CURS #5

CONȚINUTUL CURSULUI #5:

II.1.8. Decompunerea *LU*.

Am văzut, în secțiunea precedentă, că mai multe sisteme cu aceeași matrice pot fi tratate simultan aplicând metode de tip Gauss. În multe situații nu toți termenii din membrul drept sunt disponibili de la început. Putem dori, de exemplu, să rezolvăm sistemele de ecuații

$$Ax^{(1)} = b^{(1)}, Ax^{(2)} = b^{(2)}, ..., Ax^{(n)} = b^{(n)}$$

unde $b^{(2)}$ este o funcție de $x^{(1)}$, $b^{(3)}$ este o funcție de $x^{(2)}$ ș.a.m.d. Prin urmare, rezolvarea lor simultană numai este posibilă, urmând ca algoritmii Gauss sa fie aplicați pentru fiecare sistem în parte, mărindu-se considerabil numărul de iterații. În asemenea situații ne vin în ajutor metode de factorizare.

Definiția (II.4.)

Se numește descompunere (sau factorizarea) LU a unei matrice $A = (a_{ij})_{i,j=\overline{1,n}} \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$, *scrierea matricei A ca produs de două matrice, una inferior triunghiulară, notată cu L și alta superior triunghiulară, notată cu U, i.e.*

$$A = LU \tag{1}$$

Propoziție (II.1.)

Fie $A = (a_{ij})_{i,j=\overline{1,n}} \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ *o matrice care admite descompunerea LU cu* $L = (\ell_{ij})_{i,j=\overline{1,n}} \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ *inferior triunghiulară,* $\ell_{kk} = 1$, $k = \overline{1,n}$ *și* $U = (u_{ij})_{i,j=\overline{1,n}} \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ *superior triunghiulară. Atunci descompunerea este unică.*

Odată calculate matricele L, U, sistemul $Ax = b$ se rezolvă imediat și anume:

$$Ax = b \Leftrightarrow LUx = b \Leftrightarrow \begin{cases} Ux =: y \\ Ly = b \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x = SubsDesc(U, y) \\ y = SubsAsc(L, b) \end{cases} \tag{2}$$

Teorema (II.1.)

Matricile se obțin prin metodele de eliminare Gauss și anume:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ m_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ m_{31} & m_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ m_{n1} & m_{n2} & m_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix} \tag{3}$$

unde:

$$m_{\ell k} = \frac{a_{\ell k}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, k = \overline{1, n-1}, l = \overline{k+1, n}$$

$$u_{kj} = a_{kj}^{(k)}, k = \overline{1, n-1}, j = \overline{k, n}, \ \ u_{n,n} = a_{n,n}^{(n-1)}$$

Notăm că $a_{kj}^{(k)}$ *reprezintă componenta cu indici kj a matricei A la etapa k, conform algoritmului de eliminare Gauss.*

Aplicând metoda Gauss cu sau fără pivotare, liniile vor fi permutate. Prin acest proces de schimbare a liniilor se obțin L și U astfel încât $A' = LU$, unde A' va fi matricea A cu liniile permutate.

Fie vectorul w vectorul cu pozițiile inițiale ale liniilor matricei A, i.e. $w = (1, 2, ..., n)$. În procesul de schimbare a liniilor vom reține aceste interschimbări în vectorul w. Mai exact, la interschimbarea a două linii $L_l \leftrightarrow L_k$ vom interschimba si elementele $w_l \leftrightarrow w_k$.

Deasemenea, în urma interschimbării de linii va fi afectată și matricea L și anume, se vor interschimba subliniile situate sub diagonala principală.

Vectorul b se va modifica după cum urmează:

$$b'_k = b_{w_k}, k = \overline{1,n}$$

În final, rezolvăm două sisteme triunghiulare $Ly = b', Ux = y$.

ALGORITM (Factorizarea LU cu GPP)

Date de intrare: $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$;
Date de ieșire: $L = (\ell_{ij})_{i,j=\overline{1,n}}, U, w$

1: Iniţializăm $L = I_n$; $w = 1 : n$;

2: for $k = 1 : n-1$ do

- Se calculează p astfel încât $|a_{pk}| = \max\limits_{j=\overline{k,n}} |a_{jk}|$;
- if $a_{pk} = 0$ then

  OUTPUT('A nu admite factorizarea LU')

  STOP

  endif
- if $p \neq k$ then

  $L_p \leftrightarrow L_k$ (schimbă linia p cu linia k în A);

  $w_p \leftrightarrow w_k$;

  if $k > 1$ then

  $\ell_{p,1:k-1} \leftrightarrow \ell_{k,1:k-1}$; (schimbă sublinii în L)

  endif

  endif
- for $\ell = k+1 : n$ do

  $\ell_{\ell k} = \dfrac{a_{\ell k}}{a_{kk}}$;

  $L_\ell \leftarrow L_\ell - \ell_{\ell k} L_k$;

  endfor

3: • if $a_{nn} = 0$ then

  OUTPUT('A nu admite factorizarea LU')

  STOP

  endif

4: $U = A$.

Exemplul # 1

Să se rezolve prin metoda LU cu GFP sistemul $Ax = b$, unde

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 1 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}, \; b = \begin{pmatrix} 8 \\ 4 \\ 10 \end{pmatrix}$$

Aplicăm metoda Gauss fără pivotare. Inițializăm vectorul $w = (1, 2, 3)$.
$k = 1$: Se caută primul $p = \overline{1,3}$ cu $|a_{p1}| \neq 0 \Rightarrow p = 2$. Interschimbăm $L_2 \leftrightarrow L_1$, deasemenea efectuăm aceeași interschimbare și în vectorul w, obținându-se astfel $w = (2, 1, 3)$. Se obține o matrice echivalentă cu A

$$A \sim \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

Multiplicatorii $m_{21} = \dfrac{a_{21}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} = 0, m_{31} = \dfrac{a_{31}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} = 3$. În urma transformării elementare $L_3 \leftarrow L_3 - 3L_1$ se obține

$$A \sim \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & -2 \end{pmatrix}$$

$k = 2$: Se caută primul $p = \overline{2,3}$ cu $|a_{p2}| \neq 0 \Rightarrow p = 2$. Multiplicatorii $m_{32} = \dfrac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} = \dfrac{2}{1} = 2$.

Se aplică în final transformarea $L_3 \leftarrow L_3 - 2L_2$

$$A \sim \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & -6 \end{pmatrix}$$

Obținem astfel matricele

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & -6 \end{pmatrix}$$

Obs.: Produsul matricelor L, U este:

$$LU = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & -6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} =: A'$$

Matricea A' este matricea A cu liniile permutate.

Pentru a afla soluția sistemului $Ax = b$ vom aplica schimbarea pozițiilor elementelor vectorului b după cum urmează:

$$b'_1 = b_{w_1}, b'_2 = b_{w_2} \Rightarrow b' = (4 \ 8 \ 10)^T$$

Sistemul $Ly = b'$ se rescrie

$$\begin{cases} y_1 = 4 \\ y_2 = 8 \\ 3y_1 + 2y_2 + y_3 = 10 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} y_1 = 4 \\ y_2 = 8 \\ y_3 = -18 \end{cases}$$

Din relația $Ux = y$ sau echivalent cu sistemul

$$\begin{cases} x_1 + x_3 = 4 \\ x_2 + 2x_3 = 8 \\ -6x_3 = -18 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = 1 \\ x_2 = 2 \\ x_3 = 3 \end{cases}$$

Exemplu #2 Să se rezolve prin metoda LU cu GPP sistemul de la Exemplul #1.

Răspuns: $L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & 1 \end{pmatrix}$, $U = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$, $w = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}$

Exemplul # 3 Fie sistemul

$$\begin{cases} x_2 + x_3 = 3 \\ 2x_1 + x_2 + 5x_3 = 5 \\ 4x_1 + 2x_2 + x_3 = 1 \end{cases}$$

Să se afle facorizarea LU a matricei asociate A asociate sistemului, utilizând metoda GPP. Să se afle soluția sistemului conform factorizării LU.

Scriem matricea asociată sistemului și vectorul termenilor liberi:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 5 \\ 4 & 2 & 1 \end{pmatrix}, \ b = \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Inițializăm matricea L și vectorul w:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \ w = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$k = 1$: Se calculează $|a_{p1}| = \max\limits_{j=\overline{1,3}} |a_{jk}| = max\{|a_{11}|, |a_{21}|, |a_{31}|\} = |a_{31}|$, rezultă $p = 3$. Se interschimbă atât liniile $L_1 \leftrightarrow L_3$, cât și elementele $w_1 \leftrightarrow w_3$. Se obține:

$$A \sim \begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 5 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \ w = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Se efectuează transformarea elementară $L_2 \leftarrow L_2 - \dfrac{2}{4}L_1$, în timp ce multiplicatorii $\ell_{21} = \dfrac{1}{2}, \ell_{31} = 0$. Se obțin matricile A și L actualizate:

$$A \sim \begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & \frac{9}{2} \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \ L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$k = 2$: Se calculează $|a_{p2}| = \max\limits_{j=\overline{2,3}} |a_{jk}| = max\{|a_{22}|, |a_{32}|\} = |a_{32}|$, rezultă $p = 3$. Se interschimbă atât liniile $L_2 \leftrightarrow L_3$, cât și elementele $w_2 \leftrightarrow w_3$. La acest pas, deoarece $k > 1$, se vor interschimba sublinii în matricea L și anume: $\ell_{p,1:k-1} \leftrightarrow \ell_{k,1:k-1}$ sau echivalent $\ell_{3,1} \leftrightarrow \ell_{2,1}$.

Se obține:

$$A \sim \begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & \frac{9}{2} \end{pmatrix}, L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 1 \end{pmatrix}, \; w = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Matricea $U = A = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & \frac{9}{2} \end{pmatrix}$

Cu ajutorul vectorului w se calculează elementele vectorului b' :

$$b' = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 5 \end{pmatrix}$$

Sistemul $Ly = b'$ se rescrie

$$\begin{cases} y_1 = 1 \\ y_2 = 3 \\ \frac{1}{2}y_1 + y_3 = 5 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} y_1 = 1 \\ y_2 = 3 \\ y_3 = \frac{9}{2} \end{cases}$$

Din relația $Ux = y$ sau echivalent cu sistemul

$$\begin{cases} 4x_1 + 2x_2 + x_3 = 1 \\ x_2 + x_3 = 3 \\ \frac{9}{2}x_3 = \frac{9}{2} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = -1 \\ x_2 = 2 \\ x_3 = 1 \end{cases}$$

II.1.9. Metoda Cholesky.

Definiția (II.5.)

Fie $A = (a_{ij})_{i,j=\overline{1,n}} \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$. Numim descompunerea Cholesky a matricei A, descompunerea de forma

$$A = LL^T \tag{4}$$

unde $L = (\ell_{ij})_{i,j=\overline{1,n}} \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ este o matrice inferior triunghiulară.

Definiția (II.6.)

Fie $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$.

a) *A se numește simetrică dacă și numai dacă $A^T = A$;*
b) *A se numește semipozitiv definită dacă și numai dacă $< Av, v > \geq 0, \forall v \in \mathbb{R}^n$;*
c) *A se numește pozitiv definită dacă și numai dacă $< Av, v >> 0, \forall v \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$.*

$< \cdot, \cdot >$ reprezintă produsul scalar pe $\mathbb{R}^n$ definit astfel: $< u, v >= \sum_{i=1}^{n} u_i v_i, \forall u, v \in \mathbb{R}^n$.

Teorema (II.2.)

Dacă $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ este o matrice simetrică și pozitiv definită, atunci descompunerea Cholesky există.

Obs.:Pentru a arăta că A este pozitiv definită se va folosi criteriul lui Sylvester și anume: Matricea simetrică $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ este pozitiv definită dacă și numai dacă toți minorii principali, i.e. $detA_k > 0, A_k = (a_{ij})_{i,j=\overline{1,k}}$.

Propoziție (II.2.)

Fie $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ simetrică și pozitiv definită. Dacă componentele $\ell_{kk}, k = \overline{1,n}$ de pe diagonala principală a matricei L din descompunerea Cholesky sunt strict pozitive, atunci descompunerea este unică.

CALCULUL MATRICEI L : Relația $A = LL^T$ se va scrie astfel:

$$\begin{pmatrix} a_{kk} \cdots a_{ki} \\ \vdots \quad\quad \vdots \\ a_{ik} \cdots a_{ii} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ell_{kk} & & 0 \\ \vdots & \ddots & \\ \ell_{ik} & \cdots & \ell_{ii} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_{kk} & \cdots & \ell_{ik} \\ & \ddots & \vdots \\ 0 & & \ell_{ii} \end{pmatrix} \tag{5}$$

Presupunem că printr-o anumită metodologie au fost calculate primele $k-1$ coloane din L, deci și primele linii $k-1$ din L^T.

ETAPA 1: Calculăm elementul ℓ_{kk} de pe diagonala principală, scriind expresia pentru a_{kk} :

$$a_{kk} = \sum_{s=1}^{n} \ell_{ks}\ell_{sk}^T = \sum_{s=1}^{k} \ell_{ks}\ell_{sk}^T = \sum_{s=1}^{k} \ell_{ks}^2 = \ell_{kk}^2 + \sum_{s=1}^{k-1} \ell_{ks}^2$$

Cum $\ell_{kk} > 0$ va rezulta

$$\ell_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum_{s=1}^{k-1} \ell_{ks}^2} \tag{6}$$

ETAPA 2: Calculăm restul elementelor de pe coloana k, i.e. $\ell_{ik}, i > k$, scriind expresia pentru a_{ik} :

$$a_{ik} = \sum_{s=1}^{n} \ell_{is}\ell_{sk}^T = \sum_{s=1}^{k} \ell_{is}\ell_{sk}^T = \sum_{s=1}^{k} \ell_{is}\ell_{ks} = \ell_{ik}\ell_{kk} + \sum_{s=1}^{k-1} \ell_{is}\ell_{ks} \Rightarrow$$

$$\ell_{ik} = \frac{1}{\ell_{kk}} \left(a_{ik} - \sum_{s=1}^{k-1} \ell_{is}\ell_{ks} \right) \tag{7}$$

ALGORITM (Metoda Cholesky)

Date de intrare: $A = (a_{ij})_{i,j} = \overline{1,n}$; $b = (b_i)_{i=\overline{1,n}}$;
Date de ieșire: $L = (\ell_{ij})_{i,j=\overline{1,n}}$; $x = (x_i)_{i=\overline{1,n}}$

1: $\alpha = a_{11}$;
 if $\alpha \leq 0$ then
  OUTPUT('A nu este pozitiv definită');
  STOP.
 endif

 $\ell_{11} = \sqrt{a_{11}}$;
 for $i = 2 : n$ do
  $\ell_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{\ell_{11}}$;
 endfor
2: for $k = 2 : n$ do
  $\alpha = a_{kk} - \sum_{s=1}^{k-1} \ell_{ks}^2$;
  if $\alpha \leq 0$ then
   OUTPUT('A nu este pozitiv definită');
   STOP.
  endif
  $\ell_{kk} = \sqrt{\alpha}$;

  for $i = k+1 : n$ do
   $\ell_{ik} = \dfrac{1}{\ell_{kk}} \left(a_{ik} - \sum_{s=1}^{k-1} \ell_{is}\ell_{ks} \right)$;
  endfor
 endfor
3: $y =$SubsAsc(L, b);
4: $x =$SubsDesc(L^T, y).

Exemplu #4: Fie $A = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 \\ 2 & 10 & 4 \\ 2 & 4 & 6 \end{pmatrix}$

a) Să se verifice dacă A este simetrică și pozitiv definită;
b) În caz afirmativ, să se determine factorizarea Cholesky.
c) Să se rezolve sistemul $Ax = b$, $b = (12\ 30\ 10)^T$ prin metoda Cholesky.

a) $4>0, \begin{vmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 10 \end{vmatrix} = 36>0, det(A) = 144 > 0 \Rightarrow$ conform criteriului Sylvester rezultă că matricea A este pozitiv definită. Conform Th. (II.2.) matricea A admite descompunere Cholesky. Astfel $\exists L$ inferior triunghiulară astfel încât $A = LL^T$.

$$\begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 \\ 2 & 10 & 4 \\ 2 & 4 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ell_{11} & 0 & 0 \\ \ell_{21} & \ell_{22} & 0 \\ \ell_{31} & \ell_{32} & \ell_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_{11} & \ell_{21} & \ell_{31} \\ 0 & \ell_{22} & \ell_{32} \\ 0 & 0 & \ell_{33} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \ell_{11}^2 & \ell_{11}\ell_{21} & \ell_{11}\ell_{31} \\ \ell_{21}\ell_{11} & \ell_{21}^2 + \ell_{22}^2 & \ell_{21}\ell_{31} + \ell_{22}\ell_{32} \\ \ell_{31}\ell_{11} & \ell_{31}\ell_{21} + \ell_{32}\ell_{22} & \ell_{31}^2 + \ell_{32}^2 + \ell_{33}^2 \end{pmatrix}$$

Aflăm mai întâi elementul $\ell_{11} : \ell_{11}^2 = 4 \Rightarrow \ell_{11} = 2\ (\ell_{11} > 0)$. Calculăm în continuare elementele de pe prima coloană din $L, (\ell_{21}, \ell_{31}) : \ell_{21}\ell_{11} = 2$ și $\ell_{31}\ell_{11} = 2$ de unde rezultă $\ell_{21} = 1$ și $\ell_{31} = 1$. Continuăm procesul calculând elementul $\ell_{22} : \ell_{21}^2 + \ell_{22}^2 = 10 \Rightarrow \ell_{22} = 3\ (\ell_{22} > 0)$. Aflăm elementul rămas pe coloana a II-a, i.e., $\ell_{32} : \ell_{31}\ell_{21} + \ell_{32}\ell_{22} = 4 \Rightarrow \ell_{32} = 1$. În final calculăm elemntul $\ell_{33} : \ell_{31}^2 + \ell_{32}^2 + \ell_{33}^2 = 6 \Rightarrow \ell_{33} = 2\ (\ell_{33} > 0)$.

Am obținut $L = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}$.

Rezolvăm sistemul $Ly = b$:

$$\begin{cases} 2y_1 = 12 \\ y_1 + 3y_2 = 30 \\ y_1 + y_2 + 2y_3 = 10 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} y_1 = 6 \\ y_2 = 8 \\ y_3 = -2 \end{cases}$$

În final se rezolvă sistemul $L^T x = y$:

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 6 \\ 3x_2 + x_3 = 8 \\ x_1 + x_2 + 2x_3 = -2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1 = 2 \\ x_2 = 3 \\ x_3 = -1 \end{cases}$$