Tema nr. 2

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

- Să se calculeze, când este posibil, o descompunere LU a matricei A ($A = LU$), unde L este matrice inferior triunghiulară cu 1 pe diagonală, iar U este matrice superior triunghiulară;

- Folosind această descompunere, să se calculeze determinantul matricei A ($\det A = \det L \det U$) ;

- Utilizând descompunerea LU calculată mai sus şi metodele substituţiei directe şi inverse, să se calculeze x_{LU}, o soluţie aproximativă a sistemului $Ax = b$;

- Să se verifice soluţia calculată prin afişarea normei:

$$\|A^{init}x_{LU} - b^{init}\|_2$$

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

  A^{init} şi b^{init} sunt datele iniţiale, nu cele modificate pe parcursul algoritmului. Am notat cu $\| \cdot \|_2$ norma Euclidiană.

- *Restricţie*: în program să se aloce doar două matrice, A şi A^{init} (o copie a matricei iniţiale). Descompunerea LU se va calcula direct în matricea A. Cu acest tip de memorare nu se reţine diagonala matricei L, dar se va ţine cont de faptul că $l_{ii} = 1, \forall i$ în rezolvarea sistemului inferior triunghiular $Ly = b$ (se modifică procedura de rezolvare a sistemelor inferior triunghiulare).

- Folosindu-se una din bibliotecile menţionate în pagina laboratorului, să se calculeze şi să se afişeze soluţia sistemului $Ax = b$ şi inversa matricei A, A^{-1}_{lib}. Să se afişeze următoarele norme:

$$||x_{LU} - x_{lib}||_2$$

$$||x_{LU} - A^{-1}_{lib}b^{init}||_2.$$

- Folosind descompunerea LU descrisă mai jos, să se calculeze inversa matricei A (când este posibil), A_{LU}^{-1}. Utilizând matricea inversăcalculată folosind funcţia corespunzătoare din bibliotecă, A_{lib}^{-1}, să se afişeze:

$$\|A_{LU}^{-1} - A_{lib}^{-1}\|_1$$

$$C \in \mathbb{R}^{n\times n}\ ,\ \|C\|_1 = \max\left\{\sum_{i=1}^{n} |c_{ij}|\ ;\ j = 1, 2, ..., n\right\}$$

Scrieţi programul astfel încât să poată fi testat (şi) pe sisteme de dimensiuni mai mari ca 100.

Bonus 25 pt.: Să se calculeze descompunerea LU a matricei A cu următoarele restricţii de memorare: să se aloce o singură matrice în program pentru memorarea matricei A, matrice care va rămâne neschimbată (se va folosi pentru calculul descompunerii LU). Pentru calculul matricelor L şi U se vor folosi doi vectori de dimensiune $n(n+1)/2$ în care se vor memora elementele din partea inferior triunghiulară, respectiv superior triunghiulară a matricelor L şi U. Cu acest tip nou de memorare a datelor, să se calculeze soluţia sistemului liniar $Ax = b$, x_{LU}.

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 $v \in \mathbb{R}$, **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 avem descompunerea LU, rezolvarea sistemului $Ax = b$ se reduce la rezolvarea a două sisteme triunghiulare:

$$Ax = b \longleftrightarrow LUx = b \longleftrightarrow \left\{\begin{array}{rcl} Ly & = & b, \\ Ux & = & y. \end{array}\right.$$

Se rezolvă întâi sistemul inferior triunghiular $Ly = b$. Apoi se rezolvă sistemul superior triunghiular $Ux = y$ unde y este soluţia obţinută din rezolvarea sistemului precedent, $Ly = b$. Vectorul x rezultat din rezolvarea sistemului $Ux = y$ este şi soluţia sistemului iniţial $Ax = b$.

3. Pentru calculul $\|A^{init}x_{LU} - b^{init}\|_2$ avem:

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

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

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

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 matricelor triunghiulare este dat de formula:

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

Prin urmare pentru rezolvarea sistemului (1) vom presupunem 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:

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

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:

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

Acest algoritm poartă numele de *metoda substituţiei directe*. Pentru matricele 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:

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

Pentru matricele 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 LU

Dacă $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ este o matrice reală pătratică de dimensiune n astfel încât $\det A_k \neq 0$, $\forall k = 1,\ldots,n$, unde $A_k = (a_{ij})_{i,j=1,\ldots,k}$. Atunci, se ştie că există o unică matrice inferior triunghiulară $L = (l_{ij})_{i,j=1,\ldots,n}$ cu $l_{ii} = 1, i = 1,\ldots,n$ şi o unică matrice superior triunghiulară $U = (u_{ij})_{i,j=1,\ldots,n}$ astfel încât

$$A = LU \tag{8}$$

Algoritmul Doolittle de calcul al descompunerii LU

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

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

Se determină elementele liniei p ale matricei U , $u_{pi}, i = p,\ldots,n$, şi elementele coloanei p ale matricei L, $l_{pp} = 1$, $l_{ip}, i = p+1,\ldots,n$.

Sunt cunoscute de la paşii anteriori elementele primelor $p-1$ coloane din L (elemente l_{jk} cu $k = 1,\ldots,p-1$) şi elementele primelor $p-1$ linii din U (elemente u_{ki} cu $k = 1,\ldots,p-1$).

Calculul elementelor liniei p din matricea U : u_{pi} $i = p,\ldots,n$
$(u_{pi} = 0, i = 1,\ldots,p-1)$

$$\begin{aligned} a_{pi} &= \sum_{k=1}^{n} l_{pk}u_{ki} = (l_{pk} = 0, k = p+1,\ldots,n) = \\ &= \sum_{k=1}^{p} l_{pk}u_{ki} = l_{pp}u_{pi} + \sum_{k=1}^{p-1} l_{pk}u_{ki} \end{aligned}$$

Ştiind că $l_{pp} = 1$, putem calcula elementele liniei p a matricei U astfel:

$$u_{pi} = a_{pi} - \sum_{k=1}^{p-1} l_{pk}u_{ki}\ ,\ i = p,\ldots,n\ ,\ u_{pi} = 0\ i = 1,\ldots,p-1. \tag{9}$$

(u_{ki}, $k = 1,\ldots,p-1$ sunt elemente de pe linii ale matricei U calculate în paşii anteriori iar l_{pk}, $k = 1,\ldots,p-1$, sunt elemente cunoscute de pe coloanele din L, fiind calculate la paşii anteriori)

Calculul elementelor coloanei p din matricea L: $l_{ip}\ ,\ i = p+1,\ldots,n$ $(l_{pp} = 1, l_{ip} = 0\ ,\ i = 1,\ldots,p-1)$

$$\begin{aligned} a_{ip} &= \sum_{k=1}^{n} l_{ik}u_{kp} = (u_{kp} = 0, k = p+1,\ldots,n, u_{ii} = 1) = \\ &= \sum_{k=1}^{p} l_{ik}u_{kp} = l_{ip}u_{pp} + \sum_{k=1}^{p-1} l_{ik}u_{kp} \end{aligned}$$

Dacă $u_{pp} \neq 0$, putem calcula l_{ip} astfel:

$$l_{ip} = \frac{a_{ip} - \displaystyle\sum_{k=1}^{p-1} l_{ik}u_{kp}}{u_{pp}}\ ,\quad i = p+1,\ldots,n \tag{10}$$

(elementele l_{ik}, $k = 1,\ldots,p-1$ sunt elemente de pe coloane ale matricei L calculate la paşii anteriori iar u_{kp}, $k = 1,\ldots,p-1$, sunt elemente de pe linii deja cunoscute ale matricei U, fiind calculate anterior)

Dacă $u_{pp} = 0$, calculele se opresc, în acest caz descompunerea LU nu poate fi calculată, matricea A are un minor nul, $\det A_p = 0$.

Observaţie:

Pentru memorarea matricelor L şi U se poate folosi matricea A iniţială. Vom folosi partea superior triunghiulară a matricei A pentru a memora elementele nenule u_{ij} ale matricei U cu $i = 1,2,\ldots,n$, $j = i,\ldots,n$ iar partea strict inferior triunghiulară a matricei A pentru a memora elementele l_{ij} ale matricei L , $i = 2,\ldots,n$, $j = 1,2,\ldots,i-1$. Se observă că nu am memorat nicăieri elementele $l_{ii} = 1\ \forall i = 1,\ldots,n$. Vom ţine cont de acest lucru la rezolvarea sistemului inferior triunghiular. Calculele (9) şi (10) se pot face direct în matricea A.

Calculul inversei unei matrice

Dacă se cunoaşte o metodă de rezolvare a sistemelor liniare (în cazul de faţă se va folosi descompunerea LU), coloanele matricei inverse se pot calcula rezolvând, pe rând, n sisteme liniare.

Coloana j $(j = 1, \ldots, n)$ a matricei A^{-1} se aproximează rezolvând sistemul liniar:

$$Ax = e_j \quad , \quad e_j = (0, \ldots, 0, 1, 0, \ldots, 0)^T$$

În vectorul e_j, valoarea 1 este pe poziţia j.

Presupunând că avem decompunerea LU pentru matricea A, calculul coloanei j din matricea A_{LU}^{-1} se face rezolvând cele două sisteme triunghiulare:

$$Ly = e_j \ \rightarrow \text{soluţia } y_j^* \quad , \quad Ux = y_j^* \rightarrow \text{soluţia } x_j^*.$$

Soluţia x_j^* este o aproximare a elementelor coloanei j a matricei A^{-1}.

Procedura de calcul a inversei este următoarea:

1. Se calculează descompunerea LU a matricei A, $A = LU$ (dacă se poate);
2. *for* $i = 1, \ldots, n$
   - 2.1 Se calculează soluţia y_j^* a sistemului inferior triunghiular $Ly = e_j = (0, \ldots, 0, 1, 0, \ldots, 0)^T$;
   - 2.2 Se calculează soluţia x_j^* a sistemului superior triunghiular $Ux = y_j^*$;
   - 2.3 Soluţia obţinută la pasul precedent, x_j^*, se memorează în coloana j a matricei A_{LU}^{-1}.

Procedura de mai sus detaliază, în fapt, rezolvarea ecuaţiei matriceale:

$$AX = I_n \quad , \quad X \in \mathbb{R}^{n \times n} \quad , \quad I_n = \text{matricea unitate de dimensiune } n$$

Exemplu

$$A = \begin{pmatrix} 2.5 & 2 & 2 \\ 5 & 6 & 5 \\ 5 & 6 & 6.5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2.5 & 2 & 2 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 1.5 \end{pmatrix}$$

Soluţia sistemului:

$$\begin{pmatrix} 2.5 & 2 & 2 \\ 5 & 6 & 5 \\ 5 & 6 & 6.5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} \quad \text{este} \quad \begin{pmatrix} 1.6 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Inversa matricei A este:

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 6/5 & -2/15 & -4/15 \\ -1 & 5/6 & -1/3 \\ 0 & -2/3 & 2/3 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1.2 & -0.1333 & -0.2666 \\ -1 & 0.8333 & -0.3333 \\ 0 & -0.6666 & 0.6666 \end{pmatrix}$$