Tema nr. 4

Se dau $\boldsymbol{n}$ dimensiunea sistemului, $\boldsymbol{\varepsilon}$ - precizia calculelor, matricea pătratică $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ şi un vector $\boldsymbol{s} \in \mathbb{R}^{n}$.

1. Să se calculeze vectorul $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{n}$ astfel:

$$b_i = \sum_{j=1}^{n} s_j a_{ij} \quad , \; i = 1, \dots, n$$

2. Să se implementeze descompunerea $\boldsymbol{QR}$ a matricei $\boldsymbol{A}$ folosind algoritmul lui Householder.
3. Să se rezolve sistemul liniar:

$$Ax = b \quad ,$$

folosind descompunerea $\boldsymbol{QR}$ din una din bibliotecile menționate în pagina laboratorului (se obţine soluţia x_{QR}) şi descompunerea $\boldsymbol{QR}$ calculată la punctul 2. (se obţine soluţia $x_{Householder}$). Calculaţi şi afişaţi:

$$\left\| x_{QR} - x_{Householder} \right\|_2 .$$

4. Să se calculeze şi să se afişeze următoarele erori ($\|\cdot\|_2$ este norma euclidiană):

$$\| A^{init} x_{Householder} - b^{init} \|_2 \quad ,$$

$$\| A^{init} x_{QR} - b^{init} \|_2 \quad ,$$

$$\frac{\| x_{Householder} - s \|_2}{\| s \|_2} \quad ,$$

$$\frac{\| x_{QR} - s \|_2}{\| s \|_2} .$$

(aceste valori ar trebui să fie mai mici decât $\mathbf{10^{-6}}$)

5. Să se calculeze inversa matricei $\boldsymbol{A}$ folosind descompunerea $\boldsymbol{QR}$ calculată la punctul 2. şi să se compare cu inversa calculată folosind funcția din bibliotecă, afișând valoarea următoarei norme:

$$\left\| A^{-1}_{Householder} - A^{-1}_{bibl} \right\| .$$

6. Scrieți programul și cu inițializare random a datelor de intrare (astfel încât programul vostru să poată fi rulat cu orice dimensiune $\boldsymbol{n}$ a datelor).

Rezolvarea sistemelor liniare folosind descompunerea *QR*

Fie $\boldsymbol{A}$ o matrice reală pătratică de dimensiune $\boldsymbol{n}$. Presupunem că pentru matricea $\boldsymbol{A}$ avem o descompunere de forma:

$$A=Q*R$$

unde $\boldsymbol{Q}$ este matrice ortogonală ($Q^TQ = QQ^T = I_n$) iar $\boldsymbol{R}$ este matrice superior triunghiulară. Având o asemenea descompunere pentru matricea $\boldsymbol{A}$, rezolvarea sistemului $Ax=b$ se reduce la rezolvarea sistemului superior triunghiular $Rx=Q^Tb$.

$$Ax=b \;\leftrightarrow\; Q*Rx = b \;\leftrightarrow\; Q^T*Q*Rx = Q^T*b \;\leftrightarrow\; Rx=Q^T*b$$

$$Ax=b \quad \Leftrightarrow \quad Rx=Q^T*b$$

Algoritmul lui Householder

Pentru a aduce sistemul $Ax=b$ la forma $Rx = Q^Tb$ se folosesc matricele de reflexie. O matrice de reflexie $P=(p_{ij})_{i,j=1,n}$ are următoarea formă:

$$P = I_n - 2vv^T \;\;,\quad v\in\mathbb{R}^n,\; \|v\|_2 = |v| = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} v_i^2} = 1.$$

(unde cu I_n am notat matricea unitate de dimensiune $\boldsymbol{n}$)

Se poate arăta că matricele de reflexie sunt simetrice şi ortogonale :

$$P = P^T \;\;,\quad P^2 = I_n.$$

Algoritmul Householder de calcul al descompunerii $\boldsymbol{QR}$ se desfăşoară în $\boldsymbol{(n-1)}$ paşi. La pasul $\boldsymbol{r}$ se transformă coloana $\boldsymbol{r}$ a matricei $\boldsymbol{A}$ în formă superior triunghiulară fără a modifica primele $(r-1)$ coloane. La acest pas se obţine coloana $\boldsymbol{r}$ a matricei $\boldsymbol{R}$. Calculul matricei $\boldsymbol{R}$ se poate face direct în matricea $\boldsymbol{A}$ (de fapt se transformă matricea $\boldsymbol{A}$ într-o matrice superior triunghiulară). În acelaşi timp, se fac transformările necesare asupra vectorului termenilor liberi şi se pot efectua transformări pentru a calcula matricea Q^T. Pentru a calcula matricea Q^T, se iniţializează o matrice $\bar{Q} = I_n$ şi se fac aceleaşi trasformări asupra matricei $\bar{Q}$ ca şi cele făcute asupra matricei $\boldsymbol{A}$.

Pasul ***r (r=1,2,…,n-1)***

La acest pas, matricea ***A*** are primele ***(r-1)*** coloane în formă superior triunghiulară şi se foloseşte o matrice de reflexie pentru a transforma coloana ***r*** a matricei ***A*** în formă superior triunghiulară (fără a le modifica pe primele ***(r-1)***).
Pasul ***r*** constă în următoarele calcule :

$$\begin{aligned} A &= P_r * A \\ b &= P_r * b \\ \bar{Q} &= P_r * \bar{Q} \end{aligned}$$

unde matricea P_r se construieşte astfel :

$$P_r = I_n - \frac{1}{\beta} u u^T$$

$$\beta = \sigma - k a_{rr}, \quad \sigma = \sum_{j=r}^{n} a_{jr}^2 , \quad k = -\mathrm{semn}(a_{rr})\sqrt{\sigma} \quad , \quad \mathbf{semn}(x) = \begin{cases} +1 & \text{dacă } x \geq 0, \\ -1 & \text{dacă } x < 0. \end{cases}$$

$$u = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ a_{rr} - k \\ a_{r+1r} \\ \vdots \\ a_{nr} \end{pmatrix}, \qquad \begin{array}{c} u_i = 0, i = 1, \ldots, r-1, \\ u_r = a_{rr} - k, \\ u_i = a_{ir}, i = r+1, \ldots, n \end{array}$$

Matricea $V = uu^T \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $V = \left(v_{ij}\right)_{i,j=1,\ldots,n}$ are următoarele elemente:

$$v_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{pentru } i = 1, \ldots, r-1 , \ j = 1, \ldots, n \\ 0 & \text{pentru } i = r, \ldots, n , \ j = 1, \ldots, r-1 \\ u_i u_j & \text{pentru } i = r, \ldots, n , \ j = r, \ldots, n \end{cases}$$

Prin urmare, matricea de reflexie $\boldsymbol{P_r = (p_{ij})_{i,j=1,n}}$ are următoarele elemente:

$$p_{ij} = \begin{cases} \mathbf{0} & \text{pentru } \boldsymbol{i = 1,\dots,r-1\ ,\ j = 1,\dots,n,\ i \neq j} \\ \mathbf{1} & \text{pentru } \boldsymbol{i = 1,\dots,r-1,\ j = i} \\ \mathbf{0} & \text{pentru } \boldsymbol{i = r,\dots,n\ ,\ j = 1,\dots,r-1} \\ \boldsymbol{-f\, u_i u_j} & \text{pentru } \boldsymbol{i = r,\dots,n\ ,\ j = r,\dots,n,\ i \neq j} \\ \boldsymbol{1 - f\, u_i^2} & \text{pentru } \boldsymbol{i = r,\dots,n\ ,\ j = i} \end{cases} \quad , \quad \boldsymbol{f = \frac{1.0}{\beta}}$$

La sfârşitul algoritmului de mai jos, matricea superior triunghiulară $\boldsymbol{R}$ se găseşte în matricea $\boldsymbol{A}$, iar transpusa matricei $\boldsymbol{Q}$ în matricea $\boldsymbol{\bar{Q}}$. În vectorul $\boldsymbol{b}$ vom avea $\boldsymbol{Q^T * b^{init}}$. Verificarea faptului că matricea iniţială nu este singulară, se face testând dacă toate elementele de pe diagonala matricei $\boldsymbol{R}$ (sau $\boldsymbol{A}$) sunt nenule ($\boldsymbol{|r_{ii}| \leq \varepsilon\ ,\ \forall i}$)
.

Algoritmul Householder pentru factorizarea ***A=Q*R***

$Q = I_n;$

for $r = 1, \ldots, n-1$

// **construcţia matricei** P_r – **constanta** β **şi vectorul** u

• $\sigma = \sum_{i=r}^{n} a_{ir}^2;$

• **if** $(\sigma \le \varepsilon)$ **break**; // $r = r+1 \leftrightarrow P_r = I_n$ (A **singulară**)

• $k = \sqrt{\sigma};$

• **if** $(a_{rr} > 0)$ $k = -k;$

• $\beta = \sigma - k\, a_{rr};$

• $u_r = a_{rr} - k;$ $u_i = a_{ir}$, $i = r+1, \ldots, n;$

// $A = P_r * A$

// **transformarea coloanelor** $j = r+1, \ldots, n$

• **for** $j = r+1, \ldots, n$

$* \gamma = (\gamma_j / \beta) = (Ae_j, u)/\beta = (\sum_{i=r}^{n} u_i a_{ij})/\beta;$

$*$ **for** $i = r, \ldots, n$

$a_{ij} = a_{ij} - \gamma * u_i;$

// **transformarea coloanei** r **a matricei** A

• $a_{rr} = k;$ $a_{ir} = 0,$ $i = r+1, \ldots, n;$

// $b = P_r * b$

• $\gamma = (\gamma/\beta) = (b, u)/\beta = (\sum_{i=r}^{n} u_i b_i)/\beta;$

• **for** $i = r, \ldots, n$ $b_i = b_i - \gamma * u_i;$

// $\widetilde{Q = P_r * Q}$

• **for** $j = 1, \ldots, n$

$* \gamma = (\widetilde{Qe_j, u})/\beta = (\sum_{i=r}^{n} u_i \widetilde{q_{ij}})/\beta;$

$*$ **for** $i = r, \ldots, n$

$\widetilde{q_{ij}} = \widetilde{q_{ij}} - \gamma * u_i;$

Calculul unei aproximări a inversei unei matrice

Dacă se cunoaște o metodă numerică de rezolvare a sistemelor liniare (în cazul de faţă se va folosi descompunerea $\boldsymbol{QR}$ calculată folosind algoritmul lui Householder), coloanele matricei inverse se pot aproxima rezolvând $\boldsymbol{n}$ sisteme liniare.

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

$$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{e}_j\ ,\ \ \boldsymbol{e}_j=(0,0,\ldots,\underset{\text{pozitia } j}{1},\ldots,0)^T\ ,\ \ \boldsymbol{j}=1,\ldots,\boldsymbol{n}\ .$$

Procedura de calcul a matricei $\boldsymbol{A}^{-1}_{Householder}$ este următoarea:

- Se calculează descompunerea $\boldsymbol{QR}$ a matricei $\boldsymbol{A}$ folosind algoritmul Householder
- Dacă matricea $\boldsymbol{A}$ este singulară ($\det \boldsymbol{A} = 0 \leftrightarrow \exists\ |\boldsymbol{r}_{ii}| < \varepsilon$), STOP, inversa nu se poate calcula.
- Altfel, se calculează coloanele matricei $\boldsymbol{A}^{-1}_{Householder}$ astfel:

  for $\boldsymbol{j=1,..,n}$

  1. Se iniţializează vectorul $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{Q}^T \boldsymbol{e}_j$ = coloana $\boldsymbol{j}$ a matricei $\boldsymbol{Q}^T$ sau linia $\boldsymbol{j}$ a matricei $\boldsymbol{Q}$;
     (se foloseşte iniţializarea cu coloana $\boldsymbol{j}$ a matricei $\boldsymbol{Q}^T$ sau linia $\boldsymbol{j}$ a matricei $\boldsymbol{Q}$ în funcţie de matricea returnată de algoritmul Householder)
  2. Se rezolvă sistemul superior triunghiular $\boldsymbol{Rx=b}$, folosind metoda substituţiei inverse. Se obţine soluţia $\boldsymbol{x}^*$ ($\boldsymbol{x}^*$ este şi soluţia sistemului liniar $\boldsymbol{Ax=e}_j$);
  3. Se memorează $\boldsymbol{x}^*$ în coloana $\boldsymbol{j}$ a matricei $\boldsymbol{A}^{-1}_{Householder}$.

Procedura descrisă mai sus detaliază rezolvarea numerică, folosind o descompunere $\boldsymbol{QR}$, a ecuaţiei matriceale:

$$\boldsymbol{AX=I}_n\ .$$

Exemplu

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

$$\begin{array}{ccccccc} & & & & 4x_3 & = & 4 \\ x_1 & + & 2x_2 & + & 3x_3 & = & 10 \\ & & x_2 & + & 2x_3 & = & 4 \end{array}$$

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 4 \\ 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} = QR = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}, \quad b = A * s = \begin{pmatrix} 4 \\ 10 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$Ax = b \Leftrightarrow Rx = Q^T b \Leftrightarrow \begin{array}{ccccccc} x_1 & + & 2x_2 & + & 3x_3 & = & 10 \\ & & x_2 & + & 2x_3 & = & 4 \\ & & & & 4x_3 & = & 4 \end{array} \Rightarrow x^* = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Prima coloană a matricei $A^{-1}_{Householder}$

$$\begin{array}{ccccccc} x_1 & + & 2x_2 & + & 3x_3 & = & 0 \\ & & x_2 & + & 2x_3 & = & 0 \\ & & & & 4x_3 & = & 1 \end{array} \Rightarrow x^* = \begin{pmatrix} 0.25 \\ -0.5 \\ 0.25 \end{pmatrix}$$

Coloana a 2-a a matricei $A^{-1}_{Householder}$

$$\begin{array}{ccccccc} x_1 & + & 2x_2 & + & 3x_3 & = & 1 \\ & & x_2 & + & 2x_3 & = & 0 \\ & & & & 4x_3 & = & 0 \end{array} \Rightarrow x^* = \begin{pmatrix} 1.0 \\ 0.0 \\ 0.0 \end{pmatrix}$$

Coloana a 3-a a matricei $A^{-1}_{Householder}$

$$
\begin{array}{ccccccc}
x_1 & + & 2x_2 & + & 3x_3 & = & 0 \\
 & & x_2 & + & 2x_3 & = & 1 \\
 & & & & 4x_3 & = & 0
\end{array}
\Rightarrow\; x^* = \begin{pmatrix} -2.0 \\ 1.0 \\ 0.0 \end{pmatrix}
$$

$$
A_{Householder}^{-1} = \begin{pmatrix} 0.25 & 1.0 & -2.0 \\ -0.5 & 0.0 & 1.0 \\ 0.25 & 0.0 & 0.0 \end{pmatrix}
$$