

Métodos Numéricos

Factorización de Cholesky y Solución a la Ecuación del Calor

Tarea 4

14 de septiembre de 2020

Erika Rivadeneira Pérez
erika.rivadeneira@cimat.mx
Matemáticas Aplicadas - CIMAT

1. Resumen

En el presente reporte se expone la factorización de Cholesky, factorización LDL^T y una factorización LL^T modificada para matrices tridiagonales. Además, se realiza un análisis de la calidad de las soluciones obtenidas al resolver sistemas de ecuaciones tridiagonales provenientes de la ecuación del calor utilizando métodos directos.

2. Introducción

En la solución de sistemas de ecuaciones lineales, algunas de las matrices asociadas pueden tener una estructura que es posible aprovechar para mejorar la eficiencia del método de solución. La complejidad de los algoritmos puede variar dependiendo de la estructura de la matriz y en algunos casos, representa grandes diferencias al momento de realizar cálculos con ellas. Se busca utilizar métodos que permitan agilizar los cálculos y ser lo más eficiente posible en cuanto al uso de recursos.

Dado que muchos problemas requieren el uso de matrices de gran tamaño, es necesario encontrar métodos y procedimientos que faciliten su tratamiento y la solución de sistemas de ecuaciones asociadas. Para esto es necesario valerse de las propiedades que pueda tener una matriz, por ejemplo, evitar el almacenamiento de todos sus elementos al representarlas de una manera más simple. Como el caso de las Matrices Dispersas, las cuales son aquellas que poseen un alto porcentaje de sus elementos iguales a cero. Esta característica permite usar

estructuras especiales para almacenar únicamente los elementos diferentes de cero para reducir el uso de memoria y agilizar los cálculos, lo que hace que la información relevante pueda almacenarse reduciendo la cantidad de memoria utilizada [1].

Se pretende analizar los resultados y el comportamiento de los métodos de factorización de Cholesky y LDL^T (método de Cholesky modificado). Finalmente, se resuelve la ecuación del calor a partir de estos métodos, debido a su peculiar estructura la cual será descrita en la siguiente sección.

3. Metodología

3.1. Factorización de Cholesky

Se busca factorizar la matriz A , simétrica y definida positiva, como el producto de dos matrices L y U siendo L una matriz triangular inferior y U , triangular superior, estableciendo la siguiente condición: $L(i, i) = U(i, i)$ para $i = 1, \dots, n$. Es decir, se transforma la matriz A en $A = LU \Rightarrow A = LL^T$. Viéndolo matricialmente:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots \\ a_{12} & a_{22} & a_{23} & \dots \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & \dots \\ l_{21} & l_{22} & 0 & \dots \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} & \dots \\ 0 & l_{22} & l_{32} & \dots \\ 0 & 0 & l_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix}$$

donde

$$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^i l_{ik} l_{i-1k}}{l_{ii}}$$

$$l_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2}$$

Después, de obtener la matriz L , buscando solucionar el sistema de ecuaciones $Ax = b$, se resuelve el siguiente problema:

$$Lz = b$$

$$Ux = z$$

Estos dos sistemas pueden resolverse con sustitución hacia adelante y hacia atrás respectivamente [2].

3.1.1. Cholesky para matrices tridiagonales

Resulta que una matriz definida positiva tridiagonal simétrica

$$A = \begin{bmatrix} d_1 & a_2 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ a_2 & d_2 & a_3 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & a_3 & d_3 & a_4 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & a_4 & d_4 & a_5 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & a_5 & d_5 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots \end{bmatrix}$$

tiene una factorización de Cholesky $A = LL^T$ con una bidiagonal inferior L :

$$L = \begin{bmatrix} l_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ h_2 & l_2 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & h_3 & l_3 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & h_4 & l_4 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & h_5 & l_5 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots \end{bmatrix}$$

Para ver esto, equiparamos coeficientes

$$\begin{aligned} (1, 1) : d_1 &= l_1^2 & \Rightarrow l_1 &= \sqrt{d_1} \\ (2, 1) : a_2 &= h_2 l_1 & \Rightarrow h_2 &= a_2/l_1 \\ (2, 2) : d_2 &= h_2^2 + l_2^2 & \Rightarrow l_2 &= \sqrt{d_2 - h_2^2} \\ (3, 2) : a_3 &= h_3 l_2 & \Rightarrow h_3 &= a_3/l_2 \\ (3, 3) : d_3 &= h_3^2 + l_3^2 & \Rightarrow l_3 &= \sqrt{d_3 - h_3^2} \\ & \vdots & & \end{aligned}$$

Así, el algoritmo de factorización $A = LL^T$ para una matriz tridiagonal es

$$\begin{aligned} l_i &= \sqrt{d_i - h_i^2} \\ h_i &= a_i/l_{i-1} \end{aligned}$$

para $i = 1, \dots, n$. (Haciendo $h_1 \equiv 0$).

3.2. Factorización LDL^T

Se busca factorizar la matriz A , la cual debe ser simétrica, como el producto de tres matrices LDL^T , siendo L y L^T matrices triangulares inferiores y superiores respectivamente y D una matriz diagonal con elementos positivos [3]. Matricialmente esta factorización se ve como

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots \\ a_{12} & a_{22} & a_{23} & \dots \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ l_{21} & 1 & 0 & \dots \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} d_{11} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & d_{22} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & d_{33} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & l_{21} & l_{31} & \dots \\ 0 & 1 & l_{32} & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix}$$

donde,

$$d_{ii} = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 d_{kk}$$

$$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} l_{jk} d_{kk}}{d_{ii}}$$

A partir de esta factorización se resuelve el sistema $Ly = b$ por sustitución hacia adelante, el sistema $Dz = y$ de forma inmediata (dado que D es una matriz diagonal) y por último $L^T x = z$ por sustitución hacia atrás.

3.3. Ecuación del Calor

La ecuación de calor se obtiene a partir de la ley de Fourier y del principio de conservación de la energía, ésta describe la variación de temperatura en un sistema. Esta ecuación se define como

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + Q = 0$$

$$K \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \right) + Q = 0 \quad (1)$$

donde Φ es la variación de la temperatura, K es la difusividad térmica (constante del material) y Q es una fuente de energía.

La ecuación (1) puede ser resuelta utilizando un esquema de diferencias finitas centradas. Tomando valores de la función a ambos lados del punto a partir de desarrollos en serie de Taylor, truncándolo en la segunda derivada. Así, para la primera derivada de $\Phi(x_i)$, con $h = \Delta x$ se tiene que

$$\Phi'(x_i) = \frac{\Phi(x_{i+1}) - \Phi(x_{i-1}))}{2\Delta x}$$

Por otro lado, para $\Phi''(x_i)$ tenemos

$$\Phi''(x_i) = \frac{\Phi(x_{i-1}) - 2\Phi(x_i) + \Phi(x_{i+1}))}{\Delta x^2} \quad (2)$$

Luego, sustituyendo (2) en (1) se obtiene

$$K \left(\frac{\Phi(x_{i-1}) - 2\Phi(x_i) + \Phi(x_{i+1}))}{\Delta x^2} \right) + Q = 0$$

Por lo tanto, es necesario discretizar una barra en n elementos que corresponde a $n + 1$ nodos

$$\Phi_0 == \Phi_1 == \Phi_2 == \dots == \Phi_{n-1} == \Phi_n$$

donde el primer nodo Φ_0 y el último nodo Φ_n corresponden a las condiciones de contorno Dirichlet (de temperatura). Como resultado se obtiene un sistema de ecuaciones de una matriz simétrica y definida positiva

$$\frac{K}{\Delta x} \begin{bmatrix} -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_0 \\ \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \vdots \\ \Phi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q\Delta x \\ Q\Delta x \\ Q\Delta x \\ \vdots \\ Q\Delta x \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \vdots \\ \Phi_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{Q(\Delta x)^2}{K} - \Phi_0 \\ \frac{Q(\Delta x)^2}{K} \\ \frac{Q(\Delta x)^2}{K} \\ \vdots \\ \frac{Q(\Delta x)^2}{K} - \Phi_n \end{bmatrix}$$

Este sistema puede ser resuelto por los métodos de factorización mencionados anteriormente y al ser $\Phi''(x_i)$ una matriz tridiagonal se puede colocar la franja de la diagonal como columnas en una matriz con el objetivo de evitar el almacenamiento de todos sus elementos al representarlas de una manera más simple para reducir el uso de memoria y agilizar los cálculos al resolver este sistema. Por ejemplo, se puede considerar la siguiente factorización

$$\begin{bmatrix} 0 & 2 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ -1 & 2 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & l_{11} \\ l_{21} & l_{22} \\ l_{32} & l_{33} \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_{12} \\ 1 & u_{23} \\ 1 & u_{34} \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \end{bmatrix} \quad (3)$$

donde $l_{ij}, u_{ij}, i, j = 1, \dots, n$ son las entradas de la matriz triangular inferior L y la matriz triangular superior U respectivamente resultantes de la factorización.

4. Implementación

A continuación se presentan los algoritmos para implementar el método de factorización de Cholesky y la factorización LDL^T .

Algorithm 1: Factorización de Cholesky

```
Result: A /* matriz triangular inferior */
n,n=shape(A);/* extraemos la dimensión de la matriz */
for k in (1,n-1,1) do
    A(k,k)=sqrt(A(k,k));
    A(k+1:n,k)=A(k+1:n,k)/A(k,k);
    for j in (k+1,n,1) do
        | A(j:n,j)=A(j:n,j)-A(j:n,k)*A(j,k)
    end
end
A(n,n)=sqrt(A(n,n)) ;
return A /* Devolvemos la matriz triangular inferior */
```

En donde, la entrada para el algoritmo 1 es la matriz A que se desea factorizar, la cual debe ser simétrica y definida positiva. Por otro lado, para el algoritmo 2 la entrada es una matriz tridiagonal A a factorizar, la cual igualmente debe ser simétrica y definida positiva. Por último, la entrada del algoritmo 3 es la matriz A a factorizar la cual solamente debe ser simétrica.

Algorithm 2: Factorización de Cholesky para matrices tridiagonales

```
Result: L /* matriz triangular inferior resultante de la
factorización */
n,n=shape(A);/* extraemos la dimensión de la matriz */
l = np.zeros((n,1));
h = np.zeros((n,1));
l[1] = sqrt(d[1]);
for i in (2,n,1) do
    | h[i]=A[i]/l[i-1];
    | l[i]=sqrt(d[i]-h[i]**2)
end
return L=concatenate(l,h)/* L en una matriz de 2 columnas */
```

Algorithm 3: Factorización $A = LDL^T$

```
Result: L,D /* matriz triangular inferior y matriz diagonal
*/
Input: A
n,n=shape(A);/* extraemos la dimensión de la matriz */
L = zeros(n, n) /* Inicializamos la matriz L */
D = zeros(n, 1) /* Inicializamos la matriz D */
for  $i$  in  $(1,n,1)$  do
    sum = A[i,i];
    for  $j$  in  $(1,i-1,1)$  do
        sum-=L[i,j]**2*D[j];
        D[i]=sum
    end
    for  $j$  in  $(i+1,n,1)$  do
        sum=A[j,i];
        for  $k$  in  $(1,i-1,1)$  do
            sum-=L[j,k]*L[i,k]*D[k];
            L[j,i]=sum/D[i]
        end
    end
end
return L, D /* Devolvemos las matrices resultantes L y D */
```

5. Resultados

Se consideraron matrices $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, con

$$A_{i,j} = \begin{cases} 2, & \text{if } i = j \\ -1, & \text{if } i = j - 1 \vee i = j + 1 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4)$$

5.1. Factorización LDL^T

Considerando el sistema (4), para $n=4$, la factorización de

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

en $A = LDL^T$ resultó con

$$\begin{aligned} L &= \begin{bmatrix} 1. & 0. & 0. \\ -0.5 & 1. & 0. \\ 0. & -0.66666667 & 1. \end{bmatrix} \\ D &= \begin{bmatrix} 2. & 0. & 0. \end{bmatrix} \end{aligned}$$

```

      [ 0.      1.5      0.      ]
      [ 0.      0.      1.33333333]]
LT= [[ 1.      -0.5      0.      ]
      [ 0.      1.      -0.66666667]
      [ 0.      0.      1.      ]]

```

- Verificación:

```

A=LDLT= [[ 2. -1.  0.]
          [-1.  2. -1.]
          [ 0. -1.  2.]]

```

Además, se probó la factorización $A = LDL^T$ para matrices del tipo (4) con $n = 50$ y $n = 100$, cuyos resultados se encuentran almacenados en archivos *txt*.

5.2. Solución de la ecuación del calor

- Solución de la ecuación del calor considerando $\{Q = 3, K = 5, \Phi_0 = 10, \Phi_n = 20, n = 4, L = 1\}$, donde L es la longitud de la barra.

```

n = 4
Solución: [[12.55625 15.075 17.55625]]
Error: 3.826905359602982e-15

```

- Solución de la ecuación del calor considerando $\{Q = 3, K = 5, \Phi_0 = 10, \Phi_n = 20, n = 100, L = 1\}$

```

n = 100
Solución:
[[10.10297 10.20588 10.30873 10.41152 10.51425 10.61692 10.71953 10.82208
 10.92457 11.027 11.12937 11.23168 11.33393 11.43612 11.53825 11.64032
 11.74233 11.84428 11.94617 12.048 12.14977 12.25148 12.35313 12.45472
 12.55625 12.65772 12.75913 12.86048 12.96177 13.063 13.16417 13.26528
 13.36633 13.46732 13.56825 13.66912 13.76993 13.87068 13.97137 14.072
 14.17257 14.27308 14.37353 14.47392 14.57425 14.67452 14.77473 14.87488
 14.97497 15.075 15.17497 15.27488 15.37473 15.47452 15.57425 15.67392
 15.77353 15.87308 15.97257 16.072 16.17137 16.27068 16.36993 16.46912
 16.56825 16.66732 16.76633 16.86528 16.96417 17.063 17.16177 17.26048
 17.35913 17.45772 17.55625 17.65472 17.75313 17.85148 17.94977 18.048
 18.14617 18.24428 18.34233 18.44032 18.53825 18.63612 18.73393 18.83168
 18.92937 19.027 19.12457 19.22208 19.31953 19.41692 19.51425 19.61152
 19.70873 19.80588 19.90297]]
Error: 3.341229188650645e-14

```

En la figura (1) se puede observar la variación de temperatura en una barra de longitud 1 la cual está dividida en 101 nodos. Los colores más oscuros representan la parte menos caliente de la barra. Las condiciones Dirichlet son $\Phi_0 = 10$

y $\Phi_n = 20$. Luego, en el nodo cero la temperatura es la más baja ($\Phi_0 = 10$) mientras que en el nodo 101 se tiene la temperatura más alta ($\Phi_{100} = 20$).

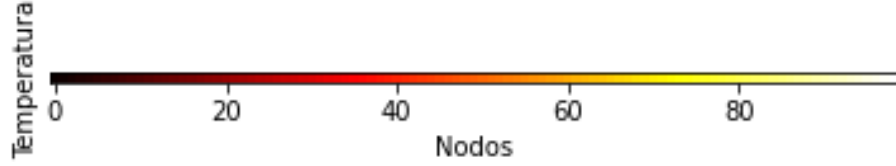


Figura 1: Variación de temperatura en 101 nodos

Por otro lado, en la figura (2) se aprecia la temperatura en el nodo central Φ vs. la cantidad de nodos utilizados, en concreto se consideró $n = \{4, 10, 30, 50, 70, 100\}$ con $n+1$ nodos. Este gráfico muestra la convergencia del método, donde utilizando un número pequeño de nodos ya se llega a tener convergencia. Esto también se puede apreciar en la tabla (1) donde también se muestra el error= $\|Ax - b\|$ de cada Φ , el cual es muy cercano a 0 ó 0.

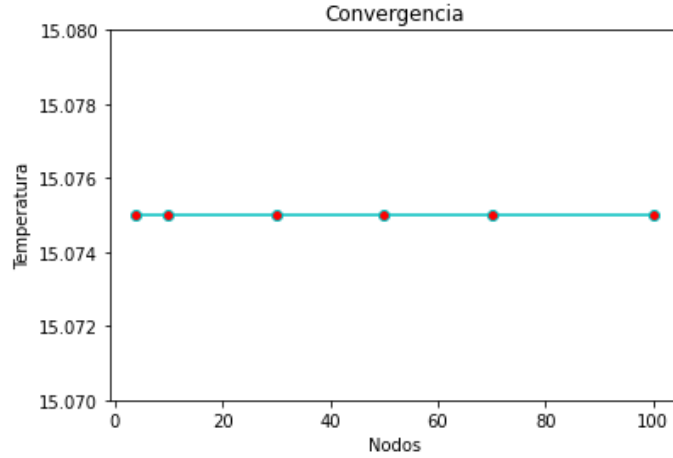


Figura 2: Variación de temperatura Φ del nodo central vs. número de elementos de la barra

N	Solución (Φ) (nodo central)	Error
4	15.075000000000001	1.7763568394002505e-15
10	15.075	0.0
30	15.0750000000000056	5.684341886080802e-14
50	15.0750000000000045	4.618527782440651e-14
70	15.0749999999999863	1.3677947663381929e-13

Table 1 continued from previous page

N	Solución (Φ) (nodo central)	Error
100	15.074999999999786	2.1316282072803006e-13

Cuadro 1: Resultados de nodos centrales

Por último, para la figura (3) se utilizó la configuración $\{Q = 3, K = 5, \Phi_0 = 10, \Phi_n = 20, n = 4, L = 1\}$ para resolver la ecuación del calor. En esta figura se muestran los valores de cada Φ vs. el número de nodo.

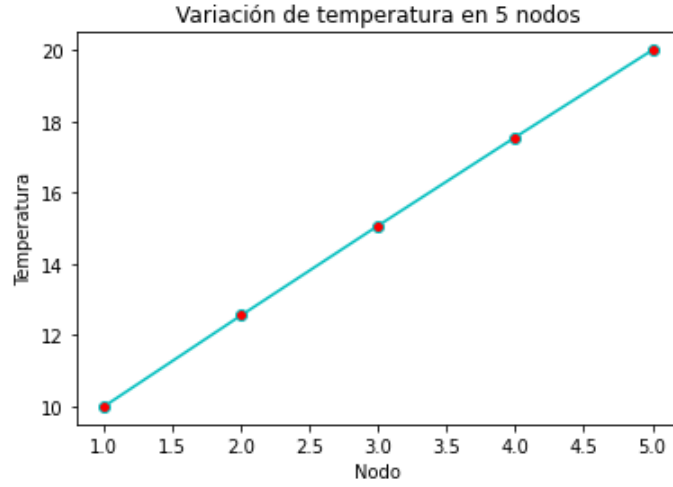


Figura 3: Valores de los nodos Φ vs. número de nodo considerando $\{Q = 3, K = 5, \Phi_0 = 10, \Phi_n = 20, n = 4, L = 1\}$

6. Discusión

En (4) se describe una matriz tridiagonal que además es simétrica y definida positiva. Para resolver este sistema se pueden utilizar tanto el método de factorización LL^T como LDL^T . La desventaja del método de factorización de Cholesky es que está restringida a matrices que tengan simetría y que además sean definidas positivas, pero para la factorización LDL^T se requiere que la matriz solamente contenga simetría. Por otro lado, es preferible utilizar un método de factorización modificado para matrices tridiagonales ya que (4) es también tridiagonal, esto debido a que se obvia el gastar memoria al trabajar con la matriz tridiagonal en sí, debido que el resto de los elementos de la matriz que no son de las tres diagonales es cero [4], es decir, para una matriz $n \times n$ se sabe que tiene n^2 elementos de los cuales $n^2 - 3n + 2$ son ceros, por lo que solo se opera con $3n - 2$ elementos de n^2 . En sí, se ahorra aproximadamente 90 % de memoria al almacenar únicamente los elementos de las diagonales. Por otro

lado, para matrices completas, la complejidad computacional de este algoritmo es de orden $O(n^3)$ pero dependiendo de la estructura de la matriz este tiempo se puede reducir a $O(\eta(L))$, con L resultante de la factorización LL^T . Por otro lado, las matrices L y U de la descomposición de (4) tienen las características mostradas en el sistema (3).

7. Conclusiones

La factorización LDL^T no está restringida a matrices definidas positivas, así que se puede utilizar este método para una mayor cantidad de matrices que la descomposición LL^T . Por otro lado, la figura (2) y la tabla (1) muestran que se obtuvo convergencia inmediata de las soluciones de la ecuación del calor al considerar distintos números de nodos. Finalmente, se concluye que al considerar matrices tridiagonales, como el sistema (4), con dimensión muy grande, es preferible hacer uso de un método modificado de factorización como el método de Cholesky para matrices tridiagonales, esto para evitar el uso de mucha memoria y a la vez tener menor complejidad computacional en tiempo.

Referencias

- [1] D. Kinkaid and W. Cheney. Numerical Analysis: mathematics of scientific computing. 1991.
- [2] G. H. Golub and C. F. V. Loan. Matrix Computations. third edition, 1996.
- [3] R.L. Burden and J.D. Faires, Análisis Numérico, Grupo Editorial Iberoamérica, México 1985.
- [4] A. Quarteroni, P. Quarteroni, F. Riccardo Sacco, R. Sacco, and F. Saleri, Numerical Mathematics, ser. Texts in Applied Mathematics. Springer, 2007. [Online]. Available: <https://books.google.com.ec/books?id=Y7grAAAAYAAJMathematician105FinalGradeProject>