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 descompunerea LL^T (descompunerea/factorizarea Cholesky) a matricii A ($A = LL^T$), unde L este matrice inferior triunghiulară cu elementele de pe diagonală pozitive ($l_{ii} > 0, \forall i$) ;

- Folosind această descompunere, să se calculeze determinantul matricii A ($\det A = \det L \det L^T$) ;

- Utilizând descompunerea Cholesky calculată mai sus şi metodele substituţiei directe şi inverse, să se calculeze x_{Chol}, o soluţie aproximativă a 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.

- 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 $Ax = b$;

- După ce aţi calculat descompunerea LL^T a matricei simetrice A, calculaţi o aproximare a inversei acestei matrice, A^{-1}_{Chol}. De asemenea, să se calculze o aproximare a inversei, folosind biblioteca, A^{-1}_{bibl} . Să se afişeze:

  $$||A^{-1}_{Chol} - A^{-1}_{bibl}||$$

  Folosiţi orice normă matriceală este implementată în bibliotecă.

- Implementaţi (şi folosiţi) proceduri de citire a vectorilor şi a matricelor de la tastatură, din fişier şi automat (folosind funcţia *rand*) şi proceduri de afişare a vectorilor şi a matricelor (pe ecran şi în fişier).

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

- *Restricţie*: în program să se aloce doar o matrice, A şi un vector d în care se va memora diagonala matricei iniţiale A. Descompunerea LL^T se va calcula direct în partea inferior triunghiulară a matricei A. Cu acest tip de memorare se pierde diagonala matricii A, prin urmare va trebui memorată iniţial şi în vectorul $d, d_i = a_{ii}^{init}$.
- Ca date de intrare, introduceţi o matrice care să fie doar simetrică. Dacă matricea nu este pozitiv definită, algoritmul nu va putea calcula descompunerea Cholesky. Programul se opreşte in această situaţie.

Bonus 25 pt.: Să se calculeze descompunerea Cholesky a unei matrice A simetrice, cu următoarele restricţii de memorare: să se folosească pentru memorarea matricelor A şi L doi vectori de dimensiune $n(n+1)/2$. În aceşti vectori se vor memora elementele din partea inferior triunghiulară a matricelor respective. În cazul matricei A, celelalte elemente vor putea fi accesate folosind relaţia de simetrie. Cu acest tip nou de memorare a datelor, să se calculeze soluţia sistemului liniar $Ax = b$, x_{Chol}.

Observaţii

1. Precizia calculelor ϵ, este un număr pozitiv de forma $\epsilon = 10^{-m}$ (cu $m = 5, 6, ..., 10, ...$ 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 printf(" nu se poate face impartirea");

   ci vom scrie în program:

   if($fabs(v) > eps$ *)* $s = 1/v$*;*

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

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

$$Ax = b \longleftrightarrow LL^T x = b \longleftrightarrow \begin{cases} Ly & = & b, \\ L^T x & = & y. \end{cases}$$

Se rezolvă întâi sistemul inferior triunghiular $Ly = b$. Apoi se rezolvă sistemul superior triunghiular $L^T x = y$ unde y este soluţia obţinută la rezolvarea sistemului precedent $Ly = b$. 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 Cholesky: va avea în partea inferior triunghiulară elementele matricii L, iar elementele matricei iniţiale $A = A^{init}$ se găsesc în partea strict superior triunghiulară a matricii A iar diagonala în vectorul d.

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 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:

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

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*.

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:

$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}} \tag{4}$$

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:

$$x_i = \frac{\left(b_i - \sum\limits_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j\right)}{a_{ii}} \quad , \quad i = n, n-1, \ldots, 2, 1 \tag{5}$$

Descompunerea Cholesky (LL^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 matrice care satisface următoarea relaţie:

$$(Ax, x)_{\mathbf{R^n}} > 0 \quad , \quad \forall x \in \mathbf{R}^n \ , \ x \neq 0 \tag{6}$$

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

$$A = LL^T$$

unde $L \in \mathbf{R}^{n\times n}$ este matrice inferior triunghiulară iar L^T este transpusa ei (matrice superior triunghiulară).

Algoritmul de calcul al descompunerii LL^T (metoda Cholesky)

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

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

La acest pas trebuie determinate elementele coloanei p ale matricii L , $l_{ip}, i = p, \ldots, n$ ($l_{ip} = 0, i = 1, \ldots, p-1$). Întâi se calculează elementul diagonal, l_{pp} şi apoi restul elementelor coloanei p, $l_{ip}, i = p+1, \ldots, n$.

Sunt cunoscute de la paşii anteriori elementele primelor $p-1$ coloane din L (elemente de forma l_{ij} cu $j = 1, \ldots, p-1$, $\forall i$)

Calculul elementului diagonal l_{pp} *:*

Folosind relaţia $A = LL^T$:

$$\begin{aligned} a_{pp} &= (LL^T)_{pp} = \sum_{j=1}^{n} l_{pj} l^T_{jp} = (l_{pj} = 0, j = p+1, \ldots, n \, , \, l^T_{jp} = l_{pj}) = \\ &= \sum_{j=1}^{p-1} l^2_{pj} + l^2_{pp} \end{aligned}$$

Prin urmare:

$$a_{pp} = \sum_{j=1}^{p-1} l^2_{pj} + l^2_{pp}$$

În această relaţie singurul element necunoscut este l_{pp} deoarece elementele $l_{pj}, j = 1, \ldots, p-1$ sunt elemente de pe coloane ale matricii L calculate la paşii anteriori. Deducem:

$$l_{pp} = \pm \sqrt{a_{pp} - \sum_{j=1}^{p-1} l^2_{pj}} \tag{7}$$

Dacă valoarea de sub radical este negativă algoritmul se opreşte, descompunerea Cholesky nu poate fi calculată. Acest lucru se poate întâmpla dacă matricea A nu este pozitiv definită.

Calculul elementelor l_{ip} , $i = p+1, \ldots, n$

Folosim, din nou, relaţia $A = LL^T$:

$$\begin{aligned} a_{ip} &= (LL^T)_{ip} = \sum_{j=1}^{n} l_{ij} l^T_{jp} = (l^T_{jp} = l_{pj}, l_{pj} = 0, j = p+1, \ldots, n) = \\ &= \sum_{j=1}^{p-1} l_{ij} l_{pj} + l_{ip} l_{pp} \end{aligned}$$

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

$$l_{ip} = \left(a_{ip} - \sum_{j=1}^{p-1} l_{ij} l_{pj} \right) \Big/ l_{pp} \ , \ i = p+1, \ldots, n \tag{8}$$

(elementele l_{ij} şi l_{pj} $j = 1, \ldots, p-1$ sunt elemente de pe coloane ale matricii L calculate la paşii anteriori, iar l_{pp} tocmai a fost calculat în pasul p)

Dacă avem un element $l_{pp} = 0$, algoritmul se opreşte, descompunerea LL^T nu poate fi calculată. Pentru matricile pozitiv definite $l_{pp} \neq 0, \forall p$.

Observaţie:

Pentru memorarea elementelor nenule ale matricii L se poate folosi partea inferior triunghiulară a matricii A iniţială:

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

Se observă că în acest fel se pierd elementele diagonale ale matricii inţiale a_{ii}. Din acest motiv, se foloseşte vectorul d pentru a memora la început elemntele diagonalei matricii A:

$$d_i = a_{ii} \quad , \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

Calculele (7) şi (8) se pot face direct în matricea A.

Cu acest tip de memorare, trebuie folosite cu atenţie metodele substituţiei directe şi inverse de calcul a soluţiilor sistemelor triunghiulare:

$$Ly = b \quad \text{şi} \quad L^T x = y.$$

De asemenea, în calculul vectorului $A^{init} x_{Chol}$ formulele trebuie adaptate, noului tip de memorare pentru matricea A.

Calculul unei aproximări a inversei unei matrice

Dacă se cunoaşte o metodă numerică de rezolvarea a sistemelor liniare (în cazul de faţă se va folosi descompunerea Cholesky a matricei), coloanele matricei inverse se pot aproxima rezolvând n sisteme liniare.

Coloana j a matricei A^{-1} se aproximează rezolvând sistemul liniar:

$$Ax = e_j \ , \ j = 1, 2, \ldots, n,$$
$$e_j = (0, \ldots, 1, 0 \ldots, 0)^T \quad ,1 \text{ este pe poziţia } j \text{ în vectorul } e_j$$

Procedura de calcul a matricei A_{Chol}^{-1} este următoarea:

- se calculează factorizarea Cholesky a matricei A, $A = LL^T$;
- for $j = 1, \ldots, n$
  1. $b = e_j$;
  2. se rezolvă sistemul inferior triunghiular $Ly = b$, se obţine soluţia y^*
  3. se rezolvă sistemul superior triunghiular $L^T x = y^*$, se obţine soluţia x^*
  4. se memoreză x^* în coloana j a matricei A_{Chol}^{-1}

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

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

Exemplu

$$A = \begin{pmatrix} 2.25 & 3 & 3 \\ 3 & 9.0625 & 13 \\ 3 & 13 & 24 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.5 & 0 & 0 \\ 2 & 2.25 & 0 \\ 2 & 4 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1.5 & 2 & 2 \\ 0 & 2.25 & 4 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\text{Pentru } b = \begin{pmatrix} 9 \\ 35.0625 \\ 61 \end{pmatrix} \text{ soluţia sistemului este } x^* = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{776}{729} & -\frac{176}{243} & \frac{7}{27} \\ -\frac{176}{243} & \frac{80}{81} & -\frac{4}{9} \\ \frac{7}{27} & -\frac{4}{9} & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1.0645 & -0.7243 & 0.2593 \\ -0.7243 & 0.9877 & -0.4444 \\ 0.2593 & -0.4444 & 0.2500 \end{pmatrix}$$