Tema nr. 2

Date: n - dimensiunea sistemului, ϵ - precizia calculelor, matricea sistemului $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, vectorul termenilor liberi $b \in \mathbb{R}^n$ şi $dU \in \mathbb{R}^n$ diagonala matricei U, un vector cu toate elementele nenule ($|dU_i| \geq \epsilon$,$\forall i$):

- Să se calculeze, când este posibil, o descompunere LU a matricei A ($A = LU$), unde L este matrice inferior triunghiulară, iar U este matrice superior triunghiulară cu $u_{ii} = dU_i, \forall i$. În acest text este descris algoritmul de calcul al descompunerii LU când $dU_i = 1, \forall i$. Adaptaţi algoritmul descris astfel încât diagonala matricei U să fie egală cu dU. Matricele L şi U se vor calcula în n paşi, la fiecare pas p, se calculează elementele liniilor p din matricele L şi U.

- Folosind această descompunere, să se calculeze determinantul matricei A ($\det A = \det L \det U$, folosiţi această relaţie cât mai eficient posibil, adică cu număr minim de calcule) ;

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

- Să se verifice soluţia calculată prin afişarea normei:

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

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

  A^{init} este matricea iniţială, nu cea modificată pe parcursul algoritmului. Am notat cu $\|\cdot\|_2$ norma Euclidiană.

- *Restricţie*: în program să se aloce doar două matrice, A şi A^{init} (o copie a matricei iniţiale). Descompunerea LU se va calcula direct în matricea A. Diagonala matricei U se găseste în vectorul dU şi se va ţine cont de acest lucru la rezolvarea sistemului superior triunghiular $Ux = y$ (se modifică procedura de rezolvare a sistemelor superior triunghiulare).

- Folosindu-se una din bibliotecile menţionate în pagina laboratorului, să se calculeze şi să se afişeze soluţia sistemului $Ax = b$ şi inversa matricei

A, A_{lib}^{-1}. Să se afişeze următoarele norme:

$$||x_{LU} - x_{lib}||_2$$

$$||x_{LU} - A_{lib}^{-1} b||_2.$$

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

Bonus 20 pt.: Să se calculeze descompunerea LU cu proprietăţile cerute mai sus ($u_{ii} = dU_i, \forall i$), a matricei A cu următoarele restricţii de memorare: să se aloce o singură matrice în program pentru memorarea matricei A, matrice care va rămâne neschimbată (se va folosi pentru calculul descompunerii LU). Pentru calculul matricelor L şi U se vor folosi doi vectori de dimensiune $n(n+1)/2$ în care se vor memora elementele din partea inferior triunghiulară, respectiv superior triunghiulară a matricelor L şi U. Cu acest tip nou de memorare a datelor, să se calculeze soluţia sistemului liniar $Ax = b$, x_{LU} şi să se verifice că $A \approx LU$ (se afisează matricea produs LU).

Observaţii

1. Precizia calculelor ϵ, este un număr pozitiv de forma $\epsilon = 10^{-t}$ (cu $t = 5, 6, ..., 10, ...$ la alegere) 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 $s = 1/v$ unde $v \in \mathbb{R}$, **NU** vom scrie:

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

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

   ci vom scrie în program:

   if(*Math.Abs*(v) > *eps*) $s = 1/v$;

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

2. Dacă pentru o matrice A avem descompunerea LU, rezolvarea sistemului $Ax = b$ se reduce la rezolvarea a două sisteme triunghiulare:

$$Ax = b \longleftrightarrow LUx = b \longleftrightarrow \begin{cases} Ly &= b, \\ Ux &= y. \end{cases}$$

Se rezolvă întâi sistemul inferior triunghiular $Ly = b$. Apoi se rezolvă sistemul superior triunghiular $Ux = y$ unde y este soluţia obţinută din rezolvarea sistemului precedent, $Ly = b$. Vectorul x rezultat din rezolvarea sistemului $Ux = y$ este şi soluţia sistemului iniţial $Ax = b$.

3. Pentru calculul $\|A^{init}x_{LU} - b\|_2$ avem:

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

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

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

Se poate folosi o funcţie din biblioteca pe care o folosiţi pentru a calcula această normă.

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 presupunem 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:

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

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:

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

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:

$$x_i = \frac{\left(b_i - \sum\limits_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j\right)}{a_{ii}} \quad , \quad i = n, n-1, \ldots, 2, 1 \tag{6}$$

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 LU

Dacă $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ este o matrice reală pătratică de dimensiune n astfel încât $\det A_k \neq 0$, $\forall k = 1,\dots,n$, unde $A_k = (a_{ij})_{i,j=1,\dots,k}$. Atunci, se poate demonstra că o unică matrice inferior triunghiulară $L = (l_{ij})_{i,j=1,\dots,n}$ şi o unică matrice superior triunghiulară $U = (u_{ij})_{i,j=1,\dots,n}$ cu $u_{ii} = dU_i, i = 1,\dots,n$ ($dU_i \neq 0\ \forall i$) astfel încât:

$$A = LU \tag{8}$$

Algoritmul de calcul al descompunerii LU

Fie $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ o matrice reală pătratică de dimensiune n care satisface ipotezele teoremei de mai sus. Algoritmul de calcul al matricelor L şi U are n etape. La fiecare pas p al algoritmului se calculează elementele liniei p din matricea L şi elementele liniei p din matricea U.

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

Se determină elementele liniei p a matricei L, $l_{pi}, i = 1\dots, p$, şi elementele liniei p a matricei U , $u_{pp} = 1$, $u_{pi}, i = p + 1,\dots, n$.

Sunt cunoscute de la paşii anteriori elementele primelor $p-1$ linii din L (elemente l_{kj} cu $k = 1,\dots,p-1$) şi elementele primelor $p-1$ linii din U (elemente u_{ki} cu $k = 1,\dots,p-1$).

Calculul elementelor linei p din matricea L : l_{pi} $i = 1,\dots,p$
$(l_{pi} = 0, i = p + 1,\dots,n)$

$$\begin{aligned} a_{pi} &= (l_{p1}, l_{p2}, \cdots, l_{pi} \cdots l_{pp}, 0, \cdots 0) \begin{pmatrix} u_{1i} \\ u_{2i} \\ \vdots \\ u_{i-1i} \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = (i \leq p) \\ &= l_{p1}u_{1i} + l_{p2}u_{2i} + \cdots + l_{pi-1}u_{i-1i} + l_{pi}1 \end{aligned}$$

Ştiind că $u_{ii} = 1$, putem calcula elementele liniei p a matricei L astfel:

$$l_{pi} = \left(a_{pi} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{pk}u_{ki}\right)/1 \ , \ i = 1, \dots, p \ , \ l_{pi} = 0, \ i = p+1, \dots, n. \qquad (9)$$

($l_{pk}, k = 1, \dots, i-1$ sunt elemente ale liniei p a matricei L calculate la pasul p, înainte de calculul elementului l_{pi}, u_{ki}, $k = 1, \dots, p-1$ sunt elemente de pe linii ale matricei U calculate în paşii anteriori).

Calculul elementelor liniei p din matricea U: u_{pi} , $i = p+1, \dots, n$ ($u_{pp} = 1, u_{pi} = 0$, $i = 1, \dots, p-1$)

$$\begin{aligned} a_{pi} &= (l_{p1}, l_{p2}, \cdots, l_{pp-1}, l_{pp}, 0, \cdots 0) \begin{pmatrix} u_{1i} \\ u_{2i} \\ \vdots \\ u_{p-1i} \\ u_{pi} \\ \vdots \\ u_{i-1i} \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = (i > p) \\ &= l_{p1}u_{1i} + l_{p2}u_{2i} + \cdots + l_{pp-1}u_{p-1i} + l_{pp}u_{pi} \end{aligned}$$

Dacă $l_{pp} \neq 0$, putem calcula u_{pi} astfel:

$$u_{pi} = \frac{a_{pi} - \sum_{k=1}^{p-1} l_{pk}u_{ki}}{l_{pp}} \ , \quad i = p+1, \dots, n \qquad (10)$$

(elementele l_{pk}, $k = 1, \dots, p$ sunt elemente de pe linia p a matricei L calculate la pasul p iar u_{ki}, $k = 1, \dots, p-1$, sunt elemente de pe linii deja cunoscute ale matricei U, fiind calculate anterior)

Dacă $l_{pp} = 0$, calculele se opresc, în acest caz descompunerea LU nu poate fi calculată, matricea A are un minor nul, $\det A_p = 0$.

Observaţie:

Pentru memorarea matricelor L şi U se poate folosi matricea A iniţială. Vom folosi partea strict superior triunghiulară a matricei A pentru a memora elementele nenule u_{ij} ale matricei U cu $i = 1, 2, \ldots, n$, $j = i+1, \ldots, n$ (cu excepţia elementelor de pe diagonală) iar partea inferior triunghiulară a matricei A pentru a memora elementele l_{ij} ale matricei L , $i = 1, \ldots, n$, $j = 1, 2, \ldots, i$. Elementele diagonalei matricei U, $u_{ii} = 1\ \forall i = 1, \ldots, n$ se găsesc în vectorul dU. Vom ţine cont de acest lucru la rezolvarea sistemului superior triunghiular. Calculele (9) şi (10) se pot face direct în matricea A.

Exemple

1.

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 3 \\ 2 & 7 & 5.5 \\ 6 & 3 & 12.5 \end{pmatrix} \quad , \quad dU = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$L = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 3 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad , \quad U = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1.5 \\ 0 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}$$

Soluţia sistemului:

$$\begin{pmatrix} 4 & 2 & 3 \\ 2 & 7 & 5.5 \\ 6 & 3 & 12.5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 21.6 \\ 33.6 \\ 51.6 \end{pmatrix} \quad \text{este} \quad \begin{pmatrix} 2.5 \\ 2.2 \\ 2.4 \end{pmatrix}.$$

2.

$$A = \begin{pmatrix} 2.5 & 2 & 2 \\ -5 & -2 & -3 \\ 5 & 6 & 6.5 \end{pmatrix} \quad , \quad dU = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$L = \begin{pmatrix} 2.5 & 0 & 0 \\ -5 & 2 & 0 \\ 5 & 2 & 1.5 \end{pmatrix} \quad , \quad U = \begin{pmatrix} 1 & 0.8 & 0.8 \\ 0 & 1 & 0.5 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Soluţia sistemului:

$$\begin{pmatrix} 2.5 & 2 & 2 \\ -5 & -2 & -3 \\ 5 & 6 & 6.5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -6 \\ 2 \end{pmatrix} \quad \text{este} \quad \begin{pmatrix} 1.6 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$