Tema nr. 2

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

- Să se calculeze, o descompunere LDL^T (descompunerea/factorizarea Choleski) a matricei A ($A = LDL^T$), unde L este matrice inferior triunghiulară cu toate elementele de pe diagonala pricipală egale cu 1 iar D este matrice diagonală;

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

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

- Folosindu-se una din bibliotecile menţionate în pagina laboratorului, să se calculeze şi să se afişeze o descompunere LU a matricei A şi soluţia 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.

- *Restricţie*: în program să se aloce doar două matrice A şi A^{init}. Matricea D se va memora într-un vector d (se memorează doar elementele de pe diagonala matricei D). Elementele de sub diagonala principală a matricei L (partea strict inferior triunghiulară a matricei L) se vor calcula direct în matricea A. Nu se vor memora elementele 1 de pe diagonala matricei L, dar se va ţine cont de acest lucru la rezolvarea sistemelor triunghiulare ce implică matricea L.

- Scrieţi programul astfel încât să poată fi testat (şi) pe sisteme de dimensiuni mai mari decât 100. Generaţi folosind valori random o matrice A care să fie doar simetrică. Dacă matricea nu este pozitiv definită, algoritmul de calcul al descompunerii Choleski şi celelalte calcule se opresc. Se poate construi matricea aleator astfel încât să fie şi pozitiv definită, dacă elementele diagonale satisfac următoarea relaţie:

$$a_{ii} > \sum_{\substack{j=1, \\ j \neq i}}^{n} |a_{ij}| \quad , \quad \forall i = 1, ..., n.$$

Asemenea matrice se numesc matrice cu diagonala dominantă (pe linii).

Bonus (25pt): Să se verifice corectitudinea descompunerii calculate, i.e.:

$$LDL^T \approx A^{\text{initial}}$$

verificându-se relaţiile:

$$\left(LDL^T\right)_{ij} \approx a_{ij} \quad \Longleftrightarrow \quad |\left(LDL^T\right)_{ij} - a_{ij}| \leq 10^{-5} \ , \quad \forall i, j = 1, ..., n \ , \ i \leq j.$$

Pentru calculul elementelor $\left(LDL^T\right)_{ij} - a_{ij}$, să se folosească doar matricea A obţinută după calculul descompunerii Choleski şi vectorul d.

Observaţii

1. Precizia calculelor ϵ, este un număr pozitiv de forma:

   $$\epsilon = 10^{-m} (\text{cu } m = 5, 6, ..., 10, ... \text{ la alegere})$$

   valoare 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 $s = \dfrac{1.0}{v}$ unde $v \in \mathbb{R}$ nu vom scrie:

   if($v! = 0$) $s = 1/v$;

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

ci vom scrie în program:

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

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

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

$$Ax = b \longleftrightarrow LDL^T x = b \longleftrightarrow \begin{cases} Lz &= b, \\ Dy &= z, (y_i = \dfrac{z_i}{d_i} \ , \ i = 1, .., n) \\ L^T x &= y. \end{cases}$$

Se rezolvă întâi sistemul inferior triunghiular $Lz = b$ (se adaptează formulele substituţiei directe pentru matrice cu diagonala egală cu 1). Apoi se rezolvă sistemul diagonal $Dy = z$ (formulele de rezolvare sunt scrise mai sus, z fiind soluţia obţinută anterior) şi apoi se rezolvă sistemul superior triunghiular $L^T x = y$ unde y este soluţia obţinută la rezolvarea sistemului precedent $Dy = z$ (din nou trebuie să se adapteze formulele de rezolvare a sistemelor superior triunghiulare pentru matrice cu diagonala egală cu 1). 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:

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

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

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

Atenţie la calculul vectorului Ax_{Chol} - matricea A va fi modificată după calculul descompunerii Choleski: va avea în partea strict inferior triunghiulară elementele matricei L, iar elementele matricei A se găsesc în partea superior triunghiulară a matricei A.

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 presupune 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:

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

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:

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

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 Choleski (LDL^T)

Fie $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 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 matrice elementele de sub diagonala principală a matricei coincid cu elementele de deasupra diagonalei principale a matricei (informaţia se repetă).

Se numeşte matrice pozitiv definită o matrice care satisface următoarea relaţie:

$$(Ax, x)_{\mathbf{R^n}} > 0 \quad , \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \ , \ x \neq 0 \tag{8}$$

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

$$A = LDL^T$$

unde $L \in \mathbb{R}^{n\times n}$ este matrice inferior triunghiulară cu elementele de pe diagonala principală egale cu 1 ($l_{ii} = 1 \ \forall i$), D este o matrice diagonală, $D =$diag$(d_1, d_2, ..., d_n)$, iar L^T este transpusa matricei L (L^T este matrice superior triunghiulară)

Algoritmul de calcul al descompunerii LDL^T (metoda Choleski)

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

Facem următoarele notaţii (pentru a uşura deducerea algoritmului):

$$T = LD = (t_{ij}) \qquad\qquad U = L^T = (u_{ij})$$

$$t_{ij} = d_j l_{ij} \qquad\qquad u_{ij} = l_{ji} \qquad \forall i, j$$

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

La acest pas se calculează elementul d_p şi elementele coloanei p a matricei L , $l_{ip}, i = p + 1, \dots, n$ (restul elementelor de pe coloana p a matricei L au valori cunoscute: $l_{ip} = 0, i = 1, \dots, p - 1, \ l_{pp} = 1$).

Întâi se calculează elementul diagonal d_p şi apoi elementele coloanei p a matricei L, $l_{ip}, i = p + 1, \dots, n$.

Sunt cunoscute de la paşii anteriori:

- primele $p-1$ elemente de pe diagonala lui D: $d_k, k=1,\ldots,p-1$
- elementele primelor $p-1$ coloane din L: l_{ik} cu $k=1,\ldots,p-1\,,\ \forall i$

Calculul elementului diagonal d_p :
Folosind relaţia $A = LDL^T = TU$:

$$a_{pp} = (LDL^T)_{pp} = (TU)_{pp} = \sum_{k=1}^{n} t_{pk}u_{kp} = \sum_{k=1}^{p-1} d_k l_{pk} l_{pk} + d_p \cdot 1$$

Prin urmare:

$$a_{pp} = \sum_{k=1}^{p-1} d_k l_{pk}^2 + d_p$$

În această relaţie singurul element necunoscut este d_p deoarece elementele d_k şi $l_{pk}, k=1,\ldots,p-1$ sunt elemente de pe diagonala matricei D şi de pe coloane ale matricei L calculate la paşii anteriori. Deducem:

$$d_p = a_{pp} - \sum_{k=1}^{p-1} d_k l_{pk}^2 \tag{9}$$

Calculul elementelor l_{ip} , $i=p+1,\ldots,n$
Folosim, din nou, relaţia $A = LDL^T = TU$:

$$a_{ip} = (LDL^T)_{ip} = (TU)_{ip} = \sum_{k=1}^{n} t_{ik}u_{kp} = \sum_{k=1}^{p-1} d_k l_{ik} l_{pk} + l_{ip} d_p$$

Dacă $d_p \neq 0$ (pentru matrice A pozitiv definite acest lucru este adevărat) putem calcula elementele coloanei p a matricei L astfel:

$$l_{ip} = \left(a_{ip} - \sum_{k=1}^{p-1} d_k l_{ik} l_{pk} \right) \Big/ d_p\ ,\ \ i = p+1,\ldots,n \tag{10}$$

(elementele d_k, l_{ik} şi l_{pk} $k=1,\ldots,p-1$ sunt elemente din D şi L calculate la paşii anteriori)

Dacă avem un element $d_p = 0$, algoritmul se opreşte, descompunerea LDL^T nu poate fi calculată. Pentru matricele simetrice şi pozitiv definite $d_p \neq 0, \forall p$.

Observaţie:

Pentru memorarea elementelor plasate sub diagonala principală a matricei L se poate folosi partea strict inferior triunghiulară a matricei A iniţială:

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

Se observă că în acest fel nu se memorează elementele de pe diagonala principală a matricei L, $l_{ii} = 1, i = 1, \ldots, n$. Vom 'memora' mascat aceste elemente în formulele de rezolvare a sistemelor triunghiulare ce implică matricea L. Se vor folosi formulele (4) pentru rezolvarea sistemului inferior triunghiular $Lz = b$ şi formulele (7) pentru rezolvarea sistemului superior triunghiular $L^T x = y$.

Calculele (9) şi (10) se pot face direct în matricea A.

Cu acest tip de memorare (partea strict inferior triunghiulară a matricei A conţine elementele matricei L, iar partea superior triunghiulară are elementele matricei A iniţiale) trebuie adaptate formulele de calcul a vectorului $A^{init} x_{Chol}$. Se va folosi proprietatea de simetrie a matricei A pentru a utiliza valorile corecte ale elementelor de sub diagonala principală a matricei A:

$$a_{ij} = a_{ji} \ , \ i = 1, \ldots n \ , \ j = 1, \ldots i-1.$$

Exemplu

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2.5 & 3 \\ 2.5 & 8.25 & 15.5 \\ 3 & 15.5 & 43 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2.5 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2.5 & 3 \\ 0 & 1 & 4 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

După calculul acestei descompuneri, matricea A şi vectorul d au următoarea structură:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2.5 & 3 \\ 2.5 & 8.25 & 15.5 \\ 3 & 4 & 43 \end{pmatrix} \quad , \quad d = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Sistemul liniar:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2.5 & 3 \\ 2.5 & 8.25 & 15.5 \\ 3 & 15.5 & 43 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 12 \\ 38 \\ 68 \end{pmatrix}$$

are soluţia $x = \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \\ 0 \end{pmatrix}$, soluţiile intermediare fiind $z = \begin{pmatrix} 12 \\ 8 \\ 0 \end{pmatrix}$ şi $y = \begin{pmatrix} 12 \\ 4 \\ 0 \end{pmatrix}$.