Calcul Numeric

Cursul 5

2017

Anca Ignat

Descompuneri LU

$$A \in \mathbb{R}^{n \times n}\ , \quad A = L \cdot U,$$

L inferior triunghiulară şi U superior triunghiulară

$$L, U \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

$$Ax = b \leftrightarrow LUx = b \leftrightarrow \begin{cases} Ly = b \Rightarrow \text{soluţia } y^* \\ Ux = y^* \Rightarrow \text{soluţia } x^* \end{cases}, \quad x^* = A^{-1}b$$

Fie minorul principal principal al matricii $\boldsymbol{A}$:

$$A_p = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1p} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2p} \\ \vdots & & & \\ a_{p1} & a_{p2} & \cdots & a_{pp} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{p\times p} \ , \ p = 1,\ldots,n$$

Teoremă (descompunere *LU*)

Fie $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n \times n}}$ o matrice reală pătratică de dimensiune $\boldsymbol{n}$ astfel încât $\mathbf{det}\, \boldsymbol{A_p} \neq \mathbf{0}$, $\forall \boldsymbol{p} = \mathbf{1}, \ldots, \boldsymbol{n}$. Atunci există o unică matrice inferior triunghiulară $\boldsymbol{L} = (\boldsymbol{l_{ij}})_{\boldsymbol{i, j = 1, \ldots, n}}$ şi o unică matrice superior triunghiulară $\boldsymbol{U} = (\boldsymbol{u_{ij}})_{\boldsymbol{i, j = 1, \ldots, n}}$ cu $\boldsymbol{u_{ii}} = \mathbf{1}, \boldsymbol{i} = \mathbf{1}, \ldots, \boldsymbol{n}$ astfel încât

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{U} \qquad (1)$$

Demonstraţie. ***Existenţa***: demonstraţia se face prin inducţie după $\boldsymbol{n}$ dimensiunea matricii $\boldsymbol{A}$.

Algoritmul Crout *de calcul al descompunerii* ***LU***

Fie $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{n}}$ o matrice reală pătratică de dimensiune $\boldsymbol{n}$ care satisface ipotezele teoremei de mai sus. Algoritmul de calcul al matricilor $\boldsymbol{L}$ şi $\boldsymbol{U}$ are $\boldsymbol{n}$ etape. La fiecare pas se determină simultan:

- câte o coloană din matricea $\boldsymbol{L}$ şi
- câte o linie din matricea $\boldsymbol{U}$.

Descriem în continuare, un pas oarecare.

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

Se determină elementele coloanei $\boldsymbol{p}$ ale matricii $\boldsymbol{L}$:

$$\boldsymbol{l_{ip},\ i = p, \ldots, n}$$

şi elementele liniei $\boldsymbol{p}$ ale matricii $\boldsymbol{U}$,

$$\boldsymbol{u_{pp} = 1\ ,\ \ u_{pi}, i = p + 1, \ldots, n},$$

$$(\boldsymbol{u_{pi} = l_{ip} = 0,\ i = 1, \ldots, p-1}).$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ \boldsymbol{l}_{pp} \\ \boldsymbol{l}_{p+1\,p} \\ \vdots \\ \boldsymbol{l}_{np} \end{pmatrix} \text{ col. } \boldsymbol{p} \text{ a matr. } \boldsymbol{L}$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{1} & \boldsymbol{u}_{pp+1} & \cdots & \boldsymbol{u}_{pn} \end{pmatrix} \text{ lin. } \boldsymbol{p} \text{ a matr. } \boldsymbol{U}$$

Se cunosc de la paşii anteriori:

- elementele primelor ***p-1*** coloane din ***L***
  (elemente $\boldsymbol{l_{ik}}$ cu $\boldsymbol{k = 1, \ldots, p-1}, \forall \boldsymbol{j}$).

- elementele primelor ***p-1*** linii din ***U***
  (elemente $\boldsymbol{u_{kj}}$ cu $\boldsymbol{k = 1, \ldots, p-1}, \forall \boldsymbol{j}$)

Calculul elementelor ***coloanei p*** din matricea L, $\boldsymbol{l_{ip}}$ $\boldsymbol{i = p, \ldots, n}$ se face folosind elementul $\boldsymbol{a_{ip}}$ şi $\boldsymbol{(LU)_{ip}}$. Avem:

$$a_{ip} = (LU)_{ip} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kp} \ (u_{kp} = 0, k = p+1,\ldots,n) = \sum_{k=1}^{p} l_{ik} u_{kp} =$$

$$= \sum_{k=1}^{p-1} l_{ik} u_{kp} + l_{ip} u_{pp} = \sum_{k=1}^{p-1} l_{ik} u_{kp} + l_{ip} \ \ (u_{pp} = 1)$$

Pentru $i = p,\ldots,n$ avem:

$$l_{ip} = a_{ip} - \sum_{k=1}^{p-1} l_{ik} u_{kp} , \quad i = p,\ldots,n \tag{2}$$

($u_{pp} = 1$, l_{ik}, u_{kp} $k = 1,\ldots, p-1$ sunt elemente de pe coloane din L şi linii din U calculate la paşii anteriori)

Calculul elementelor ***liniei p*** din matricea ***U:***

$$u_{pi}\ , i = p+1,\ldots,n\ (u_{pi} = 0\ , i = 1,\ldots,p-1\ , u_{pp} = 1)$$

se face analog:

$$a_{pi} = (LU)_{pi} = \sum_{k=1}^{n} l_{pk}u_{ki}(l_{pk} = 0, k = p+1,\ldots,n) = \sum_{k=1}^{p} l_{pk}u_{ki} =$$

$$= \sum_{k=1}^{p-1} l_{pk}u_{ki} + l_{pp}u_{pi}$$

Dacă $l_{pp} \neq 0$ putem calcula elementele nenule ale coloanei p din matricea U astfel:

$$u_{pi} = \frac{(a_{pi} - \sum_{k=1}^{p-1} l_{pk} u_{ki})}{l_{pp}} \quad , \quad i = p+1, \cdots, n \qquad (3)$$

(elementele l_{pk}, u_{ki} $k = 1, \ldots, p-1$ sunt calculate anterior pasului ***p)***

Dac $l_{pp} = 0$, calculele se opresc, descompunerea ***LU*** nu poate fi calculată - matricea A are un minor A_p cu determinantul ***0***.

Unicitatea: Demonstraţie prin reducere la absurd.
Facem observaţia că inversa unei matrici nesingulare triunghiulară inferior (superior) este o matrice de acelaşi tip.

Presupunem că

$$A = L \cdot U = L_1 \cdot U_1 \qquad (4)$$

Din ipoteza A nesingulară rezultă existenţa inverselor matricilor L, L_1, U, U_1. Înmulţind egalitatea (4) la stânga cu L^{-1}şi cu U_1^{-1} la dreapta obţinem

$$U\,U_1^{-1} = L^{-1} L_1 .$$

Matricea $U\,U_1^{-1}$ este superior triunghiulară cu elementele diagonale egale cu *1* iar matricea $L^{-1} L_1$ este inferior triunghiulară. Rezultă că:

$$U\,U_1^{-1} = L^{-1} L_1 = I_n, \qquad \text{deci} \qquad L=L_1, \quad U=U_1.$$

Descompunerea Cholesky

O matrice $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ se numeşte ***pozitiv definit***ă dacă:

$$\left(Ax, x\right)_{\mathbb{R}^n} > 0 \quad \forall\, x \in \mathbb{R}^n\,,\; x \neq 0$$

Notaţie: $A > 0$

Fie $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ o matrice simetrică ($A=A^T$) şi pozitiv definită.

Descompunerea Cholesky pentru matricea A este de forma:

$$A = LL^T\,,\; L \text{ matrice inferior triunghiulară}$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = LL^T = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ 0 & l_{22} & \cdots & l_{n2} \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

Matricea $\boldsymbol{L}$ se calculează în $\boldsymbol{n}$ paşi, coloană după coloană.

Pas *r (r=1,…,n)*

Se calculează elementele coloanei ***r*** a matricii ***L***:
întâi elementul diagonal $\boldsymbol{l_{rr}}$ apoi
celelalte elemente $\boldsymbol{l_{ir}}$ ***(i=r+1,…n)***

Coloana ***r*** a matricii ***L:***

$$\left(\mathbf{0} \quad \cdots \quad \mathbf{0} \quad \boldsymbol{l_{rr}} \quad \boldsymbol{l_{r+1r}} \quad \cdots \quad \boldsymbol{l_{ir}} \quad \cdots \quad \boldsymbol{l_{nr}}\right)^{\boldsymbol{T}}$$

- se cunosc elementele primelor ***(r-1)*** coloane ale matricii ***L***

Calcul $\boldsymbol{l_{rr}}$:

$$\boldsymbol{a_{rr} = \left(LL^T\right)_{rr} = \begin{pmatrix} l_{r1} & \cdots & l_{rr-1} & l_{rr-1} & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{r1} \\ \vdots \\ l_{rr-1} \\ l_{rr} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} =}$$

$$\boldsymbol{= \; l_{r1}^2 + l_{r2}^2 + \cdots + l_{rr-1}^2 + l_{rr}^2 \quad \Rightarrow \quad l_{rr} = \pm\sqrt{a_{rr} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk}^2}}$$

Calcul $\boldsymbol{l_{ir}}$ $\boldsymbol{(i=r+1,\ldots,n)}$:

$$a_{ir} = \left(LL^T \right)_{ir} = \begin{pmatrix} l_{i1} & \cdots & l_{ir-1} & l_{ir} & \cdots & l_{ii} & \cdots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{r1} \\ \vdots \\ l_{rr-1} \\ l_{rr} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} =$$

$$= l_{i1}l_{r1} + l_{i2}l_{r2} + \cdots + l_{ir-1}l_{rr-1} + l_{ir}l_{rr} \quad \Rightarrow \quad l_{ir} = \frac{\left(a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik}l_{rk} \right)}{l_{rr}}$$

Algoritmul de eliminare Gauss fără schimbare de linii $\Leftrightarrow$ descompunere LU

Presupunem că la fiecare pas al algoritmului de eliminare Gauss pivotul este nenul ($\boldsymbol{a_{rr}^{(r-1)} \neq 0}$), deci nu e nevoie de schimbare de linii.

Algoritmul se poate scrie astfel:

$$\textbf{for } r = 1,\ldots,n-1$$

$$\textbf{for } i = r+1,\ldots,n$$

- $f = -\dfrac{a_{ir}}{a_{rr}};$

$// \ E_i = E_i + f * E_r$

- $\textbf{for } j = r+1,\ldots,n$

  $$a_{ij} = a_{ij} + f * a_{rj};$$

- $a_{ir} = 0;$
- $b_i = b_i + f * b_r;$

Considerăm vectorul şi matricea:

$$\boldsymbol{t}^{(r)} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \\ t_{r+1}^{(r)} \\ \vdots \\ t_n^{(r)} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n \quad , \quad T_r := I_n + t^{(r)} e_r^T \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

$$\boldsymbol{t}^{(r)}\boldsymbol{e}_r^{T} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \\ \boldsymbol{t}_{r+1}^{(r)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{t}_{n}^{(r)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{1} & \mathbf{0} \cdots \mathbf{0} \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{cccccc} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \overbrace{\mathbf{0}}^{\text{col r}} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & & & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \boldsymbol{t}_{r+1}^{(r)} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & & & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \boldsymbol{t}_{n}^{(r)} & \cdots & \mathbf{0} \end{array}\right) \begin{array}{l} \\ \\ \\ -\,\text{lin}\,(\boldsymbol{r}+\mathbf{1}) \\ \\ \\ \end{array}$$

Matricea $\boldsymbol{T_r}$ este matrice triunghiulară inferior cu ***1*** pe diagonala principală:

$$\begin{array}{cc} & \begin{array}{ccccccc} & & & \textbf{col}\ \boldsymbol{r} & & \end{array} \\ \boldsymbol{T_r} = & \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} & \cdots & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & & & & & \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{1} & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \boldsymbol{t_{r+1}^{(r)}} & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & & \\ 0 & 0 & \cdots & \boldsymbol{t_{n}^{(r)}} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

Inversa matricii T_r este

$$T_r^{-1} = I_n - t^{(r)} e_r^T.$$

$$T_r\,T_r^{-1} = (I_n + t^{(r)} e_r^T)(I_n - t^{(r)} e_r^T) = I_n - t^{(r)} e_r^T + t^{(r)} e_r^T - t^{(r)} e_r^T t^{(r)} e_r^T =$$
$$= I_n - t^{(r)}\, t_r^{(r)} e_r^T = I_n \quad (0 = t_r^{(r)} = e_r^T t^{(r)})$$

Dacă A este o matrice oarecare, vrem să vedem cum se poate construi matricea $B = T_r\,A$ fără a face înmulţire matricială. Vom studia legătura între liniile matricilor A şi B.

$$\boldsymbol{e}_i^T \boldsymbol{B} = \boldsymbol{e}_i^T (\boldsymbol{T}_r \boldsymbol{A}) = \boldsymbol{e}_i^T (\boldsymbol{I}_n + \boldsymbol{t}^{(r)} \boldsymbol{e}_r^T) \boldsymbol{A} = \boldsymbol{e}_i^T \boldsymbol{A} + \boldsymbol{e}_i^T \boldsymbol{t}^{(r)} \boldsymbol{e}_r^T \boldsymbol{A} =$$
$$= \boldsymbol{e}_i^T \boldsymbol{A} + \boldsymbol{t}_i^{(r)} (\boldsymbol{e}_r^T \boldsymbol{A})$$

Linia $\boldsymbol{i}$ a noii matrici $\boldsymbol{B}$ se obţine din linia $\boldsymbol{i}$ a matricii $\boldsymbol{A}$ la care se adaugă linia $\boldsymbol{r}$ a matricii $\boldsymbol{A}$ înmulţită cu factorul $\boldsymbol{t}_i^{(r)}$.

$$\boldsymbol{e}_i^T \boldsymbol{B} = \begin{cases} \boldsymbol{e}_i^T \boldsymbol{A} & \boldsymbol{i = 1, \ldots, r \ (t_i^{(r)} = 0)} \\ \boldsymbol{e}_i^T \boldsymbol{A} + \boldsymbol{t}_i^{(r)} (\boldsymbol{e}_r^T \boldsymbol{A}) & \boldsymbol{i = r+1, \ldots, n} \end{cases} .$$

Operaţia $T_r A$ descrie Pasul r al algoritmului de eliminare Gauss dacă:

$$t_{r+1}^{(r)} = -\frac{a_{r+1r}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}, \cdots, t_i^{(r)} = -\frac{a_{ir}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}, \cdots, t_n^{(r)} = -\frac{a_{nr}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}.$$

Algoritmul de eliminare Gauss fără schimbare de linii poate fi descris astfel:

$$T_{n-1} \cdots T_2 T_1 A = U \quad \text{cu} \quad T_r = I_n + t^{(r)} e_r^T,$$

$$t^{(r)} = \left(0 \ \cdots 0 \ (-\frac{a_{r+1r}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}) \ \cdots (-\frac{a_{ir}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}) \ \cdots (-\frac{a_{nr}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}) \right)^T.$$

Avem:

$$A = T_1^{-1} T_2^{-1} \cdots T_{n-1}^{-1} U = LU \quad , \quad L := T_1^{-1} T_2^{-1} \cdots T_{n-1}^{-1}$$

$$T_1^{-1} T_2^{-1} = (I_n - t^{(1)} e_1^T)(I_n - t^{(2)} e_2^T) = I_n - t^{(1)} e_1^T - t^{(2)} e_2^T + t^{(1)} e_1^T t^{(2)} e_2^T =$$
$$= I_n - t^{(1)} e_1^T - t^{(2)} e_2^T + t^{(1)} t_1^{(2)} e_2^T = I_n - t^{(1)} e_1^T - t^{(2)} e_2^T \quad (t_1^{(2)} = 0)$$

Prin inducţie se arată că:

$$L = T_1^{-1} T_2^{-1} \cdots T_{n-1}^{-1} = I_n - t^{(1)} e_1^T - t^{(2)} e_2^T - \cdots - t^{(n-1)} e_{n-1}^T$$

$$
\boldsymbol{L} = \begin{pmatrix}
1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\
-\frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\
-\frac{a_{31}}{a_{11}} & -\frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\
\vdots & & & & & \\
-\frac{a_{r1}}{a_{11}} & -\frac{a_{r2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} & \cdots & 1 & \cdots & 0 \\
-\frac{a_{r+11}}{a_{11}} & -\frac{a_{r+12}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} & \cdots & -\frac{a_{r+1r}^{(r-1)}}{a_{rr}^{(r-1)}} & \cdots & 0 \\
\vdots & & & & & \\
-\frac{a_{n1}}{a_{11}} & -\frac{a_{n2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} & \cdots & -\frac{a_{nr}^{(r-1)}}{a_{rr}^{(r-1)}} & \cdots & 1
\end{pmatrix}
$$