Tema nr. 2

Date: n - dimensiunea sistemului, ϵ - precizia calculelor, matricea sistemului $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$ simetrică şi pozitiv definită, vectorul termenilor liberi $b \in \mathbf{R}^n$:

- Să se calculeze, o descompunere LDL^T (descompunerea/factorizarea Choleski) a matricii A ($A = LDL^T$), unde L este matrice inferior triunghiulară cu toate elementele de pe diagonala pricipală egale cu 1 iar D este matrice diagonală;
- Folosind această descompunere, să se calculeze determinantul matricii A ($\det A = \det L \det D \det L^T$) ;
- Utilizând descompunerea Choleski calculată mai sus şi metodele substituţiei directe şi inverse, să se calculeze x_{Chol}, o soluţie aproximativă a sistemului $Ax = b$;
- Folosindu-se una din bibliotecile menţionate în pagina laboratorului, să se calculeze şi să se afişeze o descompunere LU a matricii A şi soluţia sistemului $Ax = b$;
- Să se verifice soluţia calculată prin afişarea normei:

  $$||A^{init}x_{Chol} - b||_2$$

  (această normă ar trebui să fie mai mică decât $10^{-8}, 10^{-9}$)

  A^{init} este matricea iniţială, $||\cdot||_2$ este norma euclidiană.
- *Restricţie*: în program să se aloce o singură matrice A. Matricea D se va memora într-un vector d (se memorează doar elementele de pe diagonala matricii D). Elementele de sub diagonala principală a matricii L (partea strict inferior triunghiulară a matricii L) se vor calcula direct în matricea A. Nu se vor memora elementele 1 de pe diagonala matricii L, dar se va ţine cont de acest lucru la rezolvarea sistemelor triunghiulare ce implică matricea L.

Observaţii

1. Precizia calculelor ϵ, este un număr pozitiv de forma $\epsilon = 10^{-t}$ (cu $t = 5, 6, ..., 10, ...$ la alegere) care este dată de intrare în program (se citeşte de la tastatură sau din fişier) la fel ca şi dimensiunea n a datelor. Acest număr se foloseşte atunci când testăm dacă o variabilă este 0 sau nu înaintea unei operaţii de împărţire. Dacă vrem să efectuăm operaţia de împărţire $s = 1/v$ unde $v \in \mathbf{R}$, **NU** vom scrie:

   if$(v! = 0)$ $s = 1/v$;

   else Write(" nu se poate face impartirea");

   ci vom scrie în program:

   if$(Math.Abs(v) > eps)$ $s = 1/v$;

   else Write(" nu se poate face impartirea");

2. Dacă pentru o matrice A simetrică şi pozitiv definită avem descompunerea LDL^T, rezolvarea sistemului $Ax = b$ se reduce la rezolvarea a două sisteme cu matrice triunghiulară şi a unuia cu matrice dagonală:

$$Ax = b \longleftrightarrow LDL^T x = b \longleftrightarrow \begin{cases} Lz &= b, \\ Dy &= z, (y_i = \dfrac{z_i}{d_i} \ , \ i = 1, .., n) \\ L^T x &= y. \end{cases}$$

   Se rezolvă întâi sistemul inferior triunghiular $Lz = b$ (se adaptează formulele substituţiei directe pentru matrici cu diagonala egală cu 1). Apoi se rezolvă sistemul diagonal $Dy = z$ (formulele de rezolvare sunt scrise mai sus, z fiind soluţia obţinută anterior) şi apoi se rezolvă sistemul superior triunghiular $L^T x = y$ unde y este soluţia obţinută la rezolvarea sistemului precedent $Dy = z$ (din nou trebuie să se adapteze formulele de rezolvare a sistemelor superior triunghiulare pentru matrici cu diagonala egală cu 1). Vectorul x obţinut la rezolvarea sistemului $L^T x = y$ este şi soluţia sistemului iniţial $Ax = b$.

3. Pentru calculul $||A^{init} x_{Chol} - b||$ avem:

$$A = (a_{ij}) \in \mathbf{R}^{n \times n} \ , \ x \in \mathbf{R}^n \ , \ Ax = y \in \mathbf{R}^n \ , \ y = (y_i)_{i=1}^n$$

$$y_i = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \ , \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

$$z = (z_i)_{i=1}^{n} \in \mathbf{R}^n \quad , \quad ||z||_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} z_i^2}$$

Atenţie la calculul vectorului Ax_{Chol} - matricea A va fi modificată după calculul descompunerii Choleski: va avea în partea strict inferior triunghiulară elementele matricii L, iar elementele matricii A se găsesc în partea superior triunghiulară a matricii A.

Metodele substituţiei

Fie sistemul liniar:

$$Ax = b \tag{1}$$

unde matricea sistemului A este triunghiulară. Pentru a găsi soluţia unică a sistemului (1), trebuie ca matricea să fie nesingulară. Determinantul matricilor triunghiulare este dat de formula:

$$\det A = a_{11} a_{22} \cdots a_{nn}$$

Prin urmare pentru rezolvarea sistemului (1) vom presupune că:

$$\det A \neq 0 \Longleftrightarrow a_{ii} \neq 0 \quad \forall i = 1, 2, \ldots, n$$

Vom considera întâi cazul când matricea A este inferior triunghiulară. Sistemul (1) are forma:

$$\begin{array}{lllllllllll}
a_{11}x_1 & & & & & & & & & = & b_1 \\
a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & & & & & & & = & b_2 \\
\vdots & & & & & & & & & & \\
a_{i1}x_1 & + & a_{i2}x_2 & + & \cdots & + & a_{ii}x_i & & & = & b_i \\
\vdots & & & & & & & & & & \\
a_{n1}x_1 & + & a_{n2}x_2 & + & \cdots & + & a_{ni}x_i & + \ \cdots & + \ a_{nn}x_n & = & b_n
\end{array}$$

Necunoscutele x_1, x_2, ..., x_n se deduc folosind ecuaţiile sistemului de la prima către ultima.

Din prima ecuaţie se deduce x_1:

$$x_1 = \frac{b_1}{a_{11}} \tag{2}$$

Din a doua ecuaţie, folosind (2), obţinem x_2:

$$x_2 = \frac{b_2 - a_{21}x_1}{a_{22}}$$

Când ajungem la ecuaţia i:

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{ii-1}x_{i-1} + a_{ii}x_i = b_i$$

folosind variabilele x_1, x_2,...,x_{i-1} calculate anterior, avem:

$$x_i = \frac{b_i - a_{i1}x_1 - \cdots - a_{ii-1}x_{i-1}}{a_{ii}}$$

Din ultima ecuaţie se deduce x_n astfel:

$$x_n = \frac{b_n - a_{n1}x_1 - a_{n2}x_2 - \cdots - a_{nn-1}x_{n-1}}{a_{nn}}$$

Algoritmul de calcul a soluţiei sistemelor (1) cu matrice inferior triunghiulară este următorul:

$$x_i = \frac{(b_i - \sum\limits_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j)}{a_{ii}} \quad , \quad i = 1, 2, \ldots, n-1, n \tag{3}$$

Acest algoritm poartă numele de *metoda substituţiei directe*. Pentru matricile inferior triunghiulare cu 1 pe diagonală ($a_{ii} = 1$ $,\forall i$) formula de mai sus devine:

$$x_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j \quad , \quad i = 1, 2, \ldots, n-1, n \tag{4}$$

Vom considera, în continuare sistemul (1) cu matrice superior triunghiulară:

$$\begin{array}{ccccccccccc}
a_{11}x_1 & + & \cdots & + & a_{1i}x_i & + & \cdots & + & a_{1n-1}x_{n-1} & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\
 & & \ddots & & & & & & & & & & \\
 & & & & a_{ii}x_i & + & \cdots & + & a_{in-1}x_{n-1} & + & a_{in}x_n & = & b_i \\
 & & & & & & \ddots & & & & & & \\
 & & & & & & & & a_{n-1n-1}x_{n-1} & + & a_{n-1n}x_n & = & b_{n-1} \\
 & & & & & & & & & & a_{nn}x_n & = & b_n
\end{array}$$

Necunoscutele x_1, x_2,...,x_n se deduc pe rând, folosind ecuaţiile sistemului de la ultima către prima.
Din ultima ecuaţie găsim x_n:

$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}} \tag{5}$$

Folosnd valoarea lui x_n dedusă mai sus, din penultima ecuaţie a sistemului obţinem:

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

Când ajungem la ecuaţia i:

$$a_{ii}x_i + a_{ii+1}x_{i+1} + \cdots + a_{in}x_n = b_i$$

se cunosc deja x_{i+1},x_{i+2},..., x_n şi deducem:

$$x_i = \frac{b_i - a_{ii+1}x_{i+1} - \cdots - a_{in}x_n}{a_{ii}}$$

Din prima ecuaţie găsim valoarea lui x_1:

$$x_1 = \frac{b_1 - a_{12}x_2 - \cdots - a_{1n}x_n}{a_{11}}$$

Procedeul descris mai sus poartă numele de *metoda substituţiei inverse* pentru rezolvarea sistemelor liniare cu matrice superior triunghiulară:

$$x_i = \frac{(b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j)}{a_{ii}} \quad , \quad i = n, n-1, \ldots, 2, 1 \tag{6}$$

Pentru matricile superior triunghiulare cu $a_{ii} = 1, \forall i$ formula de mai sus devine:

$$x_i = b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j \quad , \quad i = n, n-1, \ldots, 2, 1 \tag{7}$$

Descompunerea Choleski (LDL^T)

Fie $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$ o matrice cu elemente reale, pătratică de dimensiune n, simetrică ($A = A^T$) şi pozitiv definită.

O matrice simetrică este o matrice egală cu transpusa sa. În astfel de matrici elementele de sub diagonala principală a matricii coincid cu elementele de deasupra diagonalei principale a matricii (informaţia se repetă).

Se numeşte matrice pozitiv definită o matrice care satisface următoarea relaţie:

$$(Ax, x)_{\mathbf{R^n}} > 0 \quad , \quad \forall x \in \mathbf{R}^n \ , \ x \neq 0 \tag{8}$$

O matrice pozitiv definită are proprietatea că este nesingulară ($\det A \neq 0$). Se caută o descompunere pentru matricea A de forma:

$$A = LDL^T$$

unde $L \in \mathbf{R}^{n\times n}$ este matrice inferior triunghiulară cu elementele de pe diagonala principală egale cu 1 ($l_{ii} = 1 \ \forall i$), D este o matrice diagonală, $D = \text{diag}(d_1, d_2, ..., d_n)$, iar L^T este transpusa matricii L (L^T este matrice superior triunghiulară)

Algoritmul de calcul al descompunerii LDL^T (metoda Choleski)

Fie A o matrice pătratică, pozitiv definită şi simetrică. Algoritmul de calcul al matricii inferior triunghiulare L şi al matricii D are n etape. La fiecare pas se determină câte o o coloană din matricea L şi un element de pe diagonala matricii D.

Facem următoarele notaţii (pentru a uşura deducerea algoritmului):

$$T = LD = (t_{ij}) \qquad U = L^T = (u_{ij})$$

$$t_{ij} = d_j l_{ij} \qquad u_{ij} = l_{ji} \qquad \forall i, j$$

Pasul p $(p = 1, 2, \ldots, n)$

La acest pas se calculează elementul d_p şi elementele coloanei p a matricii L , $l_{ip}, i = p + 1, \ldots, n$ (restul elementelor de pe coloana p a matricii L au valori cunoscute: $l_{ip} = 0, i = 1, \ldots, p - 1,\ l_{pp} = 1$).

Întâi se calculează elementul diagonal d_p şi apoi elementele coloanei p a matricii L, $l_{ip}, i = p + 1, \ldots, n$.

Sunt cunoscute de la paşii anteriori:

- primele $p-1$ elemente de pe diagonala lui D: $d_k, k = 1, \dots, p-1$
- elementele primelor $p-1$ coloane din L: l_{ik} cu $k = 1, \dots, p-1$, $\forall i$

Calculul elementului diagonal d_p :
Folosind relaţia $A = LDL^T = TU$:

$$a_{pp} = (LDL^T)_{pp} = (TU)_{pp} = \sum_{k=1}^{n} t_{pk} u_{kp} = \sum_{k=1}^{p-1} d_k l_{pk} l_{pk} + d_p \cdot 1$$

Prin urmare:

$$a_{pp} = \sum_{k=1}^{p-1} d_k l_{pk}^2 + d_p$$

În această relaţie singurul element necunoscut este d_p deoarece elementele d_k şi $l_{pk}, k = 1, \dots, p-1$ sunt elemente de pe diagonala matricii D şi de pe coloane ale matricii L calculate la paşii anteriori. Deducem:

$$d_p = a_{pp} - \sum_{k=1}^{p-1} d_k l_{pk}^2 \tag{9}$$

Calculul elementelor l_{ip} , $i = p+1, \dots, n$
Folosim, din nou, relaţia $A = LDL^T = TU$:

$$a_{ip} = (LDL^T)_{ip} = (TU)_{ip} = \sum_{k=1}^{n} t_{ik} u_{kp} = \sum_{k=1}^{p-1} d_k l_{ik} l_{pk} + l_{ip} d_p$$

Dacă $d_p \neq 0$ (pentru matrici A pozitiv definite acest lucru este adevărat) putem calcula elementele coloanei p a matricii L astfel:

$$l_{ip} = \left(a_{ip} - \sum_{k=1}^{p-1} d_k l_{ik} l_{pk} \right) \Big/ d_p \ , \ i = p+1, \dots, n \tag{10}$$

(elementele d_k, l_{ik} şi l_{pk} $k = 1, \dots, p-1$ sunt elemente din D şi L calculate la paşii anteriori)

Dacă avem un element $d_p = 0$, algoritmul se opreşte, descompunerea LDL^T nu poate fi calculată. Pentru matricile simetrice şi pozitiv definite $d_p \neq 0, \forall p$.

Observaţie:

Pentru memorarea elementelor plasate sub diagonala principală a matricii L se poate folosi partea strict inferior triunghiulară a matricii A iniţială:

$$l_{ij} = a_{ij} \quad , \quad i = 1, 2, \ldots, n \ , \ j = 1, 2, \ldots, i - 1.$$

Se observă că în acest fel nu se memorează elementele de pe diagonala principală a matricii L, $l_{ii} = 1, i = 1, \ldots, n$. Vom 'memora' mascat aceste elemente în formulele de rezolvare a sistemelor triunghiulare ce implică matricea L. Se vor folosi formulele (4) pentru rezolvarea sistemului inferior triunghiular $Lz = b$ şi formulele (7) pentru rezolvarea sistemului superior triunghiular $L^T x = y$.

Calculele (9) şi (10) se pot face direct în matricea A.

Cu acest tip de memorare (partea strict inferior triunghiulară a matricii A conţine elementele matricii L, iar partea superior triunghiulară are elementele matricii A iniţiale) trebuie adaptate formulele de calcul ale vectorului $A^{init} x_{Chol}$. Se va folosi proprietatea de simetrie a matricii A pentru a utiliza valorile corecte ale elementelor de sub diagonala principală a matricii A:

$$a_{ij} = a_{ji} \ , \ i = 1, \ldots n \ , \ j = 1, \ldots i - 1.$$

Exemplu

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2.5 & 3 \\ 2.5 & 8.25 & 15.5 \\ 3 & 15.5 & 43 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2.5 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2.5 & 3 \\ 0 & 1 & 4 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$