff R_\mathrm{u}^\top Q_\ell^\top Q_\ell R_\mathrm{u}\vec{\alpha} = R_\mathrm{u}^\top Q_\ell^\top b \\
&\qquad\qquad \iff R_\mathrm{u}^\top R_\mathrm{u}\vec{\alpha} = R_\mathrm{u}^\top Q_\ell^\top b
\end{aligned}$$

Llavors, com que R_u (i per tant, $R_\mathrm{u}^\top$) és no-singular, podem multiplicar per $\left(R_\mathrm{u}^\top\right)^{-1}$ per l'esquerra per a obtenir

$$\boxed{R_\mathrm{u}\vec{\alpha} = Q_\ell^\top b.}$$

Definició

Donat un vector u que anomenarem *vector de Householder* es defineix la matriu de Householder com

$$P(u) = \mathrm{Id} - \tau u u^\top \quad \text{on} \quad \tau = \frac{2}{u^\top u}$$

Observació

Considerem el vector u com una matriu d'una columna i n files. Així $u^\top u = \|u\|_2^2$ mentre que

$$uu^\top = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 & u_2 & \cdots & u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1^2 & u_1 u_2 & \cdots & u_1 u_{n-1} & u_1 u_n \\ u_1 u_2 & u_2^2 & \cdots & u_2 u_{n-1} & u_2 u_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ u_{n-1} u_1 & u_{n-1} u_2 & \cdots & u_{n-1}^2 & u_{n-1} u_n \\ u_n u_1 & u_n u_2 & \cdots & u_n u_{n-1} & u_n^2 \end{pmatrix}$$

és una matriu simètrica $n \times n$.

Proposició (Propietats de les matrius de Householder)

1. **No varien per escalars:** $P(cu) = P(u)$
2. $P(u)$ *és simètrica*
3. **Són involucions:** $P(u)^{-1} = P(u)$
4. $P(u)w = w - \tau\left(u^\top w\right) u.$
5. *Sigui* $a \in \mathbb{R}^n$ *i* $s = \pm\|a\|_2$*. Llavors:* $P(a - se_1)a = se_1$*, on* $e_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}^\top$ *és el primer vector de la base canònica.*

Observació

El signe a s es pren de manera que el càlcul de $a - se_1$ no tingui cancel·lacions. Més concretament, la primera component de $a - se_1$ és $a_1 - s$. Si prenem $s = -\operatorname{signe}(a_1)\|a\|_2$ resulta que a_1 i $-s$ tenen el mateix signe i no tenim cancel·lacions al calcular $a_1 - s$.

Interpretació geomètrica de les matrius de Householder

De l'apartat (4) de la proposició anterior tenim

- $P(u)u = -u$: $P(u)u = u - \dfrac{2u^\top u}{u^\top u}u = u - 2u = -u.$
- $P(u)w = w$ per a tot vector w ortogonal a u ($u^\top w = 0$):

$$P(u)w = w - \frac{2u^\top w}{u^\top u}u = w.$$

Per tant, $P(u)$ és una reflexió respecte del pla ortogonal a u: Sigui $w_1, w_2, \ldots, w_{n-1}$ una base del pla ortogonal a u. Llavors, tot $z \in \mathbb{R}^n$ es pot escriure $z = au + \sum_{i=1}^{n-1} b_i w_i$. Tenim

$$P(u)z = aP(u)u + \sum_{i=1}^{n-1} b_i P(u) w_i = -au + \sum_{i=1}^{n-1} b_i w_i.$$

Demostració

(1):

$$P(cu) = \mathrm{Id} - \frac{2}{(cu)^\top (cu)}(cu)(cu)^\top = \mathrm{Id} - \frac{2}{u^\top u} uu^\top = P(u).$$

(2): És evident a partir de la simetria de $uu^\top$.

(3):

$$\begin{aligned} P(u)P(u) &= \left(\mathrm{Id} - \tau uu^\top\right)\left(\mathrm{Id} - \tau uu^\top\right) \\ &= \mathrm{Id} - 2\tau uu^\top + \frac{4}{(u^\top u)^2} u(u^\top u)u^\top \\ &= \mathrm{Id} - \frac{4}{u^\top u} uu^\top + \frac{4}{u^\top u} uu^\top = \mathrm{Id} \end{aligned}$$

Demostració (cont.)

(4):

$$P(u)w = w - \tau u(u^\top w) = w - \tau \left(u^\top w\right) u.$$

(5): Per l'apartat anterior tenim:

$$P(a - se_1)a = a - \frac{2(a - se_1)^\top a}{(a - se_1)^\top (a - se_1)}(a - se_1).$$

Hem de veure que $\frac{2(a-se_1)^\top a}{(a-se_1)^\top(a-se_1)} = 1$. Tenim $s^2 = a^\top a$ i, si denotem $a = (a_1, a_2, \ldots, a_n)^\top$, $a^\top e_1 = e_1^\top a = a_1$. Llavors,

$$\frac{2(a - se_1)^\top a}{(a - se_1)^\top (a - se_1)} = \frac{2(a^\top a - sa_1)}{a^\top a - 2sa^\top e_1 + s^2 e_1^\top e_1} = \frac{2(s^2 - sa_1)}{s^2 - 2sa_1 + s^2} = 1.$$

$\square$

Observació (Versió normalitzada de (5) de la proposició anterior)

Donat $a = (a_1, a_2, \ldots, a_n)^\top \in \mathbb{R}^n$ i $s = -\operatorname{signe}(a_1) \|a\|_2$ definim

$$\boxed{u(a) := \frac{1}{a_1 - s}(a - se_1) = \left(1, \frac{a_2}{a_1 - s}, \ldots, \frac{a_n}{a_1 - s}\right)^\top.}$$

De (1) i (5) de la proposició tenim $\boxed{P(u(a))a = se_1.}$

A més, $P(u(a)) = \operatorname{Id} - \tau u(a)u(a)^\top$ i, de la demostració anterior,

$$\begin{aligned}\boxed{\tau =} \frac{2}{u(a)^\top u(a)} &= 2\left(\frac{(a - se_1)^\top (a - se_1)}{(a_1 - s)^2}\right)^{-1} \\ &= \frac{2(s - a_1)(s - a_1)}{2s(s - a_1)} = \boxed{\frac{s - a_1}{s}.}\end{aligned}$$

L'algorisme funciona de manera semblant a la descomposició LU canviant les transformacions matricials per transformacions de Householder.

Denotem $A^{(0)} = A$ i fem n transformacions de la forma $Q_k A^{(k-1)} = A^{(k)}$ amb Q_k ortogonal, on $A^{(k)}$ té zeros a la columna k a sota la diagonal i les files i columnes $1, 2, \dots, k-1$ de la matriu $A^{(k-1)}$ no s'han modificat al multiplicar per Q_k. Notem que això implica que la matriu $A^{(n)} = R$ és triangular superior.

Llavors tenim:

$$\begin{aligned} R = A^{(n)} &= Q_n A^{(n-1)} = Q_n Q_{n-1} A^{(n-2)} = \cdots \\ &= Q_n Q_{n-1} \cdots Q_1 A^{(0)} = Q_n Q_{n-1} \cdots Q_1 A. \end{aligned}$$

Definim $\boxed{Q := Q_1^\top Q_2^\top \cdots Q_n^\top.}$ L'ortogonalitat dels Q_k dóna:

$$\boxed{QR = Q_1^\top Q_2^\top \cdots Q_n^\top Q_n \cdots Q_2 Q_1 A = A}$$

Descomposició QR; Mètode de Householder (cont.)

Per altra banda, les transformacions $Q_k A^{(k-1)} = A^{(k)}$ són (els subíndexs de les matrius indiquen les seves dimensions):

$$\overset{\displaystyle Q_k}{\overset{\|}{\left(\begin{array}{c|c} \mathrm{Id}_{k-1,k-1} & \mathbf{0}_{k-1,m-k+1} \\ \hline \mathbf{0}_{m-k+1,k-1} & P\left(\mathbf{u^{(k)}}\right) \end{array}\right)}}
\overset{\displaystyle A^{(k-1)}}{\overset{\|}{\left(\begin{array}{cccc} s_1 & a^{(1)}_{1,2} & \cdots & \begin{array}{ccc} a^{(1)}_{1,k} & \cdots & a^{(1)}_{1,n} \end{array} \\ & s_2 & \cdots & \begin{array}{ccc} a^{(2)}_{2,k} & \cdots & a^{(2)}_{2,n} \end{array} \\ & & \ddots & \begin{array}{ccc} \vdots & & \vdots \end{array} \\ & & & \underset{\displaystyle B^{(k-1)}}{\boxed{\begin{array}{ccc} a^{(k-1)}_{k,k} & \cdots & a^{(k-1)}_{k,n} \\ a^{(k-1)}_{k+1,k} & \cdots & a^{(k-1)}_{k+1,n} \\ \vdots & & \vdots \\ a^{(k-1)}_{m,k} & \cdots & a^{(k-1)}_{m,n} \end{array}}} \end{array}\right)}}
=
\overset{\displaystyle A^{(k)}}{\overset{\|}{\left(\begin{array}{cccc} s_1 & a^{(1)}_{1,2} & \cdots & \begin{array}{ccc} a^{(1)}_{1,k} & \cdots & a^{(1)}_{1,n} \end{array} \\ & s_2 & \cdots & \begin{array}{ccc} a^{(2)}_{2,k} & \cdots & a^{(2)}_{2,n} \end{array} \\ & & \ddots & \begin{array}{ccc} \vdots & & \vdots \end{array} \\ & & & \underset{\displaystyle B^{(k)}}{\boxed{\begin{array}{ccc} s_k & \cdots & a^{(k)}_{k,n} \\ 0 & \cdots & a^{(k)}_{k+1,n} \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & a^{(k)}_{m,n} \end{array}}} \end{array}\right)}}$$

on $\mathbf{a^{(k)}} := \left(a^{(k-1)}_{k,k}, a^{(k-1)}_{k+1,k}, \ldots, a^{(k-1)}_{m,k}\right)^{\top}$, $s_k = -\operatorname{signe}\left(a^{(k-1)}_{k,k}\right)\left\|\mathbf{a^{(k)}}\right\|_2$ i

$$\mathbf{u^{(k)}} := \frac{1}{a^{(k-1)}_{k,k} - s_k}\left(\mathbf{a^{(k)}} - s_k e_1\right) = \left(1, \frac{a^{(k-1)}_{k+1,k}}{a^{(k-1)}_{k,k} - s_k}, \ldots, \frac{a^{(k-1)}_{m,k}}{a^{(k-1)}_{k,k} - s_k}\right)^{\top}.$$

- **Ortogonalitat de la matriu Q_k:** Clarament Q_k és simètrica per l'apartat (2) de la proposició anterior. Per l'apartat (3),

$$\begin{aligned} Q_k Q_k &= \begin{pmatrix} \mathrm{Id}_{k-1,k-1} & 0_{k-1,n-k+1} \\ 0_{n-k+1,k-1} & P\big(\mathbf{u^{(k)}}\big) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{Id}_{k-1,k-1} & 0_{k-1,n-k+1} \\ 0_{n-k+1,k-1} & P\big(\mathbf{u^{(k)}}\big) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathrm{Id}_{k-1,k-1} & 0_{k-1,n-k+1} \\ 0_{n-k+1,k-1} & P\big(\mathbf{u^{(k)}}\big)P\big(\mathbf{u^{(k)}}\big) \end{pmatrix} = \mathrm{Id} \end{aligned}$$

- **Invariància de la matriu fora del bloc $\mathbf{B^{(k-1)}}$:** El fet que Q_k tingui $\mathrm{Id}_{k-1,k-1}$ com a bloc superior esquerre i que els blocs superior dret i inferior esquerre siguin 0 assegura que les files i columnes $1, 2, \ldots, k-1$ d'$A^{(k-1)}$ passen inalterades a la matriu $A^{(k)}$, al multiplicar per Q_k. Dit d'una altra manera, la part de la matriu $A^{(k-1)}$ fora de la submatriu $B^{(k-1)}$ no es modifica al multiplicar per Q_k.

- **La part de la matriu que es modifica:** $B^{(k)} := P\big(\mathbf{u^{(k)}}\big)B^{(k-1)}$.

- **Càlcul de $\mathbf{B}^{(\mathbf{k})} := P(\mathbf{u}^{(\mathbf{k})})\mathbf{B}^{(\mathbf{k-1})}$:** Es fa sense arribar a construir la matriu $P(\mathbf{u}^{(\mathbf{k})})$. Solament es necessiten els vectors $\mathbf{u}^{(\mathbf{k})}$. Per veure-ho, escrivint $B^{(k-1)}$ en columnes obtenim:

$$B^{(k-1)} = \left(\left[\mathbf{a}^{(\mathbf{k})}\right] \left[\mathbf{a}_{k+1}^{(\mathbf{k})}\right] \cdots \left[\mathbf{a}_{n}^{(\mathbf{k})}\right]\right) \text{ i}$$

$$B^{(k)} = \left(\left[P(\mathbf{u}^{(\mathbf{k})})\mathbf{a}^{(\mathbf{k})}\right] \left[P(\mathbf{u}^{(\mathbf{k})})\mathbf{a}_{k+1}^{(\mathbf{k})}\right] \cdots \left[P(\mathbf{u}^{(\mathbf{k})})\mathbf{a}_{n}^{(\mathbf{k})}\right]\right),$$

on $\mathbf{a}_j^{(\mathbf{k})} := \left(a_{k,j}^{(k-1)}, a_{k+1,j}^{(k-1)}, \ldots, a_{n,j}^{(k-1)}\right)^\top$ per $j = k+1, \ldots, n$.

  - **L'operació $B^{(k)} = P(\mathbf{u}^{(\mathbf{k})})B^{(k-1)}$ posa zeros a sota la diagonal de la columna k de la matriu $A^{(k)}$:**
    Per la versió normalitzada de l'apartat (5) de la proposició anterior,

$$P(\mathbf{u}^{(\mathbf{k})})\mathbf{a}^{(\mathbf{k})} = s_k e_1.$$

    És a dir, per a calcular la primera columna de $B^{(k)}$, solament cal calcular s_k.

- **Càlcul de la resta de columnes de $\mathbf{B}^{(\mathbf{k})}$ ($\mathbf{P}\big(\mathbf{u}^{(\mathbf{k})}\big)\mathbf{a}_{\mathbf{j}}^{(\mathbf{k})}$):**
  Per l'apartat (4) de la proposició anterior,

$$\boxed{P\left(\mathbf{u}^{(\mathbf{k})}\right)\mathbf{a}_j^{(\mathbf{k})} = \mathbf{a}_j^{(\mathbf{k})} - \tau_k \left(\left(\mathbf{u}^{(\mathbf{k})}\right)^{\top}\mathbf{a}_j^{(\mathbf{k})}\right)\mathbf{u}^{(\mathbf{k})}}$$

  amb (veure la versió normalitzada de l'apartat (5) de la proposició anterior)

$$\boxed{\tau_k := \frac{s_k - a_{k,k}^{(k-1)}}{s_k}.}$$

Descomposició QR amb reemplaçament — Mètode de Householder
Entrada/Sortida

- **A a l'entrada:** Conté la matriu A de dimensions $n \times m$
- **A a la sortida:**
  - a la part triangular inferior (excloent la diagonal) conté els vectors $\mathbf{u}^{(\mathbf{k})}$ excloent la primera component que és un 1. És a dir:
$$\mathbf{u}^{(\mathbf{k})} = \left(1, a_{k+1,k}, \ldots, a_{m,k}\right)^{\top}.$$
  - a la part triangular superior (incloent la diagonal) conté la matriu R.
- τ és un vector de dimensió n de sortida que conté els multiplicadors $(\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_n)$.
- `sing` és un codi d'error de sortida: és 1 si la matriu és singular i 0 si no ho és. En el primer cas el procediment no torna la descomposició QR i la matriu A, en principi, està destruïda.

Descomposició QR amb reemplaçament — Mètode de Householder

for $k = 1 \div n$ **do** ▷ *Pas de la matriu $A^{(k-1)}$ a la matriu $A^{(k)}$*

  $sk \leftarrow 0$; **for** $i = k \div m$ **do** $sk \leftarrow sk + a_{i,k}^2$; **end for** ▷ $\left\|\mathbf{a}^{(k)}\right\|_2^2$

  if $sk < \mathtt{tol}$ **then** $\mathtt{sing} \leftarrow 1$; **return**; **end if** ▷ *Detecció de matriu singular*

  $sk \leftarrow \sqrt{sk}$; **if** $a_{k,k} > 0$ **then** $sk \leftarrow -sk$; **end if** ▷ *Càlcul d's$_k$*

  $\tau_k \leftarrow a_{k,k} - sk$; ▷ *Usem τ_k com a variable auxiliar per emmagatzemar $a_{k,k} - s_k$*

  for $i = k+1 \div m$ **do** $a_{i,k} \leftarrow \frac{a_{i,k}}{\tau_k}$; **end for** ▷ *Normalització del vector $\mathbf{u}^{(k)}$*

  $\tau_k \leftarrow -\frac{\tau_k}{sk}$; ▷ *Càlcul del multiplicador $\tau_k = \frac{s_k - a_{k,k}}{s_k}$*

  $a_{k,k} \leftarrow sk$; ▷ *Diagonal: hi emmagatzemem s_k*

  for $j = k+1 \div n$ **do** ▷ *Arreglem la columna j*

    $\beta \leftarrow a_{k,j}$; ▷ *Inicialització de $\beta := \left(\mathbf{u}^{(k)}\right)^{\top} \mathbf{a}_j^{(k)}$. Recordem que $\left(\mathbf{u}^{(k)}\right)_1 = 1$*

    for $i = k+1 \div m$ **do** $\beta \leftarrow \beta + a_{i,k}a_{i,j}$; **end for** ▷ $\beta := \left(\mathbf{u}^{(k)}\right)^{\top} \mathbf{a}_j^{(k)}$

    $\beta \leftarrow \beta\tau_k$; ▷ $\beta := \tau_k \left(\left(\mathbf{u}^{(k)}\right)^{\top} \mathbf{a}_j^{(k)}\right)$

    $a_{k,j} \leftarrow a_{k,j} - \beta$; ▷ *Primera component de $P(\mathbf{u}^{(k)})\mathbf{a}_j^{(k)} = \mathbf{a}_j^{(k)} - \beta\mathbf{u}^{(k)}$; $\left(\mathbf{u}^{(k)}\right)_1 = 1$*

    for $i = k+1 \div m$ **do**

      $a_{i,j} \leftarrow a_{i,j} - \beta a_{i,k}$; ▷ *Les altres components de $P(\mathbf{u}^{(k)})\mathbf{a}_j^{(k)} = \mathbf{a}_j^{(k)} - \beta\mathbf{u}^{(k)}$*

    end for

  end for

end for ; $\mathtt{sing} \leftarrow 0$; **return**;

Càlcul de $Q^T b = Q_n \cdots Q_2 Q_1 b$ a partir dels vectors $\mathbf{u^{(k)}}$

Definim $\mathbf{b^{(0)}} := b$ i $\mathbf{b^{(k)}} := Q_k \mathbf{b^{(k-1)}} = \left(\mathbf{b}^{(\mathbf{k-1})}_{1\ldots k-1} \; P\big(\mathbf{u^{(k)}}\big)\mathbf{b}^{(\mathbf{k-1})}_{k\ldots m}\right)$, amb

$$P\big(\mathbf{u^{(k)}}\big)\mathbf{b}^{(\mathbf{k-1})}_{k\ldots m} = \mathbf{b}^{(\mathbf{k-1})}_{k\ldots m} - \tau_k \left(\left(\mathbf{u^{(k)}}\right)^\top \mathbf{b}^{(\mathbf{k-1})}_{k\ldots m}\right) \mathbf{u^{(k)}}.$$

Llavors, $\mathbf{b^{(n)}} = Q^T b$ es pot calcular:

Càlcul de $Q^T b = Q_n \cdots Q_2 Q_1 b$ a partir dels vectors $\mathbf{u^{(k)}}$

for $k = 1 \div n$ **do** ▷ *Càlcul de* $\mathbf{b^{(k)}} := Q_k \mathbf{b^{(k-1)}}$

  $\beta \leftarrow b_k$; ▷ *Inicialització de* $\beta := \left(\mathbf{u^{(k)}}\right)^\top \mathbf{b}^{(\mathbf{k-1})}_{k\ldots m}$. *Recordem que* $\left(\mathbf{u^{(k)}}\right)_1 = 1$

  for $i = k+1 \div m$ **do** $\beta \leftarrow \beta + a_{i,k} b_i$; **end for** ▷ $\beta := \left(\mathbf{u^{(k)}}\right)^\top \mathbf{b}^{(\mathbf{k-1})}_{k\ldots m}$

  $\beta \leftarrow \beta\tau_k$; ▷ $\beta := \tau_k \left(\left(\mathbf{u^{(k)}}\right)^\top \mathbf{b}^{(\mathbf{k-1})}_{k\ldots m}\right)$

  $b_k \leftarrow b_k - \beta$; ▷ *Inici de* $P\big(\mathbf{u^{(k)}}\big)\mathbf{b}^{(\mathbf{k-1})}_{k\ldots m} = \mathbf{b}^{(\mathbf{k-1})}_{k\ldots m} - \beta\mathbf{u^{(k)}}$; $\left(\mathbf{u^{(k)}}\right)_1 = 1$

  for $i = k+1 \div m$ **do**

    $b_i \leftarrow b_i - \beta a_{i,k}$; ▷ *Les altres components de* $P\big(\mathbf{u^{(k)}}\big)\mathbf{b}^{(\mathbf{k-1})}_{k\ldots m} = \mathbf{b}^{(\mathbf{k-1})}_{k\ldots m} - \beta\mathbf{u^{(k)}}$

  end for

end for

Observació

Els algorismes anteriors s'han formulat de manera consistent pel cas en que la matriu A és $m \times n$ amb $m > n$.
Observem que si la matriu és quadrada ($m = n$) llavors no cal fer el darrer pas al bucle inicial. És a dir, solament hem d'arribar fins a $n - 1$ ja que no hi ha res a anul·lar sota $a_{n,n}$:

Algorisme (Cas de matrius quadrades)

for $k = 1 \div n - 1$ **do** ▻ *Pas de la matriu $A^{(k-1)}$ a la matriu $A^{(k)}$*

⋮

end for

Complexitat de l'algorisme QR

El nombre d'operacions per una matriu quadrada de mida $n \times n$ és

$$\frac{2}{3}n^3 + n^2 + \frac{1}{3}n - 2,$$

sense comptar el càlcul de $Q^T b$ ni el de resoldre el sistema $Rx = Q^T b$.

Per tant, l'eficiència de la descomposició QR és una mica pitjor que la de la descomposició LU.

Exemple

Volem calcular la descomposició QR de la matriu

$$A^{(0)} = A = \begin{pmatrix} 12 & -51 & 4 \\ 6 & 167 & -68 \\ -4 & 24 & -41 \end{pmatrix}.$$

Anem a fer la primera transformació d'$A^{(0)}$ a $A^{(1)}$. Prenem $\mathbf{a}^{(1)} = (12, 6, -4)^{\top}$. Llavors tenim $s_1 = -\operatorname{signe}(12)\left\|\mathbf{a}^{(1)}\right\|_2 = -14$,
$\mathbf{u}^{(1)} = \frac{1}{12+14}\left(\mathbf{a}^{(1)} + 14e_1\right) = \left(1, \frac{3}{13}, -\frac{2}{13}\right)^{\top}$ i $\tau_1 = \frac{s_1 - \mathbf{a}_1^{(1)}}{s_1} = \frac{-14-12}{-14} = \frac{13}{7}$.

Encara que no fa falta calculem la matriu

$$\begin{aligned} Q_1 &= P\left(\mathbf{u}^{(1)}\right) = \mathrm{Id}_{3\times 3} - \tau_1 \mathbf{u}^{(1)} \left(\mathbf{u}^{(1)}\right)^{\top} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{13}{7}\begin{pmatrix} 1 & \frac{3}{13} & -\frac{2}{13} \\ \frac{3}{13} & \frac{9}{169} & -\frac{6}{169} \\ -\frac{2}{13} & -\frac{6}{169} & \frac{4}{169} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{6}{7} & -\frac{3}{7} & \frac{2}{7} \\ -\frac{3}{7} & \frac{82}{91} & \frac{6}{91} \\ \frac{2}{7} & \frac{6}{91} & \frac{87}{91} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Exemple (cont.)

Observem que

$$A^{(1)} = Q_1 A = \begin{pmatrix} -14 & -21 & 14 \\ \boxed{\frac{3}{13}} & \frac{2261}{13} & -\frac{854}{13} \\ \boxed{-\frac{2}{13}} & \frac{252}{13} & -\frac{553}{13} \end{pmatrix} \quad \text{i} \quad \tau = \left(\tfrac{13}{7}, \cdot, \cdot\right).$$

La primera columna ja la sabíem per l'apartat (5) de la proposició. Les altres dues es poden calcular:

$$\tau_1 \left(\mathbf{u}^{(1)}\right)^\top \mathbf{a}_2^{(1)} = \tfrac{13}{7} \left(\mathbf{u}^{(1)}\right)^\top (-51, 167, 24)^\top = -\tfrac{13}{7}\tfrac{210}{13} = -30;$$

$$P\left(\mathbf{u}^{(1)}\right) \mathbf{a}_2^{(1)} = \mathbf{a}_2^{(1)} + 30\mathbf{u}^{(1)} = \left(-21, 167 + \tfrac{90}{13}, 24 - \tfrac{60}{13}\right)^\top;$$

$$\tau_1 \left(\mathbf{u}^{(1)}\right)^\top \mathbf{a}_3^{(1)} = \tfrac{13}{7} \left(\mathbf{u}^{(1)}\right)^\top (4, -68, -41)^\top = -\tfrac{13}{7}\tfrac{70}{13} = -10;$$

$$P\left(\mathbf{u}^{(1)}\right) \mathbf{a}_3^{(1)} = \mathbf{a}_3^{(1)} + 10\mathbf{u}^{(1)} = \left(14, -68 + \tfrac{30}{13}, -41 - \tfrac{20}{13}\right)^\top.$$

Exemple (cont.)

Ara anem a fer la següent iteració. Tenim,

$$\mathbf{a}^{(2)} = \tfrac{1}{13}(2261, 252)^\top, \quad s_2 = -\,\text{signe}(2261/13)\left\|\mathbf{a}^{(2)}\right\|_2 = -175,$$

$$\mathbf{u}^{(2)} = \frac{1}{2261/13+175}\left(\mathbf{a}^{(2)} + 175 e_1\right) = \left(1, \tfrac{1}{18}\right)^\top \text{ i } \tau_2 = \frac{s_2 - \mathbf{a}_1^{(2)}}{s_2} = \frac{-175-2261/13}{-175} = \frac{648}{325}.$$

Llavors,

$$Q_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{323}{325} & -\frac{36}{325} \\ 0 & -\frac{36}{325} & -\frac{323}{325} \end{pmatrix}, \quad R = A^{(2)} = Q_2 A^{(1)} = \begin{pmatrix} -14 & -21 & 14 \\ \boxed{\frac{3}{13}} & -175 & 70 \\ \boxed{-\frac{2}{13}} & \boxed{\frac{1}{18}} & -35 \end{pmatrix} \quad \text{i}$$

$$\tau = \left(\tfrac{13}{7}, \tfrac{648}{325}, \cdot\right).$$

La segona columna d'R ja la sabíem per l'apartat (5) de la proposició. La tercera es pot calcular per:

$$\tau_2\left(\mathbf{u}^{(2)}\right)^\top \mathbf{a}_3^{(2)} = \frac{648}{325}\left(\mathbf{u}^{(2)}\right)^\top\left(-\frac{854}{13}, -\frac{553}{13}\right)^\top = -\frac{648}{325}\,\frac{1225}{18} = -\frac{1764}{13};$$

$$P\left(\mathbf{u}^{(2)}\right)\mathbf{a}_3^{(2)} = \mathbf{a}_3^{(2)} + \frac{1764}{13}\mathbf{u}^{(2)} = \left(-\frac{854}{13} + \frac{1764}{13}, -\frac{553}{13} + \frac{1764}{13}\,\frac{1}{18}\right)^\top = (70, -35)^\top.$$

Exemple (cont.)

Si volem resoldre el sistema $Ax = b$ amb $b = (1, 2, 3)^\top$ tenim

$$\tau_1 \left(\mathbf{u}^{(1)}\right)^\top \mathbf{b}^{(0)} = \tfrac{13}{7}\left(1, \tfrac{3}{13}, -\tfrac{2}{13}\right)(1,2,3)^\top = \tfrac{13}{7};$$

$$\mathbf{b}^{(1)} = P\left(\mathbf{u}^{(1)}\right)\mathbf{b}^{(0)} = \mathbf{b}^{(0)} - \tfrac{13}{7}\mathbf{u}^{(1)} = \left(1 - \tfrac{13}{7}, 2 - \tfrac{13}{7}\tfrac{3}{13}, 3 + \tfrac{13}{7}\tfrac{2}{13}\right)^\top$$
$$= \left(-\tfrac{6}{7}, \tfrac{11}{7}, \tfrac{23}{7}\right)^\top;$$

$$\tau_2 \left(\mathbf{u}^{(2)}\right)^\top \mathbf{b}^{(1)}_{2,3} = \tfrac{648}{325}\left(1, \tfrac{1}{18}\right)\left(\tfrac{11}{7}, \tfrac{23}{7}\right)^\top = \tfrac{648}{325}\tfrac{221}{126} = \tfrac{612}{175};$$

$$P\left(\mathbf{u}^{(2)}\right)\mathbf{b}^{(1)}_{2,3} = \mathbf{b}^{(1)}_{2,3} - \tfrac{612}{175}\mathbf{u}^{(2)} = \left(\tfrac{11}{7} - \tfrac{612}{175}, \tfrac{23}{7} - \tfrac{612}{175}\tfrac{1}{18}\right)^\top = \left(-\tfrac{337}{175}, \tfrac{541}{175}\right)^\top.$$

Per tant, $$Qb = \mathbf{b}^{(2)} = \left(-\tfrac{6}{7}, -\tfrac{337}{175}, \tfrac{541}{175}\right)^\top,$$
i hem de resoldre el sistema

$$Rx = \mathbf{b}^{(2)} \iff \begin{pmatrix} -14 & -21 & 14 \\ 0 & -175 & 70 \\ 0 & 0 & -35 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{6}{7} \\ -\frac{337}{175} \\ \frac{541}{175} \end{pmatrix},$$

que dóna $$x_1 = \tfrac{23}{2450}, \quad x_2 = -\tfrac{149}{6125}, \quad x_3 = -\tfrac{541}{6125}.$$

S'acostuma a usar que la dimensió és molt gran o la matriu del sistema té una estructura que ho permet.

Construcció estàndard d'un mètode iteratiu per a resoldre $Ax = b$

En primer lloc triem una matriu no-singular N.

Seguidament definim $P := N - A$ (o equivalentment $A = N - P$).

Llavors el sistema $\boxed{Ax = b}$ queda

$$(N - P)x = b \Longleftrightarrow Nx = Px + b \Longleftrightarrow \boxed{x = N^{-1}Px + N^{-1}b,}$$

que és una versió en termes de punt fix del sistema inicial.

El càlcul de la solució x es pot implementar com un procediment d'iteració directa de la funció $g(x) = Mx + N^{-1}b$ amb *matriu d'iteració* $M := N^{-1}P$.

Teorema

El mètode iteratiu $x^{(k+1)} = Mx^{(k)} + N^{-1}b$ és convergent si i només si M és convergent. És a dir, si i només si $\rho(M) < 1$.

Corol·lari

Si $\|M\| < 1$ per alguna norma de matrius, llavors el mètode iteratiu $x^{(k+1)} = Mx^{(k)} + N^{-1}b$ és convergent.

Per altra banda, recordem que donada una matriu M i donat $\varepsilon > 0$ existeix una norma de matrius $\|\cdot\|_{M,\varepsilon}$ tal que $\rho(M) \leqslant \|M\|_{M,\varepsilon} \leqslant \rho(M) + \varepsilon$. Per tant sembla raonable la següent

Definició

El nombre $R = -\log(\rho(M))$ s'anomena *velocitat de convergència* de l'algorisme. Òbviament com més gran és R més ràpida és la convergència de l'algorisme.

Demostració (del Teorema)

Definim $e^{(k)} := x^{(k)} - x$ (és a dir, l'error absolut a la iteració k).
Tenim:

$$\begin{aligned} e^{(k)} &= x^{(k)} - x = Mx^{(k-1)} + N^{-1}b - \left(Mx + N^{-1}b\right) \\ &= M\left(x^{(k-1)} - x\right) = Me^{(k-1)}. \end{aligned}$$

Iterant obtenim $e^{(k)} = M^k e^{(0)}$. Ara observem que

$$\lim_{k\to\infty} x^{(k)} = x \Longleftrightarrow 0 = \lim_{k\to\infty} e^{(k)} = \lim_{k\to\infty} M^k e^{(0)} \Longleftrightarrow \lim_{k\to\infty} M^k = 0.$$

Per tant, mètode és convergent si i només si M és convergent. □

Lema (Fórmula d'error a posteriori pels mètodes iteratius)

$$\left\| x^{(k)} - x \right\| \leqslant \frac{\|M\|}{1 - \|M\|} \left\| x^{(k)} - x^{(k-1)} \right\|$$

Demostració

Usant un càlcul anterior, escrivim

$$x^{(k)} - x = M\left(x^{(k-1)} - x\right) = -M\left(x^{(k)} - x^{(k-1)}\right) + M\left(x^{(k)} - x\right).$$

Per tant,

$$\left\| x^{(k)} - x \right\| \leqslant \|M\| \left\| x^{(k)} - x^{(k-1)} \right\| + \|M\| \left\| x^{(k)} - x \right\|,$$

que és equivalent a

$$(1 - \|M\|) \left\| x^{(k)} - x \right\| \leqslant \|M\| \left\| x^{(k)} - x^{(k-1)} \right\|,$$

que és el que volíem demostrar. □

Mètode de Jacobi

Consisteix a agafar com a matriu N la diagonal d'$A = (a_{i,j})$:

$$N := D := \begin{pmatrix} a_{1,1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{2,2} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & a_{n,n} \end{pmatrix} \quad P = \begin{pmatrix} 0 & -a_{1,2} & \cdots & -a_{1,n-1} & -a_{1,n} \\ -a_{2,1} & 0 & \cdots & -a_{2,n-1} & -a_{2,n} \\ -a_{3,1} & -a_{3,2} & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 & -a_{n-1,n} \\ -a_{n,1} & -a_{n,2} & \cdots & -a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix}$$

Observació

Això solament és possible si $a_{i,i} \neq 0$ per a cada i ja que N ha de ser no-singular.

Per a obtenir una expressió clara i efectiva del mètode de Jacobi, en comptes d'usar l'expressió final $x = N^{-1}Px + N^{-1}b$, és mes convenient usar l'expressió equivalent $Nx = Px + b$ que dóna la recurrència:

$$Nx^{(k+1)} = Px^{(k)} + b.$$

Expressada matricialment, la recurrència anterior queda:

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{2,2} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & a_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -a_{1,2} & \cdots & -a_{1,n-1} & -a_{1,n} \\ -a_{2,1} & 0 & \cdots & -a_{2,n-1} & -a_{2,n} \\ -a_{3,1} & -a_{3,2} & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 & -a_{n-1,n} \\ -a_{n,1} & -a_{n,2} & \cdots & -a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}.$$

L'equació (component) i d'aquesta equació matricial és:

$$a_{i,i} x_i^{(k+1)} = b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} a_{i,j} x_j^{(k)} \Longleftrightarrow \boxed{x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{i,i}} \left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} a_{i,j} x_j^{(k)} \right)}$$

L'algorisme del *Mètode de Jacobi*, determinat per aquesta fórmula, es mostra a la transparència següent.

Algorisme (Mètode de Jacobi)

procedure $\textsc{Jacobi}(A, x, b, n, \tau, \texttt{iconv})$ ▷ *A l'entrada $x = x^{(0)}$; a la sortida x és la solució*
  Vector Auxiliar: $x^{(k)}[n]$; ▷ *Per emmagatzemar el vector inicial de cada iteració*
  $k \leftarrow 0$; $\texttt{iconv} \leftarrow 0$; ▷ *Inicialització del comptador d'iteracions i del control de convergència*
  do
    $k \leftarrow k + 1$; ▷ *Comptem les iteracions*
    for $i = 1 \div n$ **do** $x_i^{(k)} \leftarrow x_i$; **end for** ▷ *Copiem x a $x^{(k)}$ per a inicialitzar la iteració*
    for $i = 1 \div n$ **do** ▷ *Bucle de càlcul de $x_i^{(k+1)}$*
      $s \leftarrow 0$; ▷ *Inicialització. Per a calcular el sumatori*
      for $j = 1 \div i - 1$ **do** $s \leftarrow s + a_{i,j} x_j^{(k)}$; **end for** ▷ *Calculem $\sum_{j=1; j \neq i}^{n} a_{i,j} x_j^{(k)}$*
      for $j = i + 1 \div n$ **do** $s \leftarrow s + a_{i,j} x_j^{(k)}$; **end for** ▷ *Per a evitar un* **if**
      $x_i \leftarrow \frac{b_i - s}{a_{i,i}}$; ▷ *Actualitzem x_i a $x_i^{(k+1)}$*
    end for
  while $\left\| x - x^{(k)} \right\| \geqslant \tau \ \& \ k < \texttt{kMAX}$ ▷ *Condició de parada i control d'iteracions*
  if $k = \texttt{kMAX}$ **then** $\texttt{iconv} \leftarrow 1$; **end if** ▷ *Manca de convergència; la solució no és bona*
end procedure

Exemple (Wikipedia)

Considerem el següent sistema d'equacions:

$$\begin{cases} 10x_1 - x_2 + 2x_3 = 6, \\ -x_1 + 11x_2 - x_3 + 3x_4 = 25, \\ 2x_1 - x_2 + 10x_3 - x_4 = -11, \\ 3x_2 - x_3 + 8x_4 = 15, \end{cases}$$

que té $(1, 2, -1, 1)$ per solució.

El mètode de Jacobi per aquest sistema és

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{10}\left(6 + x_2^{(k)} - 2x_3^{(k)}\right), \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{11}\left(25 + x_1^{(k)} + x_3^{(k)} - 3x_4^{(k)}\right), \\ x_3^{(k+1)} = \frac{1}{10}\left(-11 - 2x_1^{(k)} + x_2^{(k)} + x_4^{(k)}\right), \\ x_4^{(k+1)} = \frac{1}{8}\left(15 - 3x_2^{(k)} + x_3^{(k)}\right), \end{cases}$$

Mètode de Jacobi (cont.)

Exemple (Wikipedia — cont.)

Les primeres iteracions del mètode són

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	$x_4^{(k)}$	$\left\lVert x^{(k)} - x^{(k-1)} \right\rVert$	$\left\lVert x^{(k)} - x \right\rVert$
0	0.0	0.0	0.0	0.0		
1	0.6	2.27273	-1.1	1.875	2.27273	0.875
2	1.04727	1.71591	-0.80523	0.88523	0.98977	0.28409
3	0.93264	2.05331	-1.04934	1.13088	0.33740	0.13088
4	1.01520	1.95370	-0.96811	0.97384	0.15704	0.04630
5	0.98899	2.01141	-1.01029	1.02135	0.05772	0.02135

Exemple (Wikipedia — cont.)

Per altra banda la suma de les files en valor absolut de la matriu d'iteració és $\left(\frac{3}{10}, \frac{5}{11}, \frac{2}{5}, \frac{1}{2}\right)^{\top}$.

Per tant, la norma infinit de la matriu d'iteració és $\frac{1}{2}$.

Això ens dóna com a condició de parada $\left\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\right\|_{\infty} < \mathtt{tol}$ ja que

$$\left\|x^{(k)} - x\right\|_{\infty} \leqslant \frac{1/2}{1-1/2}\left\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\right\|_{\infty} = \left\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\right\|_{\infty}.$$

Una condició suficient de convergència del Mètode de Jacobi és:

$$\|M\| = \left\|D^{-1}P\right\| < 1.$$

Notem que D^{-1} és la matriu diagonal $\frac{1}{a_{i,i}}$. Per tant,

$$M = D^{-1}P = (m_{i,j}) \quad \text{amb} \quad \boxed{m_{i,j} = \begin{cases} 0 & \text{si } i = j \\ -\frac{a_{i,j}}{a_{i,i}} & \text{si } i \neq j \end{cases}.}$$

Llavors, la condició

$$1 > \|M\|_\infty = \max_{1\leqslant i\leqslant n} \sum_{j=1}^{n} |m_{i,j}| = \max_{1\leqslant i\leqslant n} \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} \frac{|a_{i,j}|}{|a_{i,i}|}$$

implica que, per a cada i,

$$\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} \frac{|a_{i,j}|}{|a_{i,i}|} < 1 \iff \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} |a_{i,j}| < |a_{i,i}|.$$

Definició

Una matriu $A = (a_{i,j})$ tal que $\sum_{j=1;j\neq i}^{n} |a_{i,j}| < |a_{i,i}|$ per a tot $i = 1, 2, \ldots, n$ s'anomena *estrictament diagonalment dominant per files*.

Per altra banda, la condició

$$1 > \|M\|_1 = \max_{1 \leqslant j \leqslant n} \sum_{i=1}^{n} |m_{i,j}| = \max_{1 \leqslant j \leqslant n} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{n} \frac{|a_{i,j}|}{|a_{j,j}|}$$

implica que, per a cada j,

$$\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{n} \frac{|a_{i,j}|}{|a_{j,j}|} < 1 \Longleftrightarrow \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{n} |a_{i,j}| < |a_{j,j}| .$$

Definició

Una matriu $A = (a_{i,j})$ tal que $\sum_{i=1;i\neq j}^{n} |a_{i,j}| < |a_{j,j}|$ per a tot $j = 1, 2, \dots, n$ s'anomena *estrictament diagonalment dominant per columnes*.

Resumint, hem demostrat la següent:

Proposició
Condicions suficients de convergència del Mètode de Jacobi

Si A és estrictament dominant per files o per columnes, llavors el mètode de Jacobi aplicat a resoldre un sistema $Ax = b$ és convergent.

En aquest context podem fitar la velocitat de convergència:

$$R = -\log(\rho(M)) = \log \frac{1}{\rho(M)} \geqslant \log \frac{1}{\min\{\|M\|_1, \|M\|_\infty\}}.$$

Consisteix a prendre la matriu N igual a la part triangular inferior d'$A = (a_{i,j})$:

$$N = \begin{pmatrix} a_{1,1} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ a_{n,1} & \cdots & a_{n,n-1} & a_{n,n} \end{pmatrix} \quad P = \begin{pmatrix} 0 & -a_{1,2} & \cdots & -a_{1,n-1} & -a_{1,n} \\ 0 & 0 & \cdots & -a_{2,n-1} & -a_{2,n} \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 & -a_{n-1,n} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Observació

Això solament és possible si $a_{i,i} \neq 0$ per a cada i ja que N ha de ser no-singular.

Com abans, usarem la recurrència:

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ a_{n,1} & \cdots & a_{n,n-1} & a_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -a_{1,2} & \cdots & -a_{1,n-1} & -a_{1,n} \\ 0 & 0 & \cdots & -a_{2,n-1} & -a_{2,n} \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 & -a_{n-1,n} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}.$$

Mètode de Gauss-Seidel (cont.)

L'equació (component) i de l'equació matricial anterior és:

$$\sum_{j=1}^{i} a_{i,j} x_j^{(k+1)} = b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{i,j} x_j^{(k)} \iff$$

$$a_{i,i} x_i^{(k+1)} = b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{i,j} x_j^{(k)} - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j} x_j^{(k+1)} \iff$$

$$\boxed{x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{i,i}} \left(b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{i,j} x_j^{(k)} - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j} x_j^{(k+1)} \right)}$$

L'algorisme del *Mètode de Gauss-Seidel*, determinat per aquesta fórmula, es mostra a la transparència següent.

Algorisme (Mètode de Gauss-Seidel amb reemplaçament)

procedure GAUSSSEIDEL(A, x, b, n, τ, iconv) ▻ **Entrada:** $x = x^{(0)}$ **Sortida:** *x és la solució*

  $k \leftarrow 0$; $\texttt{iconv} \leftarrow 0$; ▻ *Inicialització del comptador d'iteracions i del control de convergència*

  do

    $k \leftarrow k+1$; $e \leftarrow -1$; ▻ *Actualitzem el comptador d'iteracions e acabarà sent $\|x - x^{(k)}\|$ (aquesta versió de l'algorisme usa $\|\cdot\|_\infty$)*

    for $i = 1 \div n$ **do** ▻ *Bucle de càlcul de $x_i^{(k+1)}$. Es crucial que s'hi circuli en ordre creixent de i*

      $s \leftarrow 0$; ▻ *Inicialització. Per a calcular el sumatori*

      ▻ **Nota:** *per $j = 1 \div i-1$, $x_j = x_j^{(k+1)}$ ja què les i's varien en ordre creixent*

      for $j = 1 \div i-1$ **do** $s \leftarrow s + a_{i,j} x_j^{(k)}$; **end for** ▻ *Calculem $\sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j} x_j^{(k+1)}$*

      for $j = i+1 \div n$ **do** $s \leftarrow s + a_{i,j} x_j^{(k)}$; **end for** ▻ *Hi afegim $\sum_{j=i+1}^{n} a_{i,j} x_j^{(k)}$*

      $\widetilde{x} \leftarrow \frac{b_i - s}{a_{i,i}}$; ▻ *$x_i^{(k+1)}$ en una variable temporal $\widetilde{x}$*

      if $|x_i - \widetilde{x}| > e$ **then** $e \leftarrow |x_i - \widetilde{x}|$; **end if** ▻ *Actualitzant $\|x - x^{(k)}\|_\infty$ Depèn de la norma que s'usi*

      $x_i \leftarrow \widetilde{x}$; ▻ *Actualitzem x_i a $x_i^{(k+1)}$*

    end for

  while $e \geqslant \tau$ & $k < \texttt{kMAX}$ ▻ *Condició de parada i control d'iteracions*

  if $k = \texttt{kMAX}$ **then** $\texttt{iconv} \leftarrow 1$; **end if** ▻ *Manca de convergència; la solució no és bona*

end procedure

Mètode de Gauss-Seidel (cont.)

Exemple (Wikipedia)

Com abans, considerem el següent sistema d'equacions:

$$\begin{cases} 10x_1 - x_2 + 2x_3 = 6, \\ -x_1 + 11x_2 - x_3 + 3x_4 = 25, \\ 2x_1 - x_2 + 10x_3 - x_4 = -11, \\ 3x_2 - x_3 + 8x_4 = 15, \end{cases}$$

(recordem que la solució és $(1, 2, -1, 1)$).

El mètode de Gauss-Seidel per aquest sistema és

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{10}\left(6 + x_2^{(k)} - 2x_3^{(k)}\right), \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{11}\left(25 + x_1^{(k+1)} + x_3^{(k)} - 3x_4^{(k)}\right), \\ x_3^{(k+1)} = \frac{1}{10}\left(-11 - 2x_1^{(k+1)} + x_2^{(k+1)} + x_4^{(k)}\right), \\ x_4^{(k+1)} = \frac{1}{8}\left(15 - 3x_2^{(k+1)} + x_3^{(k+1)}\right), \end{cases}$$

Exemple (Wikipedia — cont.)

Les primeres iteracions del mètode són

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	$x_4^{(k)}$	$\left\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\right\|$	$\left\|x^{(k)} - x\right\|$
0	0.0	0.0	0.0	0.0		
1	0.6	2.32727	-0.98727	0.87886	2.32727	0.4
2	1.03018	2.03694	-1.01446	0.98434	0.43018	0.03694
3	1.00659	2.00356	-1.00253	0.99835	0.03338	0.00659
4	1.00086	2.00030	-1.00031	0.99985	0.00572	0.00086
5	1.00009	2.00002	-1.00003	0.99999	0.00077	0.00009

Observem la convergència més ràpida que Jacobi.

Exemple (Wikipedia — cont.)

Treballant una mica es pot veure que la norma infinit de la matriu d'iteració és $\frac{39}{110}$.

Això ens dóna com a condició de parada $\left\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\right\|_\infty < \frac{\mathtt{tol}}{0.549295\ldots}$ ja que

$$\begin{aligned}
\left\|x^{(k)} - x\right\|_\infty &\leqslant \frac{39/110}{1 - 39/110} \left\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\right\|_\infty \\
&= \frac{39}{71} \left\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\right\|_\infty \\
&= 0.549295\ldots \left\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\right\|_\infty
\end{aligned}$$

Mètode de Gauss-Seidel (cont.)

L'estudi de la convergència del mètode de Gauss-Seidel és una mica més complicat que el de Jacobi. Es fa usant la següent:

Proposició
Condició suficient de convergència del Mètode de Gauss-Seidel

Si A és estrictament dominant per files, el mètode de Gauss-Seidel aplicat a resoldre un sistema $Ax = b$ és convergent.

Demostració

Denotem

$$r_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} \frac{|a_{i,j}|}{|a_{i,i}|} \quad \text{i} \quad r = \max_{1\leqslant i\leqslant n} r_i.$$

Com que A és estrictament diagonalment dominant, $r < 1$.

Per altra banda, com ja hem fet abans, definim $e^{(k)} := x^{(k)} - x$ (és a dir, $e^{(k)}$ és l'error absolut a la iteració k).

Demostrarem que per tot $i = 1, 2, \ldots, n$,

$$\left| e_i^{(k)} \right| \leqslant r_i \left\| e^{(k-1)} \right\|_\infty .$$

Demostració (cont.)

Observem que això implica $\left|e_i^{(k)}\right| \leqslant r \left\|e^{(k-1)}\right\|_\infty$ i, per tant,

$$\left\|e^{(k)}\right\|_\infty = \max_{1 \leqslant i \leqslant n} \left|e_i^{(k)}\right| \leqslant r \left\|e^{(k-1)}\right\|_\infty .$$

Iterant aquesta desigualtat tenim $\left\|e^{(k)}\right\|_\infty \leqslant r^k \left\|e^{(0)}\right\|_\infty$, que implica $\lim_{k\to\infty} \left\|e^{(k)}\right\|_\infty = 0$. Llavors, $\lim_{k\to\infty} x^{(k)} = x$ i el mètode és convergent.

Per a demostrar la proposició necessitem una expressió fàcil per $e_i^{(k)}$.

Mètode de Gauss-Seidel (cont.)

Demostració (cont.)

Recordem que $Nx = Px + b$ (ja que x és la vertadera solució del sistema). Llavors, particularitzant el Mètode de Gauss-Seidel a $x = x^{(k+1)} = x^{(k)}$, tenim

$$x_i = \frac{1}{a_{i,i}}\left(b_i - \sum_{j=1;j\neq i}^{n} a_{i,j}x_j\right)$$

per tot i. En conseqüència, com que $e_i^{(k)} = x_i^{(k)} - x_i$,

$$\begin{aligned}
e_i^{(k)} &= \frac{1}{a_{i,i}}\left(b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{i,j}x_j^{(k-1)} - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j}x_j^{(k)}\right) - \frac{1}{a_{i,i}}\left(b_i - \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} a_{i,j}x_j\right)\\
&= -\frac{1}{a_{i,i}}\left(\sum_{j=i+1}^{n} a_{i,j}x_j^{(k-1)} + \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j}x_j^{(k)} - \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} a_{i,j}x_j\right)\\
&= -\sum_{j=i+1}^{n} \frac{a_{i,j}}{a_{i,i}} e_j^{(k-1)} - \sum_{j=1}^{i-1} \frac{a_{i,j}}{a_{i,i}} e_j^{(k)}.
\end{aligned}$$

Demostració (cont.)

Per tant,

$$\left|e_i^{(k)}\right| \leqslant \sum_{j=i+1}^{n} \frac{|a_{i,j}|}{|a_{i,i}|} \left|e_j^{(k-1)}\right| + \sum_{j=1}^{i-1} \frac{|a_{i,j}|}{|a_{i,i}|} \left|e_j^{(k)}\right|.$$

Ara anem a demostrar que $\left|e_i^{(k)}\right| \leqslant r_i \left\|e^{(k-1)}\right\|_\infty$ per inducció respecte d'i.

Comencem amb $i = 1$. Tenim,

$$\left|e_1^{(k)}\right| \leqslant \sum_{j=2}^{n} \frac{|a_{1,j}|}{|a_{1,1}|} \left|e_j^{(k-1)}\right| \leqslant \left\|e^{(k-1)}\right\|_\infty \sum_{j=2}^{n} \frac{|a_{1,j}|}{|a_{1,1}|} = r_1 \left\|e^{(k-1)}\right\|_\infty.$$

Demostració (cont.)

Ara suposem que $\left|e_\ell^{(k)}\right| \leqslant r_\ell \left\|e^{(k-1)}\right\|_\infty$ per $\ell = 1, 2, \ldots, i-1$ i demostrem-ho per i:

$$\begin{aligned}
\left|e_i^{(k)}\right| &\leqslant \sum_{j=i+1}^{n} \frac{|a_{i,j}|}{|a_{i,i}|} \left|e_j^{(k-1)}\right| + \sum_{j=1}^{i-1} \frac{|a_{i,j}|}{|a_{i,i}|} \left|e_j^{(k)}\right| \\
&\leqslant \sum_{j=i+1}^{n} \frac{|a_{i,j}|}{|a_{i,i}|} \left\|e^{(k-1)}\right\|_\infty + \sum_{j=1}^{i-1} \frac{|a_{i,j}|}{|a_{i,i}|} \left(r_j \left\|e^{(k-1)}\right\|_\infty\right) \\
&\leqslant \left(\sum_{j=i+1}^{n} \frac{|a_{i,j}|}{|a_{i,i}|} + \sum_{j=1}^{i-1} \frac{|a_{i,j}|}{|a_{i,i}|}\right) \left\|e^{(k-1)}\right\|_\infty = r_i \left\|e^{(k-1)}\right\|_\infty .
\end{aligned}$$

$r_j \leqslant r < 1 \Longrightarrow r_j \left\|e^{(k-1)}\right\|_\infty < \left\|e^{(k-1)}\right\|_\infty$

□

Observacions als mètodes de Jacobi i Gauss-Seidel

- El nombre r de la demostració anterior que controla la convergència del mètode de Gauss-Seidel, és la norma infinit de la *matriu d'iteració de Jacobi*.
- De la demostració anterior tenim que com més petit sigui r més ràpida serà la convergència de Gauss-Seidel. Notem que, de fet, el mateix passa pel mètode de Jacobi.
- Malgrat que els dos mètodes tenen la mateixa condició suficient de convergència hi ha exemples en que Jacobi convergeix i Gauss-Seidel no; i també a l'inrevés hi ha exemples en que Gauss-Seidel convergeix i Jacobi no.
- Gauss-Seidel és més ràpid que Jacobi quan convergeix i també quan divergeix. Intuïtivament és clar que això ha de passar ja que Gauss-Seidel usa a cada iteració la informació el més actualitzada possible (usa les components de $x^{(k+1)}$ en comptes de les components de $x^{(k)}$ així que estan calculades). Si el mètode convergeix $x^{(k+1)}$ és una aproximació d'x millor que $x^{(k)}$ i, per tant, estem usant com a punt de partida a cada iteració una llavor de més qualitat.

S'obtenen en modificar la construcció estàndard dels mètodes iteratius depenent d'un paràmetre:

Mètodes iteratius de sobre-relaxació per a resoldre $Ax = b$

En primer lloc triem una matriu no-singular $N(\alpha)$ on α és un paràmetre que s'anomena *paràmetre de relaxació*.

Seguidament definim $P(\alpha) := N(\alpha) - A$ (o equivalentment $A = N(\alpha) - P(\alpha)$).

Llavors la solució del sistema $Ax = b$ es pot aproximar mitjançant el següent mètode iteratiu:

$$\boxed{x^{(k+1)} = M(\alpha)x^{(k)} + (N(\alpha))^{-1}b, \quad \text{amb} \quad M(\alpha) := (N(\alpha))^{-1}P(\alpha).}$$

Com ja hem vist una condició suficient de convergència és que

$$\|M(\alpha)\| < 1.$$

Per altra banda ens interessa maximitzar la velocitat de convergència $R = -\log(\rho(M(\alpha)))$. Dit d'una altra manera, es tracta d'*escollir* α *tal que* $R = -\log(\rho(M(\alpha)))$ *sigui màxim* (és a dir, $\rho(M(\alpha)) < 1$ *sigui mínim*).

L'elecció del paràmetre de relaxació α no és necessàriament fàcil.

Veiem un cas particular en el que aquest problema es pot resoldre explícitament.

Sigui $A = N - P$ una descomposició estàndard per a obtenir un mètode iteratiu i suposem que $M = N^{-1}P$ té tots els valors propis reals i positius:

$$0 < \lambda_1 \leqslant \lambda_2 \leqslant \cdots \leqslant \lambda_n < 1$$

(la condició $\lambda_n < 1$ ens assegura que $\rho(M) < 1$ i, per tant, que tenim convergència).

El mètode de sobre-relaxació (SOR)

consisteix a prendre $N(\alpha) = (1 + \alpha)N$ i $P(\alpha) = P + \alpha N$ ja que requerim $A = N(\alpha) - P(\alpha)$, amb $\alpha \neq -1$.

Ara cal determinar el valor d'α tal que $\rho(M(\alpha)) < 1$ sigui mínim.

Lema

Els valors propis d'$M(\alpha)$ són

$$\mu_i(\alpha) := \frac{\lambda_i + \alpha}{1 + \alpha}.$$

Demostració

$$\begin{aligned} M(\alpha) &= (N(\alpha))^{-1} P(\alpha) = ((1+\alpha)N)^{-1}(P + \alpha N) \\ &= \frac{1}{1+\alpha} N^{-1}(P + \alpha N) \\ &= \frac{1}{1+\alpha}(M + \alpha \operatorname{Id}). \end{aligned}$$

Els valors propis de $M + \alpha \operatorname{Id}$ són $\lambda_i + \alpha$ i, per tant, els valors propis d'$M(\alpha)$ són són $\frac{\lambda_i+\alpha}{1+\alpha}$. □

El coneixement dels valors propis d'$M(\alpha)$ que ens dóna el lema anterior ens permet formular el següent resultat que caracteritza el valor d'α buscat.

Teorema

Sigui $A = N - P$ tal que $M = N^{-1}P$ té tots els valors propis reals i positius:

$$0 < \lambda_1 \leqslant \lambda_2 \leqslant \cdots \leqslant \lambda_n < 1.$$

Llavors, el mètode SOR donat per $N(\alpha) = (1 + \alpha)N$ i $P(\alpha) = P + \alpha N$ convergeix per $\alpha > -\frac{1+\lambda_1}{2}$.
A més, $\rho(M(\alpha^*)) = \min_\alpha \rho(M(\alpha))$ per $\alpha^* = -\frac{\lambda_1+\lambda_n}{2}$.

Mètodes de sobre-relaxació (cont.)

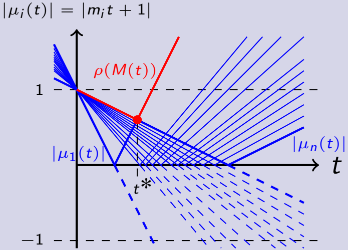
Demostració

Fem un canvi de notació: $t := \frac{1}{1+\alpha} \neq 0$ i $m_i := \lambda_i - 1 \in (-1, 0)$:

$$\mu_i(t) = \frac{\lambda_i - 1 + 1 + \alpha}{1 + \alpha} = (\lambda_i - 1)t + 1 = m_i t + 1.$$

Gràfiques de $|\mu_i(t)| = |m_i t + 1|$

(la part en línia discontínua són les gràfiques de $\mu_i(t) = m_i t + 1$)



Mètodes de sobre-relaxació (cont.)

Demostració (cont.)

Si $t < 0$, $\rho(M(t)) \geqslant \mu_i(t) > 1$ per a tot i (mètode no convergent). Per altra banda, per a cada $t > 0$ tenim

$$\mu_1(t) \leqslant \mu_2(t) \leqslant \cdots \leqslant \mu_n(t) < 1.$$

Per tant, $|\mu_i(t)| \geqslant 1$ amb $t > 0$ és equivalent a $\mu_i(t) < -1$. A més, la primera recta en arribar a -1 és $\mu_1(t)$.

Sigui $\overline{t}$ tal que $\mu_1(\overline{t}) = -1$.

Clarament, $\rho(M(t)) \geqslant |\mu_1(t)| \geqslant 1$ per a tot $t \geqslant \overline{t}$ i $\mu_i(t) \in (-1, 1)$ per a tot i i $t \in (0, \overline{t})$.

Per tant, $\rho(M(t)) < 1$ i el mètode és convergent si i només si $t \in (0, \overline{t})$.

Mètodes de sobre-relaxació (cont.)

Demostració (cont.)

Anem a calcular $\overline{t}$. Tenim $-1 = \mu_1(\overline{t}) = m_1\overline{t} + 1$. Llavors, $\overline{t} = -\frac{2}{m_1}$. Ara,

$$\frac{1}{1+\alpha} = t < \overline{t} = -\frac{2}{\lambda_1 - 1} \Longleftrightarrow$$
$$1+\alpha > -\frac{\lambda_1 - 1}{2} \Longleftrightarrow \alpha > -\frac{1+\lambda_1}{2}.$$

Ara anem a demostrar la segona afirmació del teorema. De la figura tenim

$$\begin{aligned}\rho(M(t)) &= \max_i |\mu_i(t)| = \max\{|\mu_1(t)|, |\mu_n(t)|\} \\ &= \max\{-\mu_1(t), \mu_n(t)\} = \max\{-m_1 t - 1, m_n t + 1\}\end{aligned}$$

i el punt on $\rho(M(t))$ és mínim és el punt t^* tal que $-m_1 t^* - 1 = m_n t^* + 1$.

Demostració (cont.)

Tenim

$$
\begin{aligned}
& -m_1 t^* - 1 = m_n t^* + 1 \iff \\
& \frac{1}{1+\alpha^*} = t^* = -\frac{2}{m_1 + m_n} = -\frac{2}{\lambda_1 + \lambda_n - 2} \iff \\
& \qquad \lambda_1 + \lambda_n - 2 = -2 - 2\alpha^* \iff \\
& \qquad\qquad \alpha^* = -\frac{\lambda_1 + \lambda_n}{2}.
\end{aligned}
$$

$\square$

El mètode de la potència té com a objectiu calcular el *valor propi dominant* d'una matriu i el seu *vector propi dominant* associat.

Definició (valor propi dominant)

Sigui A una matriu $n \times n$ amb valors propis $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$. El valor propi λ_1 s'anomena *valor propi dominant d'A* si $|\lambda_1| > |\lambda_i|$ per $i = 2, 3, \ldots, n$.

El vector propi associat a λ_1 s'anomena *vector propi dominant d'A*.

Observacions a la definició de valor propi dominant

- El valor propi dominant, si existeix, no pot ser complex (en aquest cas hi ha dos valors propis — ell i el seu conjugat — amb el mateix mòdul). Llavors, el valor absolut del valor propi dominant és el radi espectral d'A, $\rho(A)$.
- El valor propi dominant, si existeix, ha de ser simple i, per tant, ha de ser diferent de zero.
- Si λ és el valor propi dominant d'A no pot ser que $-\lambda$ també sigui valor propi d'A.
- A la vista dels comentaris anteriors, òbviament, no tota matriu té un valor propi dominant.

Aplicacions del Mètode de la potència

Encara que el mètode de la potència aproxima a un únic valor propi és molt útil. Per exemple, Google l'utilitza per calcular el *Page Rank* dels documents en el seu motor de cerca i Twitter l'utilitza per a mostrar als usuaris els *Trending Topics*. Per matrius esparses i ben condicionades (com la matriu Web) el mètode de la potència pot arribar a ser més eficient que altres mètodes de càlcul del vector propi dominant.

Per altra banda, com veurem, el *mètode de la potencia desplaçada* i el *mètode la potència inversa desplaçada* permeten calcular altres valors propis apart del dominant o permeten calcular valors propis quan el valor propi dominant no existeix.

El mètode la potència inversa desplaçada és un dels millors mètodes de refinament de parelles valor/vector propi quan en tenim una estimació inicial.

Una classe de matrius "amiga" del mètode de la potència

La classe de les matrius *no-negatives* és molt important ja que apareixen de manera natural a moltes aplicacions.

En aquesta classe, el valor propi dominant sempre existeix i coincideix amb el radi espectral de la matriu.

Aquest cas està caracteritzat pel conegut Teorema de Perron-Frobenius que enunciem a continuació

Definició

Un vector s'anomena *no-negatiu* (respectivament *positiu*) si totes les seves components són reals i no negatives (respectivament positives). Anàlogament, una matriu s'anomena *no-negativa* (respectivament *positiva*) si totes les seves components són reals i no negatives (respectivament positives).

Teorema (Perron-Frobenius)

Sigui A una matriu $n \times n$ no-negativa. Llavors, $\rho(A)$ (el radi espectral d'A) és un valor propi d'A amb vector propi no-negatiu (és a dir, $\rho(A)$ és un valor propi real, no-negatiu i qualsevol altre valor propi d'A té mòdul més petit o igual que $\rho(A)$).

Suposem que A, a més de ser no-negativa, és irreductible. Llavors $\rho(A)$ és un valor propi positiu i simple, i qualsevol altre valor propi d'A té mòdul estrictament més petit $\rho(A)$. El vector propi associat a $\rho(A)$ és positiu i és l'únic vector positiu de la matriu A.

Definició

El valor i vector propi donats pel teorema de Perron-Frobenius s'anomenen, respectivament, *valor propi de Perron-Frobenius* i *vector propi de Perron-Frobenius*.

Definició (Irreductibilitat)

Una matriu A és diu *reductible* si existeix una matriu de permutació P tal que PAP^{-1} és una matriu de blocs de la forma

$$\begin{pmatrix} E & 0 \\ F & G \end{pmatrix},$$

on E i G són matrius quadrades de dimensions que sumen n.

Una matriu és *irreductible* si no és reductible.

Equivalentment, A és *irreductible* si per a cada parell d'índexs i i j, existeix nombre natural $m = m(i,j)$ tal que la component i,j de la matriu A^m, $(A^m)_{i,j}$, és positiva.

Observació (sobre la irreductibilitat)

Hi ha moltes altres definicions interessants d'irreductibilitat, en particular re-interpretant la matriu A en termes de *grafs combinatoris*.

Observació (Les matrius no-negatives son "amigues" del mètode de la potència)

A la vista del Teorema de Perron-Frobenius, el mètode de la potència sembla dissenyat especialment per a calcular valors propis de Perron-Frobenius de matrius irreductibles.

El Mètode de la potència (versió inútil sense escalament)

Consisteix a triar una llavor $x^{(0)}$ i usar la recurrència

$$\boxed{x^{(k+1)} := Ax^{(k)}.}$$

Per entendre com funciona el mètode suposem que la matriu A diagonalitza. Llavors tenim valors propis $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geqslant \cdots \geqslant |\lambda_n|$ amb vectors propis associats $v_1, v_2, \ldots, v_n$, respectivament.

Valors i vectors propis. Mètode de la potència (cont.)

Si escrivim la llavor $x^{(0)} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i v_i$ en la base de vectors propis tenim:

$$\begin{aligned} x^{(k)} &= Ax^{(k-1)} = A^2 x^{(k-2)} = \cdots = A^k x^{(0)} \\ &= A^k \sum_{i=0}^{n} \alpha_i v_i = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i A^k v_i = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \lambda_i^k v_i \\ &= \lambda_1^k \left[\alpha_1 v_1 + \sum_{i=2}^{n} \alpha_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k v_i \right]. \end{aligned}$$

Per altra banda, com que $\left| \frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right| < 1$ per a tot $i > 1$, tenim

$$x^{(k)} \sim \lambda_1^k \alpha_1 v_1 \quad \text{i} \quad \lim_{k \to \infty} \frac{x^{(k)}}{\lambda_1^k} = \alpha_1 v_1.$$

sempre que $\alpha_1 \neq 0$.

Observació

Això ens diu que el procediment no es pot implementar tal com l'hem escrit ja que si $\lambda_1 > 1$, $\lim_{k\to\infty} \left\| x^{(k)} \right\| = \infty$ i obtindrem un `overflow` a l'emmagatzemament de dades.

Per a resoldre aquest problema *és obligatori* escalar els vectors.

El Mètode de la potència amb escalament

Consisteix a triar una llavor $x^{(0)}$ i usar la recurrència

$$\boxed{y^{(k)} := \frac{x^{(k)}}{\left\|x^{(k)}\right\|} \quad \text{i} \quad x^{(k+1)} := Ay^{(k)}.}$$

Llavors,

$$y^{(k)} = \frac{x^{(k)}}{\left\|x^{(k)}\right\|} = \frac{Ay^{(k-1)}}{\left\|x^{(k)}\right\|} = \frac{Ax^{(k-1)}}{\left\|x^{(k)}\right\| \left\|x^{(k-1)}\right\|} = \cdots = \frac{A^k x^{(0)}}{\prod_{j=0}^{k} \left\|x^{(j)}\right\|}.$$

A més, com que $\left\|y^{(k)}\right\| = 1$,

$$\prod_{j=0}^{k} \left\|x^{(j)}\right\| = \left\|A^k x^{(0)}\right\| \quad \text{i} \quad y^{(k)} = \frac{A^k x^{(0)}}{\left\|A^k x^{(0)}\right\|}.$$

Usant els càlculs de la transparència 171/203, com que $\alpha_1 \neq 0$,

$$x^{(k)} = Ay^{(k-1)} = \frac{A^k x^{(0)}}{\left\| A^{k-1} x^{(0)} \right\|}$$

$$= \frac{\lambda_1^k \left[\alpha_1 v_1 + \sum_{i=2}^n \alpha_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k v_i \right]}{\left\| \lambda_1^{k-1} \left[\alpha_1 v_1 + \sum_{i=2}^n \alpha_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^{k-1} v_i \right] \right\|}.$$

Per tant (recordem que, per $x \neq 0$, $\operatorname{signe}(x) = \frac{x}{|x|}$)

$$\lim_{k\to\infty} x^{(k)} = \lambda_1 \beta \frac{v_1}{\|v_1\|} \quad \text{amb} \quad \beta = \operatorname{signe}(\lambda_1)^{k-1} \operatorname{signe}(\alpha_1).$$

És a dir

$x^{(k)}$ aproxima el vector propi associat a λ_1.

Per altra banda, com que $\alpha_1 \neq 0$, si ℓ és tal que $v_{1,\ell} \neq 0$ ⚠ (denotem per $v_{i,\ell}$ la component $\ell-$èssima del vector v_i):

$$\lim_{k\to\infty} \frac{x_\ell^{(k+1)}}{y_\ell^{(k)}} = \lim_{k\to\infty} \frac{\lambda_1^{k+1}\left[\alpha_1 v_{1,\ell} + \sum_{i=2}^n \alpha_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^{k+1} v_{i,\ell}\right]}{\lambda_1^{k}\left[\alpha_1 v_{1,\ell} + \sum_{i=2}^n \alpha_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^{k} v_{i,\ell}\right]}$$

$$= \lambda_1 \lim_{k\to\infty} \frac{\alpha_1 v_{1,\ell} + \sum_{i=2}^n \alpha_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^{k+1} v_{i,\ell}}{\alpha_1 v_{1,\ell} + \sum_{i=2}^n \alpha_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^{k} v_{i,\ell}} = \lambda_1$$

(els termes $\frac{1}{\left\|A^k x^{(0)}\right\|}$ es simplifiquen).

És a dir, $\frac{x_\ell^{(k+1)}}{y_\ell^{(k)}}$ aproxima el valor propi λ_1.

Normalització i el problema de que cal triar ℓ tal que $v_{1,\ell} \neq 0$

Es recomana usar la norma $\|\cdot\|_\infty$ pel següents motius:

- Per a normalitzar un vector es minimitza l'aritmètica i la complexitat.
- El vector $y^{(k)}$ sempre té una component $\ell(k)$ tal que $y_{\ell(k)}^{(k)} = \pm 1$. Llavors el quocient es pot calcular amb la fórmula:
$$\frac{x_{\ell(k)}^{(k+1)}}{y_{\ell(k)}^{(k)}} = \text{signe}\left(y_{\ell(k)}^{(k)}\right) x_{\ell(k)}^{(k+1)},$$
que no necessita aritmètica (es calcula amb un `if aritmètic` i un canvi de signe).
- Quan $x^{(k)}$ sigui prou aprop de $\lambda_1 \beta \frac{v_1}{\|v_1\|}$ la component $\ell(k)$ coincidirà amb alguna de les components d'v_1 de mòdul màxim i, llavors, $v_{1,\ell(k)} \neq 0$ ja que $v_1 \neq 0$. Això assegura si a cada iteració prenem $\ell = \ell(k)$ assimptòticament estem prenent components tals que $v_{1,\ell(k)} \neq 0$.

El Quocient de Rayleigh

Una altra estratègia és usar la norma $\|\cdot\|_2$ per a normalitzar i el Quocient de Rayleigh per a aproximar el valor propi:

$$R_k := \frac{\left(x^{(k+1)}\right)^\top y^{(k)}}{\left(y^{(k)}\right)^\top y^{(k)}} \quad \text{ja que} \quad \lim_{k\to\infty} R_k = \lambda_1.$$

Si normalitzem de manera que $\left\|y^{(k)}\right\|_2 = 1$, tenim $R_k := \left(x^{(k+1)}\right)^\top y^{(k)}$.

Notis, que aquesta és una altra manera de resoldre el problema de la tria de la component ℓ tal que $v_{1,\ell} \neq 0$. A més la velocitat de convergència de la successió $\{R_k\}_k$ a λ_1 és més gran que la de la successió $\left\{\frac{x_\ell^{(k+1)}}{y_\ell^{(k)}}\right\}_k$.

Algorisme (Mètode de la potència amb normalització per la norma $\|\cdot\|_\infty$)

procedure POTENCIA(A, n, τ, λ, v, iconv) ▷ **Entrada:** A, n, τ **Sortida:** λ, v, iconv
  iconv $\leftarrow 0$; ▷ *Inicialització del comptador d'iteracions*
  $\lambda_{\text{old}} \leftarrow \|A\|_\infty + 1$; ▷ *Inicialització. Volem $\lambda_{old} \neq \lambda$ a la primera iteració. Per matrius no-negatives es pot prendre $\lambda_{old} = -1$*
  for $i = 1 \div n$ **do** $v_i \leftarrow 1$; **end for** ▷ *Llavor recomanada per matrius no-negatives*
  for $k = 1 \div$ kMAX **do** ▷ *Control d'iteracions*
    max $\leftarrow -1$; ▷ *Inicialitzem el càlcul de $\|v\|_\infty$*
    for $i = 1 \div n$ **do**
      if $|v_i| >$ max **then** max $\leftarrow |v_i|$; $i_{\max} \leftarrow i$; **end if** ▷ *Calculant $\|v\|_\infty$*
    end for
    for $i = 1 \div n$ **do** $v_i \leftarrow v_i / \max$; **end for** ▷ *Normalitzant v; $v_{i_{max}} = \pm 1$*
    $s \leftarrow (v_{i_{\max}} > 0)$? 1 : -1; ▷ $s = \text{signe}(v_{i_{max}})$
    $v \leftarrow Av$; ▷ *Iteració del mètode de la potència*
    $\lambda \leftarrow sv[i_{\max}]$; ▷ *Quocient per a aproximar el VAP*
    if $|\lambda - \lambda_{\text{old}}| < \tau$ **then return** λ; **end if** ▷ *Parada quan hi ha convergència*
    $\lambda_{\text{old}} \leftarrow \lambda$; ▷ *Memòria; pel control de convergència*
  end for
  iconv $\leftarrow 1$; ▷ *Manca de convergència; la solució no és bona*
end procedure

Exemple

Considerem la matriu

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

que té els següents valors i vectors propis:

valor propi	v_1	v_2	v_3	v_4
5.803886359051	0.483104972356	0.583670417966	0.737110968727	1.0
2.507748705363	-0.196292113952	-0.326480993076	-0.969478187608	1.0
1.392275290272	-1.154746278239	-4.098460314969	2.645481883481	1.0
0.296089645312	-9.132066580165	3.841270890079	1.586885335398	1.0

Exemple (cont.)

Alguns iterats del mètode de la potencia:

$x^{(0)} = y^{(0)}$	$x^{(1)}$	$y^{(1)}$	$x^{(2)}$	$y^{(2)}$	$x^{(3)}$	$y^{(14)}$	$x^{(14)}$	$y^{(50)}$	$x^{(50)}$
1	4	4/7	22/7	22/43	126/43	0.48310718	2.80389711	0.48310497	2.80388635
1	5	5/7	27/7	27/43	153/43	0.58367338	3.38757050	0.58367041	3.38755677
1	6	6/7	34/7	34/43	194/43	0.73711653	4.27813018	0.73711096	4.27810829
1	7	1	43/7	1	255/43	1.0	5.80389711	1.0	5.80388635

Com que $y_4^{(k)} = 1$ per tot k, el quocient

$$\lambda_1 \approx x_4^{(k+1)}/y_4^{(k)} = x_4^{(k+1)}$$

Observem que per $k = 14$ tenim 4 dígits bons i per $k = 50$ els hi tenim tots (de fet en tenim 16 de dígits correctes).

Valors i vectors propis. Mètode de la potència (cont.)

Elecció de la llavor per la qual $\alpha_1 \neq 0$

Observem que $\alpha_1 = 0$ és equivalent a que $x^{(0)}$ pertany a l'hiperplà ortogonal a v_1 ($v_1^\top x^{(0)} = 0$). Això no és problema per dos motius:

- La probabilitat de que un vector agafat a l'atzar pertanyi a un hiperplà determinat és zero. És a dir, aquest és un fet que no veurem mai .
- **D'acord, però, i si l'observació anterior no funciona?:** OK suposem que $\alpha_1 = 0$. La mala notícia és que, com que l'hiperplà ortogonal a v_1 és invariant per productes d'A, la teoria diu que $v_1^\top x^{(k)} = 0$ per a tot k i l'algorisme mai convergirà.

  Malgrat això, la condició $v_1^\top x^{(k)} = 0$ és una condició tancada impossible de mantenir en un context d'aritmètica en punt flotant amb errors d'arrodoniment. Millor dit, gràcies als errors d'arrodoniment (i aquesta serà la única vegada a la vida que els errors d'arrodoniment ens ajudaran) al cap d'uns quants iterats tindrem $v_1^\top x^{(k)} \ncong 0$, que ens posa en les condicions de convergència. És a dir, finalment, l'únic que notarem és que necessitem una mica més d'iterats per a fer el càlcul (veure l'exemple).

Valors i vectors propis. Mètode de la potència (cont.)

Exemple: No importa si $\alpha_1 = 0$

Considerem el mateix exemple que abans però ara agafem com a llavor $x^{(0)} = v_2 + v_3 + v_4$

	$x^{(0)}$	$y^{(0)}$	$x^{(1)}$	$x^{(21)}$	$x^{(51)}$	$x^{(76)}$
	-10.48310497	-1.00000000	-0.45825033	-0.49225992	2.05610875	2.8038863583
	-0.583670417	-0.05567724	-0.51392758	-0.81877012	2.43329785	3.3875567760
	3.262889031	0.31125215	0.16425397	-2.43116033	2.75600067	4.2781082949
	3.0	0.28617475	0.40027393	2.50774007	5.05610875	5.8038863583
$v_1^\top x^{(k)}$	$5.9 \cdot 10^{-18}$		$1.57 \cdot 10^{-18}$	$4.88 \cdot 10^{-10}$	9.5	
$s \cdot x^{(k)}_{\ell(k)}$			0.45825033	2.50774007	5.05610875	5.8038863583

Observem que invertim uns 21 iterats en sortir de la zona $v_1^\top x^{(k)} = 0$ però fins l'iterat 51 el vector v no té prou gran la component del vector propi v_1 per a començar a "tibar" en la direcció v_1.

Les aproximacions $\lambda_1 \approx s \cdot x^{(k)}_{\ell(k)}$ són "penoses" per $k < 50$. Però malgrat tot el mètode convergeix 

Finalment, per $k = 76$, tenim tots (8) dígits correctes.

Ara anem a estudiar la convergència del Mètode de la Potència. Si denotem $\kappa := \frac{\lambda_2}{\lambda_1}$, d'un càlcul fet abans obtenim:

$$\frac{x_\ell^{(k+1)}}{y_\ell^{(k)}} = \lambda_1 \frac{\alpha_1 v_{1,\ell} + \sum_{i=2}^n \alpha_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^{k+1} v_{i,\ell}}{\alpha_1 v_{1,\ell} + \sum_{i=2}^n \alpha_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^{k} v_{i,\ell}} = \lambda_1 \frac{1 + \beta\kappa^{k+1} + \mathcal{O}\left(\kappa^{k+1}\right)}{1 + \beta\kappa^{k} + \mathcal{O}\left(\kappa^{k}\right)}$$

Desenvolupant $\frac{1}{1+y}$ per Taylor amb $y = \beta\kappa^k + \mathcal{O}\left(\kappa^k\right)$

$$= \lambda_1 \left[1 + \beta\kappa^{k+1} + \mathcal{O}\left(\kappa^{k+1}\right)\right]\left[1 + \beta\kappa^{k} + \mathcal{O}\left(\kappa^{k}\right)\right]^{-1}$$

$$= \lambda_1 \left[1 + \beta\kappa^{k+1} + \mathcal{O}\left(\kappa^{k+1}\right)\right]\left[1 - \beta\kappa^{k} + \mathcal{O}\left(\kappa^{k}\right)\right]$$

$$= \lambda_1 \left[1 - \beta\kappa^{k} + \mathcal{O}\left(\kappa^{k}\right)\right].$$

És a dir, la velocitat de convergència del mètode depèn de $\beta\kappa^k$. Com més petit sigui $|\kappa| = \frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|}$ més ràpida serà la convergència.

Exercici (per lliurament suplementari)

Demostreu que la velocitat de convergència de l'algorisme en usar el quocient de Rayleigh és d'ordre $\beta\kappa^{2k}$ (és a dir, és el doble de l'anterior).

Mètode de la potència desplaçada

Sigui A una matriu $n \times n$ amb $\lambda_i;\ v_i\ i = 1, 2, \ldots, n$ parelles de valor i vector propi d'A ($Av_i = \lambda_i v_i$).

El mètode de la potència desplaçada consisteix a prendre $\mu \in \mathbb{R}$ i considerar la matriu $A + \mu\,\mathrm{Id}$, que té les parelles de valor i vector propi $\mu_i = \lambda_i + \mu;\ v_i$. Si es pot prendre μ de manera que algun dels μ_i sigui el valor propi dominant, el mètode de la potència ens permet calcular la parella $\mu_i;\ v_i$. Llavors, $\mu_i - \mu;\ v_i$ és una parella valor/vector propi de la matriu A.

Com que la velocitat de convergència del mètode de la potència depèn positivament de $\frac{\lambda_2}{\lambda_1}$, cal prendre μ de manera que aquesta separació sigui el més gran possible.

Variants del mètode de la potència (cont.)

Aplicacions del mètode de la potència desplaçada

Sigui A una matriu $n \times n$ amb valors propis $|\lambda_1| \geqslant |\lambda_2| \geqslant \cdots \geqslant |\lambda_n|$.

- Suposem que λ_1 és positiu i simple però que hi ha d'altres valors propis amb el mateix mòdul (per exemple $-\lambda_1$ i/o valors propis complexos λ_i tals que $|\lambda_i| = \lambda_1$). En aquest cas no hi ha valor propi dominant però $\mu_1 = \lambda_1 + \mu$ és valor propi dominant de $A + \mu\,\mathrm{Id}$ sempre que prenguem $\mu > 0$. Si prenem μ prou gran podem usar el mètode la potència desplaçada per a calcular μ_1 i el seu vector propi associat i obtenir λ_1 i el el seu vector propi associat.
- Suposem que λ_1 és negatiu i simple però que hi ha d'altres valors propis amb el mateix mòdul. Es pot usar el mateix procediment que abans però amb μ negatiu.

Variants del mètode de la potència (cont.)

Aplicacions del mètode de la potència desplaçada (cont.)

- Suposem que λ_1 és real i que ja l'hem pogut calcular. Els valors propis de la matriu $A - \lambda_1 \operatorname{Id}$ són $0, \lambda_2 - \lambda_1, \lambda_3 - \lambda_1, \dots, \lambda_n - \lambda_1$. Sigui λ_ℓ el valor propi de mòdul més gran entre tots els valors propis que tenen part real de signe contrari a λ_1 i suposem que λ_ℓ és real i simple (és a dir, λ_ℓ és real i simple, $\lambda_\ell\lambda_1 < 0$ i $|\lambda_\ell| \geqslant \{|\lambda_j| \, : \, \Re(\lambda_j)\lambda_1 < 0\}$). Clarament, $\lambda_\ell - \lambda_1$ és el valor propi dominant de $A - \lambda_1 \operatorname{Id}$ i podem usar les tècniques anteriors per a calcular λ_ℓ.

Mètode de la potència inversa desplaçada

Sigui A una matriu $n \times n$ amb λ_i; v_i $i = 1, 2, \ldots, n$ parelles de valor i vector propi d'A ($Av_i = \lambda_i v_i$).

El mètode de la potència inversa desplaçada consisteix a considerar la matriu $(A - \mu \operatorname{Id})^{-1}$ amb $\mu \in \mathbb{R}$, que té les parelles de valor i vector propi $\mu_i = \frac{1}{\lambda_i - \mu}$; v_i.

Si es pot prendre μ de manera que algun dels μ_i sigui el valor propi dominant, el mètode de la potència ens permet calcular la parella μ_i; v_i que dóna una aproximació de la parella $\lambda_i = \mu + \frac{1}{\mu_i}$; v_i.

Mètode de la potència inversa desplaçada: Hem d'invertir la matriu???!!!

El mètode de la potència consisteix a aplicar la recurrència $x^{(k+1)} = Ay^{(k)}$. En el cas de la potència inversa desplaçada, la recurrència és $x^{(k+1)} = (A - \mu\,\mathrm{Id})^{-1}y^{(k)}$, que és equivalent a $(A - \mu\,\mathrm{Id})x^{(k+1)} = y^{(k)}$.

És a dir, una iteració del mètode de la potència inversa desplaçada consisteix a resoldre el sistema d'equacions que té $A - \mu\,\mathrm{Id}$ com a matriu i $y^{(k)}$ com a terme independent.

Aplicacions del mètode de la potència inversa desplaçada

Sigui A una matriu $n \times n$ amb valors propis
$|\lambda_1| \geqslant |\lambda_2| \geqslant \cdots \geqslant |\lambda_n|$.

Suposem que λ_n és real, simple i diferent de zero. La matriu A^{-1} té valors propis $\left|\frac{1}{\lambda_1}\right| \leqslant \left|\frac{1}{\lambda_2}\right| \leqslant \cdots \leqslant \left|\frac{1}{\lambda_n}\right|$ i, prenent, μ adequat (com en el cas del mètode de la potència desplaçada podem aconseguir que $\left|\frac{1}{\lambda_n-\mu}\right| > \left|\frac{1}{\lambda_{n-1}-\mu}\right|$ i, per tant, $\frac{1}{\lambda_n-\mu}$ és el valor propi dominant de la matriu $(A - \mu\,\mathrm{Id})^{-1}$. Això ens dóna un mètode de càlcul de λ_n.

Aplicacions del mètode de la potència inversa desplaçada: Refinament de valors i vectors propis

Suposem que per λ valor propi real i simple i per v vector propi associat a λ tenim $\widetilde{\lambda} \approx \lambda$ i $\widetilde{v} \approx v$ (per exemple calculats amb un altre mètode). Una hipòtesi raonable és que l'aproximació $\widetilde{\lambda} \approx \lambda$ és prou bona perquè $\left|\lambda - \widetilde{\lambda}\right| \ll \left|\lambda_j - \widetilde{\lambda}\right|$ per a tot valor propi $\lambda_j \neq \lambda$.

Amb aquesta hipòtesi $\mu = \frac{1}{\lambda - \widetilde{\lambda}}$ és el valor propi dominant de la matriu $(A - \widetilde{\lambda}\,\mathrm{Id})^{-1}$ amb $\mu \gg \mu_j = \frac{1}{\lambda_j - \widetilde{\lambda}}$ per a tot valor propi $\lambda_j \neq \lambda$. A més el vector propi associat a μ per la matriu $(A - \widetilde{\lambda}\,\mathrm{Id})^{-1}$ és $v \approx \widetilde{v}$. En aquesta situació el mètode de la potència inversa desplaçada aplicat a $(A - \widetilde{\lambda}\,\mathrm{Id})^{-1}$ amb llavor $\widetilde{v}$ convergeix "com una bala" a la parella $\mu; v$. Això ens permet obtenir una molt bona aproximació de la parella $\lambda = \widetilde{\lambda} + \frac{1}{\mu}; v$.

Sigui A una matriu $n \times n$ i siguin $\lambda; v$ una parella de valor i vector propi ($Av = \lambda v$).

Sigui $\sigma \in \mathbb{R}$ i $z \in \mathbb{R}^n$ un vector tal que $z^\top v = 1$. Definim la matriu $n \times n$

$$A^{\mathrm{d}} := A - \sigma v z^\top.$$

Observem que

$$A^{\mathrm{d}} v = Av - \sigma v \left(z^\top v\right) = Av - \sigma v = (\lambda - \sigma) v.$$

És a dir, el valor propi λ d'A amb vector propi v es converteix en el valor propi $\lambda - \sigma$ d'A^{d}, també amb vector propi v.

Per altra banda, si μ; w és una altra parella de valor i vector propi d'A ($Aw = \mu w$), sigui $\widetilde{w} := w - \gamma v$ amb

$$\gamma := \frac{\sigma}{\sigma - (\lambda - \mu)} z^\top w.$$

Llavors,

$$\begin{aligned} A^{\mathrm{d}} \widetilde{w} &= A(w - \gamma v) - \sigma v z^\top (w - \gamma v) \\ &= Aw - \gamma A v - \sigma \left(z^\top w\right) v + \sigma\gamma \left(z^\top v\right) v \\ &= \mu w - \gamma\lambda v - \sigma \left(z^\top w\right) v + \sigma\gamma v \\ &= \mu w - \left(\gamma\lambda + \sigma \left(z^\top w\right) - \sigma\gamma\right) v. \end{aligned}$$

Observem que

$$\sigma\left(\left(z^\top w\right)-\gamma\right)=\sigma\left(1-\frac{\sigma}{\sigma-(\lambda-\mu)}\right)z^\top w$$
$$=-\frac{\sigma(\lambda-\mu)}{\sigma-(\lambda-\mu)}z^\top w=-\gamma(\lambda-\mu).$$

Per tant,

$$A^{\mathrm{d}}\widetilde{w}=\mu w-(\gamma\lambda-\gamma(\lambda-\mu))v=\mu w-\gamma\mu v=\mu\widetilde{w}.$$

És a dir, el valor propi μ d'A amb vector propi w és també valor propi d'A^{d} però amb vector propi $\widetilde{w}:=w-\gamma v$.

Òbviament el cas més interessant de la deflació de Wielandt és quan $\sigma = \lambda$.

A més, la llibertat en la tria de z es pot invertir en una reducció de la dimensió de la matriu.

Sigui $v = (v_1, v_2, \dots, v_n)^\top$ i suposem que j és tal que $v_j \neq 0$. Sigui a el vector format per la fila j de la matriu A. És a dir, $a^\top = e_j^\top A$ on e_j denota el $j-$èssim vector de la base canònica (e_j és el vector que té totes les components zero excepte la component j que és un 1).

Per l'equació característica tenim $a^\top v = e_j^\top Av = \lambda e_j^\top v = \lambda v_j$ i, per tant, $\left(\frac{1}{\lambda v_j} a\right)^\top v = 1$.

Llavors, prenent $\sigma = \lambda$ i $z = \frac{1}{\lambda v_j} a$, obtenim

$$\boxed{A^{\mathrm{d}} := A - \sigma \frac{1}{\lambda v_j} v a^{\top} = A - \frac{1}{v_j} v a^{\top}.}$$

Observem que $A - \frac{1}{v_j} v a^{\top} = (\mathrm{Id} - \frac{1}{v_j} v e_j^{\top}) A$ on $v e_j^{\top}$ és la matriu zero excepte a la columna j, que és el vector v. Per tant, la fila j de $\frac{1}{v_j} v e_j^{\top}$, té totes les components zero excepte la component j (la de la diagonal) que és un 1. Així $\mathrm{Id} - \frac{1}{v_j} v e_j^{\top}$ té la fila j tota de zeros el que implica que $A^{\mathrm{d}} = (\mathrm{Id} - \frac{1}{v_j} v e_j^{\top}) A$ també té la fila j tota de zeros. Per tant, podem esborrar la fila i la columna j d'A^{d} per a obtenir una matriu A^{W} de dimensió $n - 1 \times n - 1$ que té els mateixos valors propis que la matriu A excepte λ.

Reconstrucció dels vectors propis d'A a partir dels d'A^{W}

Observem que si μ és un valor propi d'A^{W} amb vector propi $\overline{w}$, llavors μ és un valor propi de d'A^{d} amb vector propi

$$\widetilde{w} = (\overline{w}_1, \overline{w}_2, \ldots, \overline{w}_{j-1}, 0, \overline{w}_j, \overline{w}_{j+1}, \ldots, \overline{w}_{n-1})$$

on $\overline{w}_i$ denota la component i de $\overline{w}$: $A^{\mathrm{d}}\widetilde{w} = \mu\widetilde{w}$.

Ara denotem

$$\eta := \frac{(\mu - \lambda)v_j}{a^\top \widetilde{w}}.$$

Veurem que , μ és també valor propi de la matriu original A però amb vector propi $w = v + \eta\widetilde{w}$.

Càlcul dels valors propis: Deflació de Wielandt (cont.)

Tenim:

$$\begin{aligned} Aw &= A(v+\eta\widetilde{w}) = Av + \eta A\widetilde{w} \\ &= \lambda v + \eta\left(A^{\mathrm{d}} + \frac{1}{v_j} v a^\top\right)\widetilde{w} \\ &= \lambda v + \eta A^{\mathrm{d}}\widetilde{w} + \frac{(\mu-\lambda)v_j}{a^\top\widetilde{w}}\frac{1}{v_j} v\left(a^\top\widetilde{w}\right) \\ &= \lambda v + \eta\mu\widetilde{w} + (\mu-\lambda)v = \eta\mu\widetilde{w} + \mu v = \mu w. \end{aligned}$$

Observació

Com que els λ i v que s'usen tenen errors, a cada deflació empitjora la qualitat de la matriu A^{W} i, per tant, es va degradant seriosament la qualitat del càlcul (incrementant el nivell d'error) dels successius valors i vectors propis.

Exemple (Deflació de Wielandt)

Considerem l'exemple anterior:

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

amb valors i vectors propis:

valor propi	v_1	v_2	v_3	v_4
5.803886359051	0.483104972356	0.583670417966	0.737110968727	1.0
2.507748705363	-0.196292113952	-0.326480993076	-0.969478187608	1.0
1.392275290272	-1.154746278239	-4.098460314969	2.645481883481	1.0
0.296089645312	-9.132066580165	3.841270890079	1.586885335398	1.0

Per a deflacionar usarem $\lambda = 5.8038863590$ i $v = (0.4831049723, 0.5836704179, 0.7371109687, 1.0)^\top$.

Exemple (Deflació de Wielandt (cont.))

Com que $v_1 \neq 0$ podem prendre $j = 1$. En aquest cas tenim:

$$va^\top = \begin{pmatrix} 0.4831049723 \\ 0.5836704179 \\ 0.7371109687 \\ 1.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 0.4831049723 & 0.4831049723 & 0.4831049723 & 0.4831049723 \\ 0.5836704179 & 0.5836704179 & 0.5836704179 & 0.5836704179 \\ 0.7371109687 & 0.7371109687 & 0.7371109687 & 0.7371109687 \\ 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 \end{pmatrix}$$

i, per tant,

$$A^{\mathrm{d}} = A - \frac{1}{0.483104972356} va^\top =$$

$$\begin{pmatrix} 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ -0.2081647910 & 0.7918352089 & -0.2081647910 & -0.2081647910 \\ -0.5257780625 & -0.5257780625 & 1.4742219374 & -0.5257780625 \\ -1.0699435054 & -1.0699435054 & -1.0699435054 & 1.9300564945 \end{pmatrix}.$$

Exemple (Deflació de Wielandt (cont.))

Llavors,

$$A^{\mathrm{W}} = \begin{pmatrix} 0.7918352089 & -0.2081647910 & -0.2081647910 \\ -0.5257780625 & 1.4742219374 & -0.5257780625 \\ -1.0699435054 & -1.0699435054 & 1.9300564945 \end{pmatrix}.$$

Si apliquem el mètode de la potència a aquesta matriu obtenim la parella valor vector propi

$$\mu = 2.5077487053 \quad \text{i} \quad \overline{w} = (0.1592899388, 1.1947132271, -2.5077487053)^{\top}.$$

Com hem dit abans,

$$\widetilde{w} = (0, 0.1592899388, 1.1947132271, -2.5077487053)^{\top}$$

és el vector propi associat a μ per la matriu A^{d} (es pot comprovar fàcilment fent els productes $A^{\mathrm{d}}\widetilde{w}$ i $\mu\widetilde{w}$).

Exemple (Deflació de Wielandt (cont.))

Finalment,

$$\eta = \frac{(\mu - \lambda)v_j}{a^\top \widetilde{w}} = 1.3801834423$$

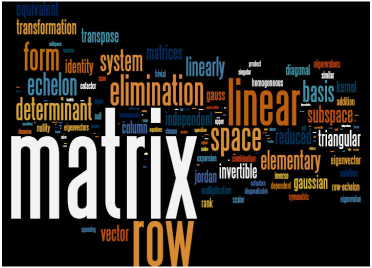
i per tant, μ és valor propi d'A amb vector propi

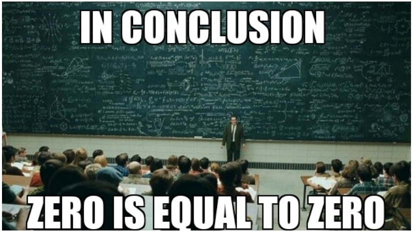
$$v + \eta\widetilde{w} = (0.4831049723, 0.8035197541, 2.3860343831, -2.4611532405)^\top.$$

Per a poder comprovar el resultat normalitzarem el vector anterior dividint-lo per la seva darrera component (-2.4611532405), de manera que la darrera component del vector normalitzat sigui 1. Tenim:

$$(-0.1962921139, -0.3264809930, -0.9694781876, 1.0)^\top,$$

que és consistent amb les dades de la taula original de valors i vectors propis.


equivalent
transformation
transpose
form
identity
system
matrices
linearly
diagonal
eigenvalues
homogeneous
echelon
cofactor
elimination
gauss
linear
basis
kernel
addition
determinant
subspace
nullity
eigenvectors
column
independent
space
reduced
triangular
matrix
expansion
combination
elementary
eigenvector
jordan
invertible
inverse
gaussian
solution
multiplication
dependent
row-echelon
rank
scalar
symmetric
eigenvalue
vector
row


IN CONCLUSION
ZERO IS EQUAL TO ZERO

