Analiza numeryczna(M) - Pracownia 3 - Zadanie 17

Wojciech Balik

Styczeń 29, 2017

Spis treści

1 Wstęp

W praktycznych zastosowaniach algebry liniowej dość popularny jest rozkład LU, gdzie dla danej macierzy $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ szukane są macierze $L \in \mathbb{L}^{n \times n}$ oraz $U \in \mathbb{U}^{n \times n}$ spełniające równanie:

$$A = LU$$

Rozkład który zostanie omówiony jest szczególnym przypadkiem rozkładu LU. Rozkład Choleskiego, gdzie o macierzy A zakładamy że jest symetryczna oraz dodatnio określona, jest postaci:

$$A = LL^T$$

2 Algorytm Banachiewicza-Choleskiego

Załóżmy że mamy daną macierz $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symetryczną oraz dodatnio określoną.Chcemy znaleźć rozkład M w postaci:

$$M = LL^T \tag{1}$$

Gdzie L jest macierzą dolnotrójkątną stopnia n.
Zauważmy że korzystając z symetryczności M możemy rozpisać to równanie jako:

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{2,1} & \dots & a_{n,1} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \dots & a_{n,2} \\ \vdots & & & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \dots & a_{n,n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{1,1} & 0 & \dots & 0 \\ l_{2,1} & l_{2,2} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ l_{n,1} & l_{n,2} & \dots & l_{n,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{1,1} & l_{2,1} & \dots & l_{n,1} \\ 0 & l_{2,2} & & l_{n,2} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & l_{n,n} \end{bmatrix}$$

Wówczas możemy wyznaczyć elemeny macierzy L idąc wiersz po wierszu, otrzymując:

$$l_{1,1}^2 = a_{1,1} \Rightarrow l_{1,1} = \sqrt{a_{1,1}}$$
$$l_{2,1}l_{1,1} = a_{2,1} \Rightarrow l_{2,1} = \frac{a_{2,1}}{l_{1,1}}$$
$$\vdots$$
$$l_{i,i} = \sqrt{a_{i,i} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{i,k}^2} \tag{2}$$
$$l_{i,j} = \frac{1}{l_{j,j}}(a_{i,j} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{i,k}l_{j,k}) \tag{3}$$

Dzięki dodatniej określoności macierzy M, wszystkie wartości pod pierwiastkiem we wzorze (2) są dodatnie, więc nie ma potrzeby używać liczb zespolonych(szczegóły można doczytać w [1]).
Koszt wyznaczenia takiego rozkładu to $O(n^2)$.Zauważmy również że nie potrzebujemy trzymać w pamięci komputera dwóch macierzy L oraz L^T, co pozwala zaoszczędzić nieco miejsca.

3 Zastosowania Rozkładu Choleskiego

Najbardziej oczywistym zastosowaniem jest rozwiązywanie układów równań.Załóżmy że mamy układ równań:

$$Ax = b \tag{4}$$

Gdzie A posiada rozkład Choleskiego.Wówczas otrzymujemy:

$$LL^T x = b \tag{5}$$

Zauważmy że rozwiązując równanie:

$$Ly = b \tag{6}$$

oraz podstawiając do (3) a następnie mnożąc obustronnie przez L^{-1}, otrzymujemy:

$$L^T x = y \tag{7}$$

Rozwiązanie równań (4) oraz (5) to koszt $O(n^2)$, gdzie dla porównania, zwykła eliminacja Gaussa kosztuje $O(n^3)$. Mogłoby się wydawać że powyższa metoda nie znajdzie swojego zastosowania przez to że wymagane jest aby macierz A była symetryczna oraz dodatnio określona. Okazuje się jednak że takie macierze występują we wielu problemach, m.in. w równaniach różniczkowych cząstkowych, statystyce.

3.1 Problem najmniejszych kwadratów

Załóżmy że mamy układ równań:

$$Ax = b \tag{8}$$

Gdzie $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad m > n, \quad rk(A) = n.$
Taki układ zazwyczaj nie ma rozwiązań, ale można znaleźć wektor x który minimalizuje wartość:

$$\|Ax - b\|_2^2$$

Okazuje się że wektor x musi spełniać:

$$(A^T A)x = A^T b \tag{9}$$

Zauważmy że:

$$(A^T A)^T = A^T A \tag{10}$$

oraz dla dowolnego wektora $u \in \mathbb{R}^n$

$$u^T A^T A u = (Au)^T (Au) = \|Au\|_2^2 > 0 \tag{11}$$

Macierz jest więc symetryczna oraz dodatnio określona co umożliwia nam użycie rozkładu Choleskiego do rozwiązania tego problemu.

4 Testy numeryczne

Testy zostały przeprowadzone w następujący sposób:
Wybrana zostaje macierz A oraz wektor x który będzie prawdziwym rozwiązaniem, obliczany zostaje wektor b przez przemnożenie M oraz x. Następnie wyznaczany zostaje wektor $\tilde{x}$ za pomocą rozkładu Choleskiego.
Do prezentacji błędów numerycznych posłużymy się błędem względnym:

$$\frac{\|x-\tilde{x}\|}{\|x\|}$$

oraz residuum:

$$\|b - A\tilde{x}\|$$

4.1 Macierz Hilberta

Macierzą Hilberta nazywamy macierz $H = [h_{ij}]$, gdzie $h_{ij} = \frac{1}{i+j-1}$. Cechą charakterystyczną tej macierzy jest to że jest bardzo źle uwarunkowana - $cond(H_n) = O(\frac{e^{3.5n}}{\sqrt{n}})$. Używanie jej w obliczeniach numerycznych, nawet dla niewielkich n może spowodować duże błędy numeryczne.
Poniższa tabelka prezentuje błąd względny oraz residuum, gdzie wektor b został tak dobrany że $x = [1, 2, ..., n]^T$

n	$\|b - Hx\|$	$\frac{\|x-\tilde{x}\|}{\|x\|}$
3	0.000e+00	1.280e-14
6	4.441e-16	1.759e-10
9	1.662e-15	4.366e-06
11	2.391e-15	7.929e-03

Problemy związane z błędami numerycznymi wcale nie muszą dotyczyć tylko wyniku.Mimo że macierz Hilberta jest dodatnio określona dla każdego n, to dla $n \geq 12$ wskutek zaokrągleń numerycznych wyrażenie pod pierwiastkiem we wzorze (2) jest ujemne. Wniosek z tego płynący jest taki że nawet jeśli macierz jest dodatnio określona w sensie matematycznym, wcale nie oznacza że w sensie numerycznym również tak będzie.

4.2 Macierz Pei

Macierz Pei to macierz postaci: $\mathbf{1} + \epsilon I_n$, gdzie $\mathbf{1}$ to macierz kwadratowa $n \times n$ mająca jedynki na wszystkich współrzędnych.Gdy $\epsilon \approx 0$ macierz jest źle uwarunkowana.Wektor b został dobrany tak aby $x = [1, 1, ..., 1]^T$, oraz $\epsilon = 10e - 15$

n	$\|b - Px\|$	$\frac{\|x-\tilde{x}\|}{\|x\|}$
3	4.441e-16	1.549e-01
6	1.986e-15	2.125e-01
9	3.553e-15	8.231e-01
12	7.324e-15	1.046e+00
15	3.077e-15	1.209e+00
18	3.553e-15	1.216e+00

5 Wnioski

Rozkład Choleskiego zdecydowanie nie nadaje się do rozwiązań ogólnych, gdzie o rozkładanych macierzach nie wiemy nic, ponieważ szansa że taka macierz będzie symetryczna oraz dodatnio określona jest bardzo mała. Rozkład ten znalazł jednak zastosowanie w pewnych szczególnych problemach, sprawdzając się całkiem dobrze. Dość dużym minusem jest to że macierze które formalnie są określone dodatnio, z punktu widzenia obliczeń numerycznych wcale takie nie muszą być, co zmusza nas do użycia innego rozkładu.

Literatura

[1] David Kincaid, Ward Cheney, przekł. Stefan Paszkowski, *Analiza Numeryczna*, Warszawa, WNT, 2006.