

# 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)



## Introducció

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

Introducció 1/9

## Continguts

|  |       |
|--|-------|
| Introducció .....  | ▶ 1   |
| Mètodes directes per sistemes triangulars .....  | ▶ 10  |
| Mètode de Gauss .....  | ▶ 15  |
| Estratègies de pivotatge .....   | ▶ 26  |
| Descomposició LU .....   | ▶ 37  |
| Normes de matrius .....  | ▶ 66  |
| Nomre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals .....                        | ▶ 83  |
| Descomposició QR. Mètode de Householder .....  | ▶ 96  |
| Mètodes iteratius. Jacobi i Gauss-Seidel .....   | ▶ 127 |
| Valors i vectors propis. Mètode de la potència i de la potència inversa desplaçada ..... | ▶ 163 |

## Introducció (cont.)

Pel que fa als sistemes lineals, considerarem sistemes com ara

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

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

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

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*...

Introducció 2/9

## Introducció (cont.)

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

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

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

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

Introducció 3/9

## 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 singulares 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  $\kappa$  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).

Introducció 5/9

## 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 4/9

## Introducció (cont.)

### 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

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

Introducció 6/9

### Exemple (cont.)

Amb aritmètica de 16 díigits (encara que el format d'escriptura és de 8 díigits) 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.

Introducció 7/9

## Introducció (cont.)

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

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

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

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

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

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

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 càcul).

Introducció 9/9

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.

Introducció 8/9

## Mètodes directes per sistemes triangulars

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

Considerem un sistema lineal triangular superior:

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

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

Mètodes directes per sistemes triangulars 1/5

## Mètodes directes per sistemes triangulars (cont.)

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

$$\begin{aligned}x_n &= \frac{b_n}{u_{n,n}}, \\x_{n-1} &= \frac{b_{n-1} - u_{n-1,n}x_n}{u_{n-1,n-1}}, \\&\vdots \\x_2 &= \frac{b_2 - u_{2,3}x_3 - u_{2,4}x_4 - \cdots - u_{2,n}x_n}{u_{2,2}}, \\x_1 &= \frac{b_1 - u_{1,2}x_2 - u_{1,3}x_3 - \cdots - u_{1,n}x_n}{u_{1,1}}.\end{aligned}$$

Aquest procediment es pot formalitzar en el següent:

### Algorisme (substitució endarrere)

```
for i = n ÷ 1 do
    xi ← bi;
    for j = i + 1 ÷ n do
        xi ← xi - ui,jxj;
    end for
    xi ← xi / ui,i;
end for
```

[Mètodes directes per sistemes triangulars 2/5](#)

## Mètodes directes per sistemes triangulars (cont.)

Un sistema lineal triangular inferior és de la forma

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

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.

[Mètodes directes per sistemes triangulars 4/5](#)

## 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

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

[Mètodes directes per sistemes triangulars 3/5](#)

## Mètodes directes per sistemes triangulars (cont.)

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  $a_{1,1}, \dots, a_{n,n} \neq 0$ .

En aquest cas la solució és

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

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

### Algorisme

```
for i = 1 ÷ n do
    xi ←  $\frac{b_i}{a_{i,i}}$ ;
end for
```

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

[Mètodes directes per sistemes triangulars 5/5](#)

## Mètode de Gauss

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  $3 \times 3 Ax = b$ , amb

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

Mètode de Gauss 1/11

## Mètode de Gauss (cont.)

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

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

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 3/11

## Mètode de Gauss (cont.)

El primer pas del mètode de Gauss és

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

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

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*.

Mètode de Gauss 2/11

## Mètode de Gauss (cont.)

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

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

que es pot resoldre mitjançant substitució endarrere.

Mètode de Gauss 4/11

El procediment general el podem formalitzar en el següent

## Algorisme (Mètode de Gauss)

```

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

```

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

$$Ax_1 = b_1, Ax_2 = b_2, \dots, Ax_p = b_p.$$

## Observació

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

# Mètode de Gauss (cont.)

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:

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

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

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

# Mètode de Gauss (cont.)

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

```

## Mètode de Gauss (cont.)

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:

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

Mètode de Gauss 9/11

## Mètode de Gauss (cont.)

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.

Mètode de Gauss 11/11

## Mètode de Gauss (cont.)

- Càlcul del nombre de productes i restes:

$$\begin{aligned}& \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{i=k+1}^n \left( \begin{array}{c} \text{tros de la matriu} \\ \sum_{j=k+1}^n 1 \end{array} + \begin{array}{c} \text{tros del terme independent} \\ \sum_{j=1}^p 1 \end{array} \right) \\ &= \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{i=k+1}^n \underbrace{\left( n - k + p \right)}_{\text{no depèn de } i} = \sum_{k=1}^{n-1} (n-k)(n-k+p) \\ &= \sum_{k=1}^{n-1} (n-k)^2 + \sum_{k=1}^{n-1} (n-k)p = \sum_{j=1}^{n-1} j^2 + p \sum_{j=1}^{n-1} j \\ &= \frac{n}{3}(n-1)\left(n-\frac{1}{2}\right) + p \frac{n(n-1)}{2} \\ &= \frac{2n^3 - (3 - 3p)n^2 + (1 - 3p)n}{6}.\end{aligned}$$

Mètode de Gauss 10/11

## Estratègies de pivotatge

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 té 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

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

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

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

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

Estratègies de pivotatge 2/11

## 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 iracionals coneguts com  $\pi$  o  $e$ , o funcions elementals d'aquests. 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  $2500 \times 2500$  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  $|a_{k,k}^{(k)}|$  es troba per sota certa tolerància, però llavors hi ha el problema de triar la tolerància, que no és trivial.

Estratègies de pivotatge 4/11

### 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'affirmació anterior. □

Estratègies de pivotatge 3/11

## Estratègies de pivotatge (cont.)

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

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

Apliquem el mètode de Gauss:

$$\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0.0001 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{array} \xrightarrow{\begin{array}{l} F_2 \leftarrow F_2 - F_1 \\ F_3 \leftarrow F_3 - F_1 \end{array}} \begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0.0001 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{array} \xrightarrow{F_3 \leftarrow F_3 - 10^4 F_2} \begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0.0001 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -10000 & -10000 \end{array}$$

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

Estratègies de pivotatge 5/11

## Estratègies de pivotatge (cont.)

### Exemple (cont.)

Si ara resolem fent substitució enrere, obtenim:

$$x_3 = -10000/(-10000) = 1,$$

$$x_2 = (1 - x_3)/0.0001 = 0,$$

$$x_1 = 1 - x_3 = 0.$$

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:

$$x_3 = -10001/-10000 = 1.0001,$$

$$x_2 = (1 - x_3)/0.0001 = -1,$$

$$x_1 = 1 - x_3 = -0.0001.$$

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

### Estratègies de pivotatge 6/11

## Estratègies de pivotatge (cont.)

### Algorisme (Mètode de Gauss amb pivotatge maximal per columnes)

```

for k = 1 ÷ n - 1 do max ← |ak,k(k)|; imax ← k;▷ Pas de la matriu A(k) a la matriu A(k+1)
    for i = k + 1 ÷ n do
        if |ai,k(k)| > max then max ← |ai,k(k)|; imax ← i; end if
    end for
    for j = k ÷ n do
        s ← ak,j(k); ak,j(k) ← aimax,j(k); aimax,j(k) ← s;▷ Columna de la matriu
       ▷ Intercanviem les files k i imax
    end for
    for i = k + 1 ÷ n do
        mi,k ←  $\frac{a_{i,k}^{(k)}}{a_{k,k}^{(k)}}$ ;▷ Arreglem la fila i
        for j = k + 1 ÷ n do
            ai,j(k+1) ← ai,j(k) - mi,kak,j(k);▷ Columna de la matriu
           ▷ Arreglem els elements de la fila i columna j
        end for
        for j = 1 ÷ p do
            bi,j(k+1) ← bi,j(k) - mi,kbk,j(k);▷ Columna del terme independent
           ▷ Arreglem la fila i columna j del terme independent
        end for
    end for
end for
end for

```

### Estratègies de pivotatge 8/11

## Estratègies de pivotatge (cont.)

### 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:

$$\left( \begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0.0001 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{array} \right) \xrightarrow{F_2 \leftrightarrow F_3} \left( \begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0.0001 & 1 & 1 \end{array} \right) \xrightarrow{F_3 \leftarrow F_3 - 10^{-4}F_2} \left( \begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 1.000 \end{array} \right)$$

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.

### Estratègies de pivotatge 7/11

## Estratègies de pivotatge (cont.)

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

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

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 9/11

## 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  $|a_{i,j}^{(k)}| > \text{max}$  then max  $\leftarrow |a_{i,j}^{(k)}|$ ;  $i_{\text{max}} \leftarrow i$ ;  $j_{\text{max}} \leftarrow j$ ; end if
  end for ▷ Intercanviem les les files  $k$  i  $i_{\text{max}}$  i les columnes  $k$  i  $j_{\text{max}}$ 
  for  $j = k \div n$  do  $s \leftarrow a_{k,j}^{(k)}$ ;  $a_{k,j}^{(k)} \leftarrow a_{i_{\text{max}},j}^{(k)}$ ;  $a_{i_{\text{max}},j}^{(k)} \leftarrow s$ ; end for
  for  $i = 1 \div n$  do  $s \leftarrow a_{i,k}^{(k)}$ ;  $a_{i,k}^{(k)} \leftarrow a_{i,j_{\text{max}}}^{(k)}$ ;  $a_{i,j_{\text{max}}}^{(k)} \leftarrow s$ ; 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

```

Estratègies de pivotatge 10/11

## Descomposició LU

### 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

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

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

Descomposició LU 1/17

## Estratègies de pivotatge (cont.)

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 els 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 càlcul addicional requerit per la cerca del pivot.

Estratègies de pivotatge 11/11

## Descomposició LU (cont.)

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,

$$Ax_1 = b_1, \quad Ax_2 = b_2, \quad Ax_3 = b_3, \quad \dots,$$

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

## Descomposició LU (cont.)

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

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

Descomposició LU 3/17

## Descomposició LU (cont.)

### 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 5/17

## Descomposició LU (cont.)

### Demostració

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

$$L_1 U_1 = L_2 U_2.$$

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

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

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

$$L_2^{-1} L_1 = U_2 U_1^{-1}. \quad (2)$$

Descomposició LU 4/17

## 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,

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

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).

Descomposició LU 6/17

## Descomposició LU (cont.)

### Demostració (cont.)

El pas  $k$  el podem escriure matricialment com segueix:

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

Descomposició LU 7/17

## Descomposició LU (cont.)

### Demostració (cont.)

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

$$m_k := (0 \ \dots \ 0 \ m_{k+1,k} \ m_{k+2,k} \ \dots \ m_{n,k})^\top$$

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

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

i, per tant,

$$F_k = \text{Id} - m_k e_k^\top.$$

Descomposició LU 9/17

## Descomposició LU (cont.)

### Demostració (cont.)

Iterant la relació anterior, obtenim

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

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.

Descomposició LU 8/17

## Descomposició LU (cont.)

### Demostració (cont.)

Anem a comprovar que

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

En efecte,

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

donat que

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

Descomposició LU 10/17

## Descomposició LU (cont.)

### Demostració (cont.)

Aleshores

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

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

- Agafar  $\text{Id}$  a tots els parèntesis, que només dóna el monomi  $\text{Id}$ .
- Agafar  $\text{Id}$  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  $i < j$ .

Descomposició LU 11/17

## Descomposició LU (cont.)

### Demostració (cont.)

Tots aquests monomis són zero, donat que

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

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

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

tal com volíem veure. □

Descomposició LU 12/17

## Descomposició LU (cont.)

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 obviament no cal guardar) per emmagatzemar els multiplicadors (estalvant memòria).

Això s'anomena *descomposició LU amb reemplaçament*.

Descomposició LU 13/17

## Descomposició LU (cont.)

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

$$\left( \begin{array}{cccccc} a_{1,1}^{(1)} & a_{1,2}^{(1)} & \dots & a_{1,k}^{(1)} & a_{1,k+1}^{(1)} & \dots & a_{1,n}^{(1)} \\ \color{blue}{m_{2,1}} & a_{2,2}^{(2)} & \dots & a_{2,k}^{(2)} & a_{2,k+1}^{(2)} & \dots & a_{2,n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \color{blue}{m_{k,1}} & \color{blue}{m_{k,2}} & \dots & a_{k,k}^{(k)} & a_{k,k+1}^{(k)} & \dots & a_{k,n}^{(k)} \\ \color{blue}{m_{k+1,1}} & \color{blue}{m_{k+1,2}} & \dots & a_{k+1,k}^{(k)} & a_{k+1,k+1}^{(k)} & \dots & a_{k+1,n}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \color{blue}{m_{n,1}} & \color{blue}{m_{n,2}} & \dots & a_{n,k}^{(k)} & a_{n,k+1}^{(k)} & \dots & a_{n,n}^{(k)} \end{array} \right),$$

Descomposició LU 14/17

mentre que, un cop finalitzat el pas  $k$ , tindrem

$$\left( \begin{array}{cccccc} a_{1,1}^{(1)} & a_{1,2}^{(1)} & \dots & a_{1,k}^{(1)} & a_{1,k+1}^{(1)} & \dots & a_{1,n}^{(1)} \\ m_{2,1} & a_{2,2}^{(2)} & \dots & a_{2,k}^{(2)} & a_{2,k+1}^{(2)} & \dots & a_{2,n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ m_{k,1} & m_{k,2} & \dots & a_{k,k}^{(k)} & a_{k,k+1}^{(k)} & \dots & a_{k,n}^{(k)} \\ m_{k+1,1} & m_{k+1,2} & \dots & m_{k+1,k} & a_{k+1,k+1}^{(k+1)} & \dots & a_{k+1,n}^{(k+1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ m_{n,1} & m_{n,2} & \dots & m_{n,k} & a_{n,k+1}^{(k+1)} & \dots & a_{n,n}^{(k+1)} \end{array} \right)$$

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

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

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

### Exercici

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

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

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

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

- Existeixen matrius no-singulares 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.

Algorisme  $LU$  amb pivotatge maximal per columnes 2/12

Esquemàticament, suposem que

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

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,

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} P = \begin{pmatrix} c_2 \\ c_3 \\ c_1 \end{pmatrix}.$$

Algorisme  $LU$  amb pivotatge maximal per columnes 4/12**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:  
 $1 \mapsto 2, 2 \mapsto 3 \text{ i } 3 \mapsto 1$ .

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

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

Algorisme  $LU$  amb pivotatge maximal per columnes 3/12**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

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

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. □

Algorisme  $LU$  amb pivotatge maximal per columnes 5/12

## Algorisme $LU$ amb pivotatge maximal per columnes (cont.)

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

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

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

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

i, per tant, ara hem de resoldre els sistemes

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

Algorisme  $LU$  amb pivotatge maximal per columnes 6/12

## 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  $m_{ij}$  (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  $LU$  amb pivotatge maximal per columnes 8/12

## Algorisme $LU$ amb pivotatge maximal per columnes (cont.)

### Exercici (per lliurament supplementari)

Sigui  $\pi$  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  $b \in R^n$ , descriu en forma algorísmica el càlcul de  $Pb$  permutant les components de  $b$  a partir del vector de permutació  $\pi$ .

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 7/12

## Algorisme $LU$ amb pivotatge maximal per columnes (cont.)

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

```
for i = 1 ÷ n do  $\pi_i \leftarrow i$ ; end for           > Vector  $\pi$  de permutacions de columnes = identitat
for k = 1 ÷ n - 1 do max ← | $a_{k,k}^{(k)}$ |;  $i_{\max} \leftarrow k$ ; > Pas de la matriu  $A^{(k)}$  a la matriu  $A^{(k+1)}$ 
    for i = k + 1 ÷ n do                         > Buscant el pivot maximal a la columna k
        if | $a_{i,k}^{(k)}$ | > max then max ← | $a_{i,k}^{(k)}$ |;  $i_{\max} \leftarrow i$ ; 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  $\pi_k$  per la fila  $\pi_{i_{\max}}$ 
    for j = 1 ÷ 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 ÷ 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 ÷ n do
             $a_{i,j} \leftarrow a_{i,j} - a_{i,k}a_{k,j}$ ;           > Columna de la matriu
        end for
    end for
end for                                         > Arreglem els elements de la fila i columna j
```

Algorisme  $LU$  amb pivotatge maximal per columnes 9/12

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  $\pi = (1, 2, 3)$ .

Algorisme  $LU$  amb pivotatge maximal per columnes 10/12

### Exemple (cont.)

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

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

Comproveu que, efectivament,  $PA = LU$ .

Algorisme  $LU$  amb pivotatge maximal per columnes 12/12

### Exemple (cont.)

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

Algorisme  $LU$  amb pivotatge maximal per columnes 11/12

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

### Norma de vectors

És tota funció  $\|\cdot\| : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^+$  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:**  $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ .

### Norma de matrius

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

- ④ **Submultiplicativitat:**  $\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$ .

Normes de matrius 1/10

## Normes de matrius (cont.)

### Definició

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

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

### 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 2/10

## Normes de matrius (cont.)

### Lema

Tota norma de matrius subordinada és compatible.

### Demostració

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

$$\|A\| = \sup_{y \neq 0} \frac{\|Ay\|}{\|y\|} \geq \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \iff \|x\| \|A\| \geq \|Ax\|.$$



### Lema

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

### Demostració

$$\|\text{Id}\| = \max_{\|x\|=1} \|\text{Id}x\| = \max_{\|x\|=1} \|x\| = 1.$$



Normes de matrius 4/10

## Normes de matrius (cont.)

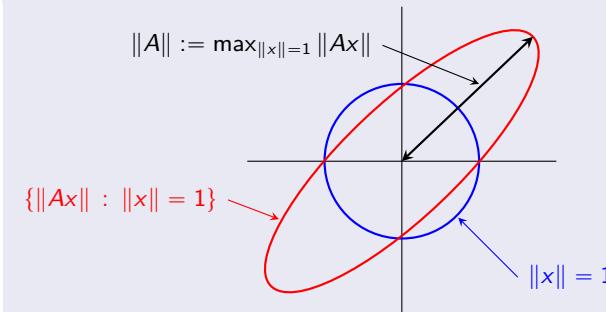
### Definició

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.

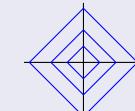
Normes de matrius 3/10

## Normes de matrius (cont.)

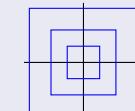
### Exemples de normes de vectors i matrius subordinades

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

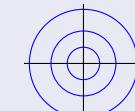
$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$$



$$\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$$



$$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^\top A)}$$



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

Normes de matrius 5/10

## Normes de matrius (cont.)

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

Observem que  $(A^\top A)^\top = A^\top A^{\top\top} = A^\top A$ . 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  $(A^\top A) v_i = \lambda_i v_i$  i  $v_i^\top v_j = \delta_{ij}$  per a tot  $i, j = 1, 2, \dots, n$ . A més

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

Per tant,  $\lambda_i \leq \rho(A^\top A)$  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:

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

Normes de matrius 6/10

## Normes de matrius (cont.)

### 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.

Normes de matrius 8/10

## Normes de matrius (cont.)

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

Tenim,

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

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

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

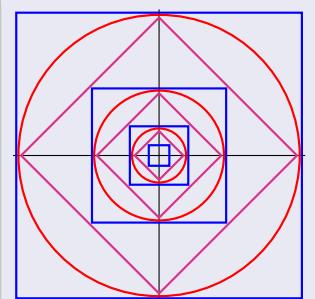
Normes de matrius 7/10

## Normes de matrius (cont.)

### 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  $\ell$  i  $L$  tals que per a tota matriu  $M$ :
$$\ell \|M\| \leq \|M\| \leq L \|M\|.$$
En particular, dues normes de matrius són equivalents
- ③ Per a qualsevol norma de matrius subordinada  $\|\cdot\|$  i per tota matriu  $M$  es té:
$$\rho(M) \leq \|M\|.$$
- ④ Donada una matriu  $M$  i donat  $\varepsilon > 0$  existeix una norma de matrius  $\|\cdot\|_{M,\varepsilon}$  tal que  $\rho(M) \leq \|M\|_{M,\varepsilon} \leq \rho(M) + \varepsilon.$

### Normes equivalents



Normes de matrius 9/10

## Normes de matrius (cont.)

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

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

$$\|M\| \geq \|Mv\| = \|\lambda v\| = |\lambda| \|v\| = |\lambda|.$$

Per tant,

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



### Exercici (per lliurament supplementari)

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

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

Normes de matrius 10/10

## Matrius Convergents (cont.)

### Demostració (cont.)

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

$$\ell \|M^k\| \leq \|M^k\|_{\infty} \leq L \|M^k\|.$$

Per tant, per tot  $i, j$ ,

$$\begin{aligned} 0 &= \lim_{k \rightarrow \infty} \|M^k\| = \lim_{k \rightarrow \infty} \|M^k\|_{\infty} = \lim_{k \rightarrow \infty} \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |m_{ij}^{(k)}| \\ &\geq \lim_{k \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^n |m_{ij}^{(k)}| \geq \lim_{k \rightarrow \infty} |m_{ij}^{(k)}| \geq 0 \end{aligned}$$

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

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

Matrius Convergents 2/7

## Matrius Convergents

### Definició

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

### Teorema (de caracterització de les matrius convergents)

Les afirmacions següents son equivalents:

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

### Demostració

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

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

Matrius Convergents 1/7

## Matrius Convergents (cont.)

### Demostració (cont.)

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

$$\ell \|M\| \leq \|M\| \leq L \|M\|$$

podem suposar que existeix una norma subordinada  $\|\cdot\|$  tal que  $\lim_{k \rightarrow \infty} \|M^k\| = 0$ . 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  $k$ ,

$$0 \leq \rho(M)^k = \rho(M^k) \leq \|M^k\|.$$

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

(3)  $\Rightarrow$  (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,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|M^k\| \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \|M\|^k = 0.$$



Matrius Convergents 3/7

## Matrius Convergents (cont.)

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

Matrius Convergents 4/7

## Matrius Convergents (cont.)

### Corol·lari

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

$$\frac{1}{1 + \|M\|} \leq \|(\text{Id} - M)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|M\|}.$$

### Demostració

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

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

$$\begin{aligned} 1 &= \|\text{Id}\| = \|(\text{Id} - M)(\text{Id} - M)^{-1}\| \leq \|\text{Id} - M\| \cdot \|(\text{Id} - M)^{-1}\| \\ &\leq (\|\text{Id}\| + \|M\|) \|(\text{Id} - M)^{-1}\| = (1 + \|M\|) \|(\text{Id} - M)^{-1}\|. \end{aligned}$$

Això demostra la primera desigualtat del corol·lari.

Matrius Convergents 6/7

## Matrius Convergents (cont.)

### Demostració

**(1):** Si  $\text{Id} + M + M^2 + \dots + M^k + \dots$  és convergent, llavors  $\lim_{k \rightarrow \infty} \|M^k\| = 0$  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:

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

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

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



Matrius Convergents 5/7

## Matrius Convergents (cont.)

### Demostració (cont.)

Ara anem a demostrar la segona desigualtat. Tenim:  
 $\text{Id} = (\text{Id} - M)^{-1}(\text{Id} - M) = (\text{Id} - M)^{-1} - (\text{Id} - M)^{-1}M$ .

Per tant,  $(\text{Id} - M)^{-1} = \text{Id} + (\text{Id} - M)^{-1}M$ . Llavors,

$$\|(\text{Id} - M)^{-1}\| \leq 1 + \|(\text{Id} - M)^{-1}\| \cdot \|M\|.$$

En conseqüència,

$$1 \geq \|(\text{Id} - M)^{-1}\| - \|(\text{Id} - M)^{-1}\| \cdot \|M\| = \|(\text{Id} - M)^{-1}\| (1 - \|M\|),$$

que demostra la segona desigualtat.



Matrius Convergents 7/7

## 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  $\delta x$  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 següent teorema afita aquest error.

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals 1/13

## 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  $\|\Delta A\| \leq \frac{1}{\|A^{-1}\|}$  és raonable i fixa la mida màxima dels errors permesos a la matriu  $A$ . Per altra banda, aquesta hipòtesi implica

$$\|A^{-1}(\Delta A)\| \leq \|A^{-1}\| \cdot \|\Delta A\| < 1$$

o, equivalentment,  $1 - \|A^{-1}\| \cdot \|\Delta A\| > 0$ .

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

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals 3/13

## 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  $\|\Delta A\| \leq \frac{1}{\|A^{-1}\|}$ . Llavors,

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

### Definició

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

Observem que, per la submultiplicativitat,

$$\text{cond}(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\| \geq \|AA^{-1}\| = \|\text{Id}\| = 1$$

sempre que usen una norma subordinada.

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals 2/13

## 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:

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

$$\delta x + A^{-1}(\Delta A)(\delta x) = A^{-1}(\delta b) - A^{-1}(\Delta A)x \iff$$

$$(\text{Id} + A^{-1}(\Delta A))(\delta x) = A^{-1}(\delta b - (\Delta A)x).$$

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

$$\delta x = (\text{Id} + A^{-1}(\Delta A))^{-1} A^{-1}(\delta b - (\Delta A)x).$$

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals 4/13

## 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,

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

que és equivalent a

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

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals 5/13

## 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  $\text{cond}(A) \geq \rho(A)\rho(A^{-1})$ .
- ② Sigui  $c \in \mathbb{R}^n$  i sigui  $z$  la solució del sistema  $Az = c$ . Llavors,

$$\|A^{-1}\| \geq \frac{\|z\|}{\|c\|}.$$

- ③ (Gastinel)

$$\frac{1}{\|A^{-1}\|} = \min\{\|B - A\| : B \text{ és una matriu singular}\},$$

que és equivalent a

$$\frac{1}{\text{cond}(A)} = \min \left\{ \frac{\|A - B\|}{\|A\|} : B \text{ és una matriu singular} \right\}.$$

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals 7/13

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

### Demostració (cont.)

Com que la norma és subordinada i per tant consistent,

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

Per tant, la darrera desigualtat dona

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

que és el que volíem demostrar. □

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals 6/13

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

### 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:

$$\|z\| = \|A^{-1}c\| \leq \|A^{-1}\| \|c\|.$$

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

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals 8/13

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

### Demostració (cont.)

Per la submultiplicativitat de les normes de matrius,  $\|A^{-1}P\| \leq \|A^{-1}\| \cdot \|P\| < 1$  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  $\text{Id} + A^{-1}P$  és no-singular. Llavors, com que  $A$  és no-singular,  $A + P = A(\text{Id} + A^{-1}P)$  és no-singular. Equivalentment,  $A + P$  singular implica  $\|P\| \geq \frac{1}{\|A^{-1}\|}$  i, per tant,

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

Ara demostrarem la igualtat a la fórmula anterior.

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals 9/13

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

### 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.

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals 11/13

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

### 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  $\|A^{-1}\| = \frac{\|x\|}{\|y\|}$  (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  $\bar{P}$  tal que  $\bar{P}x = -y$  i  $\|\bar{P}\| = \frac{\|y\|}{\|x\|}$ .

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

$$\frac{1}{\|A^{-1}\|} = \frac{\|y\|}{\|x\|} = \|\bar{P}\| = \|\bar{B} - A\|$$

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

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals 10/13

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

### 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,

$$\frac{1}{\text{cond}(A)_\infty} \leq 0.01 \iff \text{cond}(A)_\infty \geq 100.$$

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

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals 12/13

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

### Exemple (cont.)

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

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

Per altra banda,

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

que és compatible amb la fita anterior.

Nombre de condició i Fórmula de l'error per sistemes lineals 13/13

## Descomposició QR (cont.)

El següent 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 2/3

## 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

$$Q^\top Q = QQ^\top = \text{Id}.$$

### 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  $Rx = Q^\top b$  amb terme independent  $Q^\top b$ , que és fàcil de calcular.

Descomposició QR 1/3

## Descomposició QR (cont.)

### Demostració (del lema sobre matrius ortogonals)

(1): Per les propietats del determinant tenim:

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

(2):

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

Això dóna

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



Descomposició QR 3/3

## 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**.

Aplicacions de la descomposició QR: Sistemes lineals sobredeterminats i el model lineal 1/8

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

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

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

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

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

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  $i = 1, 2, \dots, m$  tenim:

$$\begin{aligned} \beta_1 x_1^{(i)} + \beta_2 x_2^{(i)} + \dots + \beta_{n-1} x_{n-1}^{(i)} + \beta_n y^{(i)} &= b \iff \\ \alpha_0 + \alpha_1 x_1^{(i)} + \alpha_2 x_2^{(i)} + \dots + \alpha_{n-1} x_{n-1}^{(i)} &= y^{(i)} \end{aligned}$$

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

Aplicacions de la descomposició QR: Sistemes lineals sobredeterminats i el model lineal 3/8

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

Com que  $m > n$ , podem escriure

$$R = \begin{pmatrix} R_u \\ 0_{m-n \times n} \end{pmatrix} \quad i \quad Q = (Q_\ell \quad Q_r),$$

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  $m-n \times n$ ,  $Q_\ell$  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,

$$A = QR = (Q_\ell \quad Q_r) \begin{pmatrix} R_u \\ 0_{m-n \times n} \end{pmatrix} = Q_\ell R_u.$$

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

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

$$\text{Id} = Q^\top Q = \begin{pmatrix} Q_\ell^\top \\ Q_r^\top \end{pmatrix} (Q_\ell \quad Q_r) = \begin{pmatrix} Q_\ell^\top Q_\ell & Q_\ell^\top Q_r \\ Q_r^\top Q_\ell & Q_r^\top Q_r \end{pmatrix}$$

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

Aplicacions de la descomposició QR: Sistemes lineals sobredeterminats i el model lineal 2/8

## 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:

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

i suposearem que  $A$  té rang (màxim)  $n$ .

Aplicacions de la descomposició QR: Sistemes lineals sobredeterminats i el model lineal 4/8

## 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<sup>(i)</sup> en funció dels punts  $(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_{n-1}^{(i)})$* .

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

Aplicacions de la descomposició QR: Sistemes lineals sobredeterminats i el model lineal 5/8

## 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,

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

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

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

Aplicacions de la descomposició QR: Sistemes lineals sobredeterminats i el model lineal 7/8

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

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

Denotem  $A = (a_{i,j})$ ,  $b = (b_1, b_2, \dots, b_m)$  i  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ . 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 6/8

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

Ara usarem la descomposició QR econòmica d' $A$ :  $A = Q_\ell R_u$  amb  $Q_\ell$   $m \times n$  ortogonal ( $Q_\ell^\top Q_\ell = \text{Id}$ ) 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:

$$\begin{aligned} (Q_\ell R_u)^\top (Q_\ell R_u) \vec{\alpha} &= (Q_\ell R_u)^\top b \\ \iff R_u^\top Q_\ell^\top Q_\ell R_u \vec{\alpha} &= R_u^\top Q_\ell^\top b \\ \iff R_u^\top R_u \vec{\alpha} &= R_u^\top Q_\ell^\top b \end{aligned}$$

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

$$R_u \vec{\alpha} = Q_\ell^\top b.$$

Aplicacions de la descomposició QR: Sistemes lineals sobredeterminats i el model lineal 8/8

## Definició

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

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

## Observació

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

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

és una matriu simètrica  $n \times n$ .

Matrius de Householder per a la descomposició QR 1/6

# Matrius de Householder per a la descomposició QR (cont.)

## Interpretació geomètrica de les matrius de Householder

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

- $P(u)u = -u$ :  $P(u)u = u - \frac{2u^\top u}{u^\top u}u = u - 2u = -u$ .
- $P(u)w = w$  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  $w_1, w_2, \dots, w_{n-1}$  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

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

Matrius de Householder per a la descomposició QR 3/6

## Proposició (Propietats de les matrius de Householder)

- No varien per escalars:**  $P(cu) = P(u)$
- $P(u)$  és simètrica**
- Són involucions:**  $P(u)^{-1} = P(u)$
- $P(u)w = w - \tau (u^\top w) u$ .**
- Sigui  $a \in \mathbb{R}^n$  i  $s = \pm \|a\|_2$ . Llavors:  $P(a - se_1)a = se_1$ , on  $e_1 = (1 \ 0 \ \cdots \ 0)^\top$  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  $s = -\text{signe}(a_1) \|a\|_2$  resulta que  $a_1$  i  $-s$  tenen el mateix signe i no tenim cancel·lacions al calcular  $a_1 - s$ .

Matrius de Householder per a la descomposició QR 2/6

# Matrius de Householder per a la descomposició QR (cont.)

## Demostració

(1):

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

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

(3):

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

Matrius de Householder per a la descomposició QR 4/6

## Demostració (cont.)

(4):

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

(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  $a = (a_1, a_2, \dots, a_n)^\top$ ,  $a^\top e_1 = e_1^\top a = a_1$ . Llavors,

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

□

Matrius de Householder per a la descomposició QR 5/6

## Descomposició QR; Mètode de Householder

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:

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

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

$$QR = Q_1^\top Q_2^\top \cdots Q_n^\top Q_n \cdots Q_2 Q_1 A = A$$

Descomposició QR; Mètode de Householder 1/14

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

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

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

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

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

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

Matrius de Householder per a la descomposició QR 6/6

## 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):

$$\left( \begin{array}{c|c} Q_k & A^{(k-1)} \\ \hline \text{Id}_{k-1,k-1} & \text{Id}_{k-1,k-1} \\ \hline 0_{m-k+1,k-1} & P(u^{(k)}) \end{array} \right) \left( \begin{array}{cccccc} s_1 & a_{1,2}^{(1)} & \dots & a_{1,k}^{(1)} & \dots & a_{1,n}^{(1)} \\ s_2 & \dots & a_{2,k}^{(2)} & \dots & a_{2,n}^{(2)} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{k,k}^{(k-1)} & \dots & a_{k,n}^{(k-1)} \\ a_{k+1,k}^{(k-1)} & \dots & a_{k+1,n}^{(k-1)} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m,k}^{(k-1)} & \dots & a_{m,n}^{(k-1)} \end{array} \right) = \left( \begin{array}{cccccc} s_1 & a_{1,2}^{(1)} & \dots & a_{1,k}^{(1)} & \dots & a_{1,n}^{(1)} \\ s_2 & \dots & a_{2,k}^{(2)} & \dots & a_{2,n}^{(2)} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ s_k & \dots & a_{k,n}^{(k)} \\ 0 & \dots & a_{k+1,n}^{(k)} \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & a_{m,n}^{(k)} \end{array} \right) B^{(k-1)} B^{(k)}$$

on  $a^{(k)} := (a_{k,k}^{(k-1)}, a_{k+1,k}^{(k-1)}, \dots, a_{m,k}^{(k-1)})^\top$ ,  $s_k = -\text{signe}(a_{k,k}^{(k-1)}) \|a^{(k)}\|_2$  i

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

Descomposició QR; Mètode de Householder 2/14

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

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

- **Invariància de la matriu fora del bloc  $B^{(k-1)}$ :** El fet que  $Q_k$  tingui  $\text{Id}_{k-1,k-1}$  com a bloc superior esquerre i que els blocs superior dret i inferior esquerre siguin 0 assegura que les files i columnes  $1, 2, \dots, k-1$  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:**  $B^{(k)} := P(\mathbf{u}^{(k)})B^{(k-1)}$ .

Descomposició QR; Mètode de Householder 3/14

- **Càlcul de la resta de columnes de  $B^{(k)}$  ( $P(\mathbf{u}^{(k)})\mathbf{a}_j^{(k)}$ ):**

Per l'apartat (4) de la proposició anterior,

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

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

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

Descomposició QR; Mètode de Householder 5/14

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

$$\begin{aligned} B^{(k-1)} &= \left( [\mathbf{a}^{(k)}] [\mathbf{a}_{k+1}^{(k)}] \cdots [\mathbf{a}_n^{(k)}] \right) \text{ i} \\ B^{(k)} &= \left( [P(\mathbf{u}^{(k)})\mathbf{a}^{(k)}] [P(\mathbf{u}^{(k)})\mathbf{a}_{k+1}^{(k)}] \cdots [P(\mathbf{u}^{(k)})\mathbf{a}_n^{(k)}] \right), \end{aligned}$$

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

- **L'operació  $B^{(k)} = P(\mathbf{u}^{(k)})B^{(k-1)}$  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,

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

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

Descomposició QR; Mètode de Householder 4/14

### 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  $\mathbf{u}^{(k)}$  excloent la primera component que és un 1. És a dir:

$$\mathbf{u}^{(k)} = (1, a_{k+1,k}, \dots, a_{m,k})^\top.$$

- a la part triangular superior (incloent la diagonal) conté la matriu  $R$ .

- $\tau$  és un vector de dimensió  $n$  de sortida que conté els multiplicadors  $(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n)$ .

- 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; Mètode de Householder 6/14

## Descomposició QR; Mètode de Householder (cont.)

### Descomposició QR amb reemplaçament — Mètode de Householder

```

for  $k = 1 \div n$  do
     $sk \leftarrow 0$ ; for  $i = k \div m$  do  $sk \leftarrow sk + a_{i,k}^2$ ; end for            $\triangleright \|\mathbf{a}^{(k)}\|_2^2$ 
    if  $sk < tol$  then sing  $\leftarrow 1$ ; return; end if           $\triangleright$  Detecció de matriu singular
     $sk \leftarrow \sqrt{sk}$ ; if  $a_{k,k} > 0$  then  $sk \leftarrow -sk$ ; end if           $\triangleright$  Càlcul d'sk
     $\tau_k \leftarrow a_{k,k} - sk$ ;            $\triangleright$  Usem  $\tau_k$  com a variable auxiliar per emmagatzemar  $a_{k,k} - sk$ 
    for  $i = k + 1 \div m$  do  $a_{i,k} \leftarrow \frac{a_{i,k}}{\tau_k}$ ; end for           $\triangleright$  Normalització del vector  $\mathbf{u}^{(k)}$ 
     $\tau_k \leftarrow -\frac{\tau_k}{sk}$ ;            $\triangleright$  Càlcul del multiplicador  $\tau_k = \frac{s_k - a_{k,k}}{s_k}$ 
     $a_{k,k} \leftarrow sk$ ;            $\triangleright$  Diagonal: hi emmagatzemem sk
    for  $j = k + 1 \div n$  do
         $\beta \leftarrow a_{k,j}$ ;            $\triangleright$  Arreglem la columna j
        for  $i = k + 1 \div m$  do  $\beta \leftarrow \beta + a_{i,k}a_{i,j}$ ; end for           $\triangleright \beta := (\mathbf{u}^{(k)})^\top \mathbf{a}_j^{(k)}$ 
         $\beta \leftarrow \beta\tau_k$ ;            $\triangleright \beta := \tau_k ((\mathbf{u}^{(k)})^\top \mathbf{a}_j^{(k)})$ 
         $a_{k,j} \leftarrow a_{k,j} - \beta$ ;            $\triangleright$  Primera component de  $P(\mathbf{u}^{(k)})\mathbf{a}_j^{(k)} = \mathbf{a}_j^{(k)} - \beta\mathbf{u}^{(k)}$ ;  $(\mathbf{u}^{(k)})_1 = 1$ 
        for  $i = k + 1 \div m$  do
             $a_{i,j} \leftarrow a_{i,j} - \beta a_{i,k}$ ;            $\triangleright$  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
end for; sing  $\leftarrow 0$ ; return;

```

Descomposició QR; Mètode de Householder 7/14

## Descomposició QR; Mètode de Householder (cont.)

### 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 anular sota  $a_{n,n}$ :

### Algorisme (Cas de matrius quadrades)

```

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

```

Descomposició QR; Mètode de Householder 9/14

## Descomposició QR; Mètode de Householder (cont.)

### 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  $\mathbf{b}^{(k)} := Q_k \mathbf{b}^{(k-1)} = \left( \mathbf{b}_{1 \dots k-1}^{(k-1)} P(\mathbf{u}^{(k)}) \mathbf{b}_{k \dots m}^{(k-1)} \right)$ , amb

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

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            $\triangleright$  Càlcul de  $\mathbf{b}^{(k)} := Q_k \mathbf{b}^{(k-1)}$ 
     $\beta \leftarrow b_k$ ;            $\triangleright$  Inicialització de  $\beta := (\mathbf{u}^{(k)})^\top \mathbf{b}_{k \dots m}^{(k-1)}$ . Recordem que  $(\mathbf{u}^{(k)})_1 = 1$ 
    for  $i = k + 1 \div m$  do  $\beta \leftarrow \beta + a_{i,k}b_i$ ; end for           $\triangleright \beta := (\mathbf{u}^{(k)})^\top \mathbf{b}_{k \dots m}^{(k-1)}$ 
     $\beta \leftarrow \beta\tau_k$ ;            $\triangleright \beta := \tau_k ((\mathbf{u}^{(k)})^\top \mathbf{b}_{k \dots m}^{(k-1)})$ 
     $b_k \leftarrow b_k - \beta$ ;            $\triangleright$  Inici de  $P(\mathbf{u}^{(k)})\mathbf{b}_{k \dots m}^{(k-1)} = \mathbf{b}_{k \dots m}^{(k-1)} - \beta\mathbf{u}^{(k)}$ ;  $(\mathbf{u}^{(k)})_1 = 1$ 
    for  $i = k + 1 \div m$  do
         $b_i \leftarrow b_i - \beta a_{i,k}$ ;            $\triangleright$  Les altres components de  $P(\mathbf{u}^{(k)})\mathbf{b}_{k \dots m}^{(k-1)} = \mathbf{b}_{k \dots m}^{(k-1)} - \beta\mathbf{u}^{(k)}$ 
    end for
end for

```

Descomposició QR; Mètode de Householder 8/14

## Descomposició QR; Mètode de Householder (cont.)

### 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.

Descomposició QR; Mètode de Householder 10/14

## 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<sup>(0)</sup> a A<sup>(1)</sup>. Prenem  $\mathbf{a}^{(1)} = (12, 6, -4)^T$ .

Llavors tenim  $s_1 = -\text{signe}(12) \|\mathbf{a}^{(1)}\|_2 = -14$ ,

$$\mathbf{u}^{(1)} = \frac{1}{12+14} (\mathbf{a}^{(1)} + 14\mathbf{e}_1) = (1, \frac{3}{13}, -\frac{2}{13})^T \text{ i } \tau_1 = \frac{s_1 - \mathbf{a}_1^{(1)}}{s_1} = \frac{-14 - 12}{-14} = \frac{13}{7}.$$

Encara que no fa falta calculem la matriu

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

Descomposició QR; Mètode de Householder 11/14

## Exemple (cont.)

Ara anem a fer la següent iteració. Tenim,

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

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

Llavors,

$$Q_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{323}{325} & -\frac{36}{325} \\ 0 & -\frac{36}{325} & -\frac{323}{325} \end{pmatrix}, \quad R = A^{(2)} = Q_2 A^{(1)} = \begin{pmatrix} -14 & -21 & 14 \\ \frac{3}{13} & -175 & 70 \\ -\frac{2}{13} & \frac{1}{18} & -35 \end{pmatrix} \text{ i } \tau = \left( \frac{13}{7}, \frac{648}{325}, \cdot \right).$$

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

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

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

Descomposició QR; Mètode de Householder 13/14

## Exemple (cont.)

Observem que

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

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

$$\begin{aligned} \tau_1 (\mathbf{u}^{(1)})^T \mathbf{a}_2^{(1)} &= \frac{13}{7} (\mathbf{u}^{(1)})^T (-51, 167, 24)^T = -\frac{13}{7} \frac{210}{13} = -30; \\ P(\mathbf{u}^{(1)}) \mathbf{a}_2^{(1)} &= \mathbf{a}_2^{(1)} + 30\mathbf{u}^{(1)} = (-21, 167 + \frac{90}{13}, 24 - \frac{60}{13})^T; \\ \tau_1 (\mathbf{u}^{(1)})^T \mathbf{a}_3^{(1)} &= \frac{13}{7} (\mathbf{u}^{(1)})^T (4, -68, -41)^T = -\frac{13}{7} \frac{70}{13} = -10; \\ P(\mathbf{u}^{(1)}) \mathbf{a}_3^{(1)} &= \mathbf{a}_3^{(1)} + 10\mathbf{u}^{(1)} = (14, -68 + \frac{30}{13}, -41 - \frac{20}{13})^T. \end{aligned}$$

Descomposició QR; Mètode de Householder 12/14

## Exemple (cont.)

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

$$\tau_1 (\mathbf{u}^{(1)})^T \mathbf{b}^{(0)} = \frac{13}{7} (1, \frac{3}{13}, -\frac{2}{13})(1, 2, 3)^T = \frac{13}{7};$$

$$\begin{aligned} \mathbf{b}^{(1)} &= P(\mathbf{u}^{(1)}) \mathbf{b}^{(0)} = \mathbf{b}^{(0)} - \frac{13}{7} \mathbf{u}^{(1)} = (1 - \frac{13}{7}, 2 - \frac{13}{7} \frac{3}{13}, 3 + \frac{13}{7} \frac{2}{13})^T \\ &= (-\frac{6}{7}, \frac{11}{7}, \frac{23}{7})^T; \end{aligned}$$

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

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

Per tant,  
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  $x_1 = \frac{23}{2450}, \quad x_2 = -\frac{149}{6125}, \quad x_3 = -\frac{541}{6125}$ .

Descomposició QR; Mètode de Householder 14/14

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  $Ax = b$  queda

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

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**  $M := N^{-1}P$ .

Mètodes iteratius 1/4

# Mètodes iteratius (cont.)

## Demostració (del Teorema)

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

Tenim:

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

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

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

Per tant, mètode és convergent si i només si  $M$  és convergent.  $\square$

Mètodes iteratius 3/4

# Mètodes iteratius (cont.)

## 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  $\rho(M) \leq \|M\|_{M,\varepsilon} \leq \rho(M) + \varepsilon$ . 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.

Mètodes iteratius 2/4

# Mètodes iteratius (cont.)

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

$$\|x^{(k)} - x\| \leq \frac{\|M\|}{1 - \|M\|} \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|$$

## Demostració

Usant un càlcul anterior, escrivim

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

Per tant,

$$\|x^{(k)} - x\| \leq \|M\| \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| + \|M\| \|x^{(k)} - x\|,$$

que és equivalent a

$$(1 - \|M\|) \|x^{(k)} - x\| \leq \|M\| \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|,$$

que és el que volíem demostrar.  $\square$

Mètodes iteratius 4/4

## 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:

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

### Mètode de Jacobi 1/10

## Mètode de Jacobi (cont.)

### Algorisme (Mètode de Jacobi)

```

procedure JACOBI(A, x, b, n, τ, 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
     $k \leftarrow 0$ ;  $\text{iconv} \leftarrow 0$ ; ▷ 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
             $s \leftarrow 0$ ; ▷ Inicialització. Per a calcular el sumatori
            for  $j = 1 \div i - 1$  do  $s \leftarrow s + a_{i,j}x_j^{(k)}$ ; end for ▷ Calclem  $\sum_{j=1, j \neq i}^n a_{i,j}x_j^{(k)}$ 
            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  $\|x - x^{(k)}\| \geq \tau$  &  $k < \text{kMAX}$  ▷ Condició de parada i control d'iteracions
        if  $k = \text{kMAX}$  then  $\text{iconv} \leftarrow 1$ ; end if ▷ Manca de convergència; la solució no és bona
    end procedure

```

### Mètode de Jacobi 3/10

## Mètode de Jacobi (cont.)

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:

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

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

### Mètode de Jacobi 2/10

## Mètode de Jacobi (cont.)

### 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

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

### Mètode de Jacobi 4/10

### Exemple (Wikipedia — cont.)

Les primeres iteracions del mètode són

| $k$ | $x_1^{(k)}$ | $x_2^{(k)}$ | $x_3^{(k)}$ | $x_4^{(k)}$ | $\ x^{(k)} - x^{(k-1)}\ $ | $\ x^{(k)} - x\ $ |
|-----|-------------|-------------|-------------|-------------|---------------------------|-------------------|
| 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           |

Mètode de Jacobi 5/10

## Mètode de Jacobi (cont.)

Una condició suficient de convergència del Mètode de Jacobi és:

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

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

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

Mètode de Jacobi 7/10

### Exemple (Wikipedia — cont.)

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

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

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

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

Mètode de Jacobi 6/10

## Mètode de Jacobi (cont.)

Llavors, la condició

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

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  $i = 1, 2, \dots, n$  s'anomena **estrictament diagonalment dominant per files**.

Mètode de Jacobi 8/10

Per altra banda, la condició

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

implica que, per a cada  $j$ ,

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

### 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**.

## Mètode de Gauss-Seidel

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:

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

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:

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

## Mètode de Gauss-Seidel (cont.)

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

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

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

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

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

## Mètode de Gauss-Seidel (cont.)

### Algorisme (Mètode de Gauss-Seidel amb reemplaçament)

```

procedure GAUSSSEIDEL( $A, x, b, n, \tau, \text{iconv}$ )
     $k \leftarrow 0; \text{iconv} \leftarrow 0;$             $\triangleright$  Inicialització del comptador d'iteracions i del control de convergència
    do
         $k \leftarrow k + 1; e \leftarrow -1;$             $\triangleright$  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  $\triangleright$  Bucle de càlcul de  $x_i^{(k+1)}$ . Es crucial que s'hi circuli en ordre creixent de  $i$ 
             $s \leftarrow 0;$                           $\triangleright$  Inicialització. Per a calcular el sumatori
            for  $j = 1 \div i - 1$  do  $s \leftarrow s + a_{i,j}x_j^{(k)}$ ; end for  $\triangleright$  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  $\triangleright$  Hi afegim  $\sum_{j=i+1}^n a_{i,j}x_j^{(k)}$ 
             $\tilde{x} \leftarrow \frac{b_i - s}{a_{i,i}};$             $\triangleright x_i^{(k+1)} \text{ en una variable temporal } \tilde{x}$ 
            if  $|x_i - \tilde{x}| > e$  then  $e \leftarrow |x_i - \tilde{x}|;$  end if       $\triangleright$  Actualitzant  $\|x - x^{(k)}\|_\infty$ 
             $x_i \leftarrow \tilde{x};$                           $\triangleright$  Depèn de la norma que s'usi
        end for
        while  $e \geq \tau \text{ & } k < \text{kMAX}$             $\triangleright$  Condició de parada i control d'iteracions
        if  $k = \text{kMAX}$  then  $\text{iconv} \leftarrow 1;$  end if       $\triangleright$  Manca de convergència; la solució no és bona
    end procedure

```

Mètode de Gauss-Seidel 3/12

## Mètode de Gauss-Seidel (cont.)

### Exemple (Wikipedia — cont.)

Les primeres iteracions del mètode són

| $k$ | $x_1^{(k)}$ | $x_2^{(k)}$ | $x_3^{(k)}$ | $x_4^{(k)}$ | $\ x^{(k)} - x^{(k-1)}\ $ | $\ x^{(k)} - x\ $ |
|-----|-------------|-------------|-------------|-------------|---------------------------|-------------------|
| 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.

Mètode de Gauss-Seidel 5/12

## 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

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

Mètode de Gauss-Seidel 4/12

## Mètode de Gauss-Seidel (cont.)

### 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  $\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|_\infty < \frac{\text{tol}}{0.549295\dots}$  ja que

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

Mètode de Gauss-Seidel 6/12

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.

Mètode de Gauss-Seidel 7/12

### Demostració (cont.)

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

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

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

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

Mètode de Gauss-Seidel 9/12

### Demostració

Denotem

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

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  $i = 1, 2, \dots, n$ ,

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

Mètode de Gauss-Seidel 8/12

### 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  $e_i^{(k)} = x_i^{(k)} - x_i$ ,

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

Mètode de Gauss-Seidel 10/12

### Demostració (cont.)

Per tant,

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

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

Comencem amb  $i = 1$ . Tenim,

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

Mètode de Gauss-Seidel 11/12

## 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.

### Demostració (cont.)

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

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

$r_j \leq r_{i-1} < 1$   
 $\|e^{(k-1)}\|_\infty$

Mètode de Gauss-Seidel 12/12

## Mètodes de sobre-relaxació

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

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

En primer lloc triem una matriu no-singular  $N(\alpha)$  on  $\alpha$  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:

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

Mètodes de sobre-relaxació 1/9

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  $\alpha$  tal que  $R = -\log(\rho(M(\alpha)))$  sigui màxim** (és a dir,  $\rho(M(\alpha)) < 1$  sigui mínim).

L'elecció del paràmetre de relaxació  $\alpha$  no és necessàriament fàcil.

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

## Mètodes de sobre-relaxació (cont.)

### Lema

Els valors propis d' $M(\alpha)$  són

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

### Demostració

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

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

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:

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

(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' $\alpha$  tal que  $\rho(M(\alpha)) < 1$  sigui mínim.

## Mètodes de sobre-relaxació (cont.)

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' $\alpha$  buscat.

### Teorema

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

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

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  $\alpha^* = -\frac{\lambda_1 + \lambda_n}{2}$ .

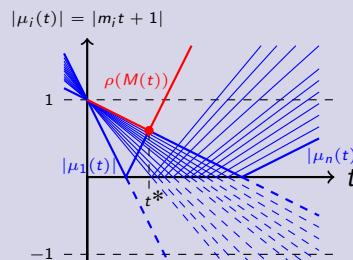
## Mètodes de sobre-relaxació (cont.)

### 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 discontinua són les gràfiques de  $\mu_i(t) = m_i t + 1$ )



Mètodes de sobre-relaxació 6/9

Mètodes de sobre-relaxació 7/9

## Mètodes de sobre-relaxació (cont.)

### Demostració (cont.)

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

$$\begin{aligned} \frac{1}{1 + \alpha} &= t < \bar{t} = -\frac{2}{\lambda_1 - 1} \iff \\ 1 + \alpha &> -\frac{\lambda_1 - 1}{2} \iff \alpha > -\frac{1 + \lambda_1}{2}. \end{aligned}$$

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  
 $-m_1 t^* - 1 = m_n t^* + 1$ .

Mètodes de sobre-relaxació 8/9

## Mètodes de sobre-relaxació (cont.)

### Demostració (cont.)

Si  $t < 0$ ,  $\rho(M(t)) \geq \mu_i(t) > 1$  per a tot  $i$  (mètode no convergent).

Per altra banda, per a cada  $t > 0$  tenim

$$\mu_1(t) \leq \mu_2(t) \leq \dots \leq \mu_n(t) < 1.$$

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

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

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

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

Mètodes de sobre-relaxació 7/9

## Mètodes de sobre-relaxació (cont.)

### Demostració (cont.)

Tenim

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

□

Mètodes de sobre-relaxació 9/9

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  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ . El valor propi  $\lambda_1$  s'anomena *valor propi dominant d' $A$*  si  $|\lambda_1| > |\lambda_i|$  per  $i = 2, 3, \dots, n$ .

El vector propi associat a  $\lambda_1$  s'anomena *vector propi dominant d' $A$* .

Valors i vectors propis. Mètode de la potència 1/22

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

Valors i vectors propis. Mètode de la potència 3/22

### 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  $\lambda$  és el valor propi dominant d' $A$  no pot ser que  $-\lambda$  també sigui valor propi d' $A$ .
- A la vista dels comentaris anteriors, obviament, no tota matriu té un valor propi dominant.

Valors i vectors propis. Mètode de la potència 2/22

### 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).

Valors i vectors propis. Mètode de la potència 4/22

**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**.

Valors i vectors propis. Mètode de la potència 5/22

**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.

Valors i vectors propis. Mètode de la potència 7/22

**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 reducible.

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.

Valors i vectors propis. Mètode de la potència 6/22

**El Mètode de la potència (versió inútil sense escalament)**

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

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

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

Valors i vectors propis. Mètode de la potència 8/22

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

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

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

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

sempre que  $\alpha_1 \neq 0$ . 

[Valors i vectors propis. Mètode de la potència 9/22](#)

### El Mètode de la potència amb escalament

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

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

Llavors,

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

A més, com que  $\|y^{(k)}\| = 1$ ,

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

[Valors i vectors propis. Mètode de la potència 11/22](#)

### Observació

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

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

[Valors i vectors propis. Mètode de la potència 10/22](#)

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

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

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

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

### És a dir

$x^{(k)}$  aproxima el vector propi associat a  $\lambda_1$ .

[Valors i vectors propis. Mètode de la potència 12/22](#)

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

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

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

És a dir,  $\frac{x_\ell^{(k+1)}}{y_\ell^{(k)}}$  aproxima el valor propi  $\lambda_1$ .

Valors i vectors propis. Mètode de la potència 13/22

### 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:

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

Si normalitzem de manera que  $\|y^{(k)}\|_2 = 1$ , tenim

$$R_k := (x^{(k+1)})^\top y^{(k)}.$$

Notis, que aquesta és una altra manera de resoldre el problema de la tria de la component  $\ell$  tal que  $v_{1,\ell} \neq 0$ . A més la velocitat de convergència de la successió  $\{R_k\}_k$  a  $\lambda_1$  és més gran que la de la successió  $\left\{ \frac{x_\ell^{(k+1)}}{y_\ell^{(k)}} \right\}_k$ .

Valors i vectors propis. Mètode de la potència 15/22

Normalització i el problema de que cal triar  $\ell$  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:
 
$$\frac{x_{\ell(k)}^{(k+1)}}{y_{\ell(k)}^{(k)}} = \text{signe}(y_{\ell(k)}^{(k)}) x_{\ell(k)}^{(k+1)},$$
 que no necessita aritmètica (es calcula amb un if aritmètic i un canvi de signe).
- Quan  $x^{(k)}$  sigui prou apropiat 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  $v_{1,\ell(k)} \neq 0$ .

Valors i vectors propis. Mètode de la potència 14/22

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

```

procedure POTENCIA(A, n, τ, λ, v, iconv)
    iconv ← 0;
    λold ← \|A\|∞ + 1;
    for i = 1 ÷ n do vi ← 1; end for
    for k = 1 ÷ kMAX do
        max ← -1;
        for i = 1 ÷ n do
            if |vi| > max then max ← |vi|; imax ← i; end if
        end for
        for i = 1 ÷ n do vi ← vi / max; end for
        s ← (vimax > 0) ? 1 : -1;
        v ← Av;
        λ ← sv[imax];
        if |λ - λold| < τ then return λ; end if
        λold ← λ;
    end for
    iconv ← 1;
end procedure
  
```

▷ Entrada:  $A, n, \tau, \lambda, v, \text{iconv}$   
     ▷ Sortida:  $\lambda, v, \text{iconv}$

▷ Inicialització del comptador d'iteracions  
     ▷ Inicialització. Volem  $\lambda_{old} \neq \lambda$  a la primera iteració  
     ▷ Per matrius no-negatives es pot prendre  $\lambda_{old} = -1$   
     ▷ Llavor recomanada per matrius no-negatives

▷ Control d'iteracions  
     ▷ Inicialitzem el càclul de  $\|v\|_\infty$

▷ Calculant  $\|v\|_\infty$   
     ▷ Normalitzant  $v$ ;  $v_{i_{max}} = \pm 1$   
     ▷  $s = \text{signe}(v_{i_{max}})$   
     ▷ Iteració del mètode de la potència  
     ▷ Quocient per a aproximar el VAP  
     ▷ Parada quan hi ha convergència  
     ▷ Memòria; pel control de convergència

▷ Manca de convergència; la solució no és bona

Valors i vectors propis. Mètode de la potència 16/22

### 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   |

## 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  $v_1^\top x^{(k)} \not\approx 0$ , 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).

### Exemple (cont.)

Alguns iterats del mètode de la potència:

| $\overset{(0)}{y}$<br>  <br>$\overset{(0)}{x}$ | $x^{(1)}$ | $y^{(1)}$ | $x^{(2)}$ | $y^{(2)}$ | $x^{(3)}$ | $y^{(14)}$ | $x^{(14)}$ | $y^{(50)}$ | $x^{(50)}$ |
|--|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|------------|------------|------------|------------|
| 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 díigits bons i per  $k = 50$  els hi tenim tots (de fet en tenim 16 de díigits correctes).

## 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        |              |
|-----------------------------|----------------------|--|-----------------------|-----------------------|------------|--------------|
| $s \cdot x_{\ell(k)}^{(k)}$ |                      |  | 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  $\lambda_1 \approx s \cdot x_{\ell(k)}^{(k)}$  són "penoses" per  $k < 50$ . Però malgrat tot el mètode convergeix 😊.

Finalment, per  $k = 76$ , tenim tots (8) díigits 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:

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

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

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

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.

Valors i vectors propis. Mètode de la potència 21/22

## Variants del mètode de la potència

### Mètode de la potència desplaçada

Sigui  $A$  una matriu  $n \times n$  amb  $\lambda_i$ ;  $v_i$   $i = 1, 2, \dots, n$  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  $A + \mu \text{Id}$ , que té les parelles de valor i vector propi  $\mu_i = \lambda_i + \mu$ ;  $v_i$ . Si es pot prendre  $\mu$  de manera que algun dels  $\mu_i$  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  $\mu$  de manera que aquesta separació sigui el més gran possible.

Variants del mètode de la potència 1/7

### 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).

Valors i vectors propis. Mètode de la potència 22/22

## Variants del mètode de la potència (cont.)

### Aplicacions del mètode de la potència desplaçada

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

- Suposem que  $\lambda_1$  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  $\lambda_i$  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  $A + \mu \text{Id}$  sempre que prenguem  $\mu > 0$ . Si prenem  $\mu$  prou gran podem usar el mètode la potència desplaçada per a calcular  $\mu_1$  i el seu vector propi associat i obtenir  $\lambda_1$  i el seu vector propi associat.
- Suposem que  $\lambda_1$  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  $\mu$  negatiu.

Variants del mètode de la potència 2/7

### Aplicacions del mètode de la potència desplaçada (cont.)

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

Variants del mètode de la potència 3/7

## Variants del mètode de la potència (cont.)

### 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  $x^{(k+1)} = (A - \mu \text{Id})^{-1}y^{(k)}$ , que és equivalent a  $(A - \mu \text{Id})x^{(k+1)} = y^{(k)}$ .

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

Variants del mètode de la potència 5/7

### Mètode de la potència inversa desplaçada

Sigui  $A$  una matriu  $n \times n$  amb  $\lambda_i; v_i$   $i = 1, 2, \dots, n$  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  $(A - \mu \text{Id})^{-1}$  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  $\mu$  de manera que algun dels  $\mu_i$  sigui el valor propi dominant, el mètode de la potència ens permet calcular la parella  $\mu_i; v_i$  que dóna una aproximació de la parella  $\lambda_i = \mu + \frac{1}{\mu_i}; v_i$ .

Variants del mètode de la potència 4/7

## Variants del mètode de la potència (cont.)

### Aplicacions del mètode de la potència inversa desplaçada

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

Suposem que  $\lambda_n$  és real, simple i diferent de zero. La matriu  $A^{-1}$  té valors propis  $\left| \frac{1}{\lambda_1} \right| \leq \left| \frac{1}{\lambda_2} \right| \leq \dots \leq \left| \frac{1}{\lambda_n} \right|$  i, prenent,  $\mu$  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  $(A - \mu \text{Id})^{-1}$ ). Això ens dóna un mètode de càcul de  $\lambda_n$ .

Variants del mètode de la potència 6/7

### Aplicacions del mètode de la potència inversa desplaçada:

#### Refinament de valors i vectors propis

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

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

Variants del mètode de la potència 7/7

## Càcul dels valors propis: Deflació de Wielandt (cont.)

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

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

Llavors,

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

Càcul dels valors propis: Deflació de Wielandt 2/11

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  $n \times n$

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

Observem que

$$A^d v = Av - \sigma v (z^\top v) = Av - \sigma v = (\lambda - \sigma)v.$$

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

Càcul dels valors propis: Deflació de Wielandt 1/11

## Càcul dels valors propis: Deflació de Wielandt (cont.)

Observem que

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

Per tant,

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

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

Càcul dels valors propis: Deflació de Wielandt 3/11

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  $a^\top v = e_j^\top A v = \lambda e_j^\top v = \lambda v_j$  i, per tant,  $\left(\frac{1}{\lambda v_j} a\right)^\top v = 1$ .

[Càlcul dels valors propis: Deflació de Wielandt 4/11](#)

### Reconstrucció dels vectors propis d' $A$ a partir dels d' $A^W$

Observem que si  $\mu$  és un valor propi d' $A^W$  amb vector propi  $\bar{w}$ , llavors  $\mu$  és un valor propi de  $d'A^d$  amb vector propi

$$\tilde{w} = (\bar{w}_1, \bar{w}_2, \dots, \bar{w}_{j-1}, 0, \bar{w}_j, \bar{w}_{j+1}, \dots, \bar{w}_{n-1})$$

on  $\bar{w}_i$  denota la component  $i$  de  $\bar{w}$ :  $A^d \tilde{w} = \mu \tilde{w}$ .

Ara denotem

$$\eta := \frac{(\mu - \lambda)v_j}{a^\top \tilde{w}}.$$

Veurem que  $\mu$  és també valor propi de la matriu original  $A$  però amb vector propi  $w = v + \eta \tilde{w}$ .

[Càlcul dels valors propis: Deflació de Wielandt 6/11](#)

Llavors, prenent  $\sigma = \lambda$  i  $z = \frac{1}{\lambda v_j} a$ , obtenim

$$A^d := A - \sigma \frac{1}{\lambda v_j} v a^\top = A - \frac{1}{v_j} v a^\top.$$

Observem que  $A - \frac{1}{v_j} v a^\top = (\text{Id} - \frac{1}{v_j} v e_j^\top) A$  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  $\text{Id} - \frac{1}{v_j} v e_j^\top$  té la fila  $j$  tota de zeros el que implica que  $A^d = (\text{Id} - \frac{1}{v_j} v e_j^\top) A$  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  $\lambda$ .**

[Càlcul dels valors propis: Deflació de Wielandt 5/11](#)

Tenim:

$$\begin{aligned} Aw &= A(v + \eta \tilde{w}) = Av + \eta A \tilde{w} \\ &= \lambda v + \eta \left( A^d + \frac{1}{v_j} v a^\top \right) \tilde{w} \\ &= \lambda v + \eta A^d \tilde{w} + \frac{(\mu - \lambda)v_j}{a^\top \tilde{w}} \frac{1}{v_j} v (a^\top \tilde{w}) \\ &= \lambda v + \eta \mu \tilde{w} + (\mu - \lambda)v = \eta \mu \tilde{w} + \mu v = \mu w. \end{aligned}$$

### Observació

Com que els  $\lambda$  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.

[Càlcul dels valors propis: Deflació de Wielandt 7/11](#)

### 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

$$v = (0.4831049723, 0.5836704179, 0.7371109687, 1.0)^\top.$$

Càlcul dels valors propis: Deflació de Wielandt 8/11

## Càlcul dels valors propis: Deflació de Wielandt (cont.)

### Exemple (Deflació de Wielandt (cont.))

Llavors,

$$A^W = \begin{pmatrix} 0.7918352089 & -0.2081647910 & -0.2081647910 \\ -0.5257780625 & 1.4742219374 & -0.5257780625 \\ -1.0699435054 & -1.0699435054 & 1.9300564945 \end{pmatrix}.$$

Si apliquem el mètode de la potència a aquesta matriu obtenim la parella valor vector propi

$$\mu = 2.5077487053 \quad i \quad \tilde{w} = (0.1592899388, 1.1947132271, -2.5077487053)^\top.$$

Com hem dit abans,

$$\tilde{w} = (0, 0.1592899388, 1.1947132271, -2.5077487053)^\top$$

és el vector propi associat a  $\mu$  per la matriu  $A^d$  (es pot comprovar fàcilment fent els productes  $A^d \tilde{w}$  i  $\mu \tilde{w}$ ).

Càlcul dels valors propis: Deflació de Wielandt 10/11

### Exemple (Deflació de Wielandt (cont.))

Com que  $v_1 \neq 0$  podem prendre  $j = 1$ . En aquest cas tenim:

$$v a^\top = \begin{pmatrix} 0.4831049723 \\ 0.5836704179 \\ 0.7371109687 \\ 1.0 \end{pmatrix} (1 \quad 1 \quad 1 \quad 1) = \begin{pmatrix} 0.4831049723 & 0.4831049723 & 0.4831049723 & 0.4831049723 \\ 0.5836704179 & 0.5836704179 & 0.5836704179 & 0.5836704179 \\ 0.7371109687 & 0.7371109687 & 0.7371109687 & 0.7371109687 \\ 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 \end{pmatrix}$$

i, per tant,

$$A^d = A - \frac{1}{0.483104972356} v a^\top = \begin{pmatrix} 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ -0.2081647910 & 0.7918352089 & -0.2081647910 & -0.2081647910 \\ -0.5257780625 & -0.5257780625 & 1.4742219374 & -0.5257780625 \\ -1.0699435054 & -1.0699435054 & -1.0699435054 & 1.9300564945 \end{pmatrix}.$$

Càlcul dels valors propis: Deflació de Wielandt 9/11

## Càlcul dels valors propis: Deflació de Wielandt (cont.)

### Exemple (Deflació de Wielandt (cont.))

Finalment,

$$\eta = \frac{(\mu - \lambda)v_j}{a^\top \tilde{w}} = 1.3801834423$$

i per tant,  $\mu$  és valor propi d' $A$  amb vector propi

$$v + \eta \tilde{w} = (0.4831049723, 0.8035197541, 2.3860343831, -2.4611532405)^\top.$$

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.

Càlcul dels valors propis: Deflació de Wielandt 11/11

