

Tema nr. 2

Date: n - dimensiunea sistemului, ϵ - precizia calculelor, matricea sistemului $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$ simetrică și 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 și metodele substituției directe și inverse, să se calculeze x_{Chol} , o soluție aproximativă a sistemului $Ax = b$;
- Să se verifice soluția calculată prin afișarea normei:

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

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

A^{init} este matricea inițială, $\|\cdot\|_2$ este norma euclidiană.

- Folosindu-se una din bibliotecile menționate în pagina laboratorului, să se calculeze și să se afișeze o descompunere LU a matricii A și soluția sistemului $Ax = b$;
- După ce ați calculat descompunerea LL^T a matricii simetrice A , calculați o aproximare a inversei acestei matrice, A_{Chol}^{-1} . De asemenea, să se calculeze o aproximare a inversei, folosind biblioteca, A_{bibl}^{-1} . Să se afișeze:

$$\|A_{Chol}^{-1} - A_{bibl}^{-1}\|$$

Folosiți orice normă matriceală este implementată în bibliotecă.

- Implementați (și folosiți) proceduri de citire a vectorilor și a matricelor de la tastatură, din fișier și automat (folosind funcția *rand*) și proceduri de afișare a vectorilor și a matricelor (pe ecran și în fișier).

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

- *Restricție:* în program să se aloce doar o matrice, A și un vector d în care se va memora diagonală matricei inițiale A . Descompunerea LL^T se va calcula direct în partea inferioară triunghiulară a matricei A . Cu acest tip de memorare se pierde diagonală matricei A , prin urmare va trebui memorată inițial și în vectorul $d, d_i = a_{ii}^{init}$.
- Ca date de intrare, introduceți o matrice care să fie doar simetrică. Dacă matricea nu este pozitiv definită, algoritmul nu va putea calcula descompunerea Cholesky. Programul se oprește în această situație.

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

Observații

1. Precizia calculelor ϵ , este un număr pozitiv de forma $\epsilon = 10^{-m}$ (cu $m = 5, 6, \dots, 10, \dots$ la alegere) care este dată de intrare în program (se citește de la tastatură sau din fișier) la fel ca și dimensiunea n a datelor. Acest număr se folosește atunci când testăm dacă o variabilă este 0 sau nu înaintea unei operații de împărțire. Dacă vrem să efectuăm operația de împărțire $s = 1/v$ unde $v \in \mathbf{R}, \mathbf{NU}$ 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 și 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 soluția obținută la rezolvarea sistemului precedent $Ly = b$. Vectorul x obținut la rezolvarea sistemului $L^T x = y$ este și soluția sistemului inițial $Ax = b$.

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

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

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

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

Atenție 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 matricii inițiale $A = A^{init}$ se găsesc în partea strict superior triunghiulară a matricii A iar diagonala în vectorul d .

Metodele substituției

Fie sistemul liniar:

$$Ax = b \quad (1)$$

unde matricea sistemului A este triunghiulară. Pentru a găsi soluția 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:

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

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

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

Necunoscutele x_1, x_2, \dots, x_n se deduc folosind ecuațiile sistemului de la prima către ultima.

Din prima ecuație se deduce x_1 :

$$x_1 = \frac{b_1}{a_{11}} \quad (2)$$

Din a doua ecuație, folosind (2), obținem x_2 :

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

Când ajungem la ecuația 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, \dots, x_{i-1} calculate anterior, avem:

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

Din ultima ecuație se deduce x_n astfel:

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

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

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

Acest algoritm poartă numele de *metoda substituției directe*.

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

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

Necunoscutele x_1, x_2, \dots, x_n se deduc pe rând, folosind ecuațiile sistemului de la ultima către prima.

Din ultima ecuație găsim x_n :

$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}} \quad (4)$$

Folosind valoarea lui x_n dedusă mai sus, din penultima ecuație a sistemului obținem:

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

Când ajungem la ecuația i :

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

se cunosc deja $x_{i+1}, x_{i+2}, \dots, x_n$ și deducem:

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

Din prima ecuație găsim valoarea lui x_1 :

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

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

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

Descompunerea Cholesky (LL^T)

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

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

Se numește matrice pozitiv definită matrice care satisface următoarea relație:

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

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 și simetrică. Algoritmul de calcul al matricii inferior triunghiulare L are n etape. La fiecare pas se determină câte o coloană din matricea L .

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

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

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

Calculul elementului diagonal l_{pp} :

Folosind relația $A = LL^T$:

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

Prin urmare:

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

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

$$l_{pp} = \pm \sqrt{a_{pp} - \sum_{j=1}^{p-1} l_{pj}^2} \quad (7)$$

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

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

Folosim, din nou, relația $A = LL^T$:

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

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

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

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

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

Observație:

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

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

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

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

Calculul (7) și (8) se pot face direct în matricea A .

Cu acest tip de memorare, trebuie folosite cu atenție metodele substituției directe și inverse de calcul a soluțiilor sistemelor triunghiulare:

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

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 cunoaște o metodă numerică de rezolvarea a sistemelor liniare (în cazul de față 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:

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

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

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

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

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

Exemplu

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

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

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