LU – dekompozicija trodijagonalne matrice

1 Priprema

Treba riješiti sustav linearnih jednadžbi **Ax**=**y**, gdje je $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ trodijagonalna matrica

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ c_1 & a_2 & b_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_2 & a_3 & b_3 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{n-2} & b_{n-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & c_{n-2} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & c_{n-1} & a_n \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_{n-2} \\ y_{n-1} \\ y_n \end{bmatrix}, . \tag{1}$$

Može se pokazati (vidi primjerice Björck (1974), Golub (1996)) da ako je $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ regularna kvadratna matrica, kojoj su svi glavni minori različiti od nule, tada je na jedinstven način moguće načiniti rastav $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$, gdje je $\mathbf{L}$ donja trokutasta matrica, kojoj su na glavnoj dijagonali jedinice, a $\mathbf{U}$ gornja trokutasta matrica, čiji dijagonalni elementi nisu nule (vidi takoer [10].

U našem slučaju glavni minori matrice **A** zadane u (1) su

$$\Delta_1 = a_1, \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} a_1 & b_1 \\ c_1 & a_2 \end{vmatrix}, \quad \Delta_3 = \begin{vmatrix} a_1 & b_1 & 0 \\ c_1 & a_2 & b_2 \\ 0 & c_2 & a_3 \end{vmatrix}, \quad \cdots, \quad \Delta_n = \det A \tag{2}$$

Pretpostavimo da su svi glavni minori (2) različiti od nule. Matrice **L** i **U** tražit ćemo u obliku

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ d_1 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & d_{n-1} & 1 \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{U} = \begin{bmatrix} e_1 & f_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & e_2 & f_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e_3 & f_3 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & e_{n-1} & f_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & e_n \end{bmatrix}.$$

Usporeujući produkt

$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{U} = \begin{bmatrix} e_1 & f_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ d_1e_1 & e_2 + d_1f_1 & f_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_2e_2 & e_3 + d_2f_2 & f_3 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & d_{n-2}e_{n-2} & e_{n-1} + d_{n-2}f_{n-2} & f_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & d_{n-1}e_{n-1} & e_n + d_{n-1}f_{n-1} \end{bmatrix},$$

s matricom $\mathbf{A}$ iz (1) dobivamo sustav od $(3n-2)$ linearne jednadžbe s $(3n-2)$ nepoznanice koji se lako sukcesivno rješava. Dobivamo:

$$\begin{array}{rclrclrcl} e_1 & = & a_1 & f_1 & = & b_1 & d_1 & = & \frac{c_1}{e_1} \\ e_2 & = & a_2 - d_1 f_1 & f_2 & = & b_2 & d_2 & = & \frac{c_2}{e_2} \\ e_3 & = & a_3 - d_2 f_2 & f_3 & = & b_3 & d_3 & = & \frac{c_3}{e_3} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & & & & \\ e_{n-1} & = & a_{n-1} - d_{n-2} f_{n-2} & f_{n-1} & = & b_{n-1} & d_{n-1} & = & \frac{c_{n-1}}{e_{n-1}} \\ e_n & = & a_n - d_{n-1} f_{n-1} & & & & & & \end{array} \qquad (3)$$

Zadatak 1. *Pokažite da je postupak LU-dekompozicije trodijagonalne matrice A provediv ako su svi njeni glavni minori različiti od nule. Uz pretpostavku $\Delta_0 = 1$ pokaĹľite da je*

$$e_k = \frac{\Delta_k}{\Delta_{k-1}}, \quad k = 1, \ldots, n.$$

U niže navedenom Mathematica*-modulu na što efikasniji način dodajte kontrolu mogućnosti provedbe postupka. U modulu predvidite mogućnost ispisa matrica L i U. Testirajte modul na velikim trodijagonalnim matricama kojima su elementi uniformno distribuirani cijeli brojevi na intervalu* $[0, 10]$. *Kontrolirajte vrijeme definiranja trodijagonalne matrice, postupka LU-dekompozicije i rješavanja odgovarajućeg sustava.*

Sada umjesto sustava $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$ promatramo sustav $\mathbf{LUx} = \mathbf{y}$. Ovaj sustav sukcesivno rješavamo tako da najprije riješimo donje trokutast sustav $\mathbf{Lz} = \mathbf{y}$, a nakon toga gornje trokutast sustav $\mathbf{Ux} = \mathbf{z}$. Rješenje i jednog i drugog sustava lako se može napisati u eksplicitnom obliku:

$$\begin{array}{lrcl} \mathbf{Lz} = \mathbf{y}: & z_1 & = & y_1 \\ & z_2 & = & y_2 - d_1 z_1 \\ & z_3 & = & y_3 - d_2 z_2 \\ & & \vdots & \\ & z_n & = & y_n - d_{n-1} z_{n-1} \end{array} \qquad \begin{array}{lrcl} \mathbf{Ux} = \mathbf{z}: & x_n & = & \frac{z_n}{e_n} \\ & x_{n-1} & = & \frac{1}{e_{n-1}} (z_{n-1} - f_{n-1} x_n) \\ & x_{n-2} & = & \frac{1}{e_{n-2}} (z_{n-2} - f_{n-2} x_{n-1}) \\ & & \vdots & \\ & x_1 & = & \frac{1}{e_1} (z_1 - f_1 x_2) \end{array} \qquad (4)$$

2 Programiranje

Najprije ćemo zadati red n matrice $\mathbf{A}$, vektor glavne dijagonale $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$, vektore sporednih dijagonala $\mathbf{b}, \mathbf{c} \in \mathbb{R}^{n-1}$ i vektor slobodnih koeficijenata $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ primjerice kako slijedi

```
In[1]:=n=5;
       a = Table[2i,{i,n}];
       b = Table[i-1, {i,n-1}];
       c = Table[i+1, {i, n-1}];
       y = Table[i, {i,n}];
```

Matricu $\mathbf{A}$ i vektor $\mathbf{y}$ možemo ispisati na sljedeći način

```
In[2]:=mat = Table[0, {i,n},{j,n}];
       Do[mat[[i,i]] = a[[i]], {i,n}];
       Do[mat[[i,i+1]] = b[[i]]; mat[[i+1,i]] = c[[i]], {i, n-1}];
       Print["A=", MatrixForm[mat], "   y=", MatrixForm[y]]
```

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 6 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 8 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 10 \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Nakon toga rezervirat ćemo mjesta za vektore **d, e, f** i prema (3) izračunati njihove komponente

```
In[3]:= d = e = f = Table[0, {i, n}];
         e[[1]] = a[[1]];
           Do[f[[i]] = b[[i]]; d[[i]] = c[[i]]/e[[i]];
               e[[i + 1]] = a[[i + 1]] - d[[i]] f[[i]]
               , {i, n - 1}]
```

Nakon toga rezervirat ćemo mjesta za vektore **z, x**, prema (4) izračunati njihove komponente, i ispisati rješenje

```
In[4]:= z = x = Table[0, {i, n}];
         z[[1]] = y[[1]];
             Do[z[[i]] = y[[i]] - d[[i - 1]] z[[i - 1]], {i, 2, n}]
                Print["z= ", z // N]
         x[[n]] = z[[n]]/e[[n]];
             Do[x[[n - i]] = (z[[n - i]] - f[[n - i]] x[[n - i + 1]])/e[[n - i]], {i, 1, n - 1
                Print["x= ", x // N]
```

Dobivamo

$$z = \{1., 0., 1., 0.238095, 0.816176\}$$

$$x = \{0.5, -0.0488038, 0.195215, -0.0124402, 0.10622\}$$

Cijeli program možemo organizirati u obliku jednog *Mathematica*–modula, kojeg ćemo nazvati `LUtri`.

```
In[1]:= LUtri[a_, b_, c_, y_] := Module[{n = Length[a], d, e, f, x, z},
             d = e = f = x = z = Table[0, {i, n}];
                          (* LU dekompozicija *)
             e[[1]] = a[[1]];
               Do[f[[i]] = b[[i]]; d[[i]] = c[[i]]/e[[i]];
                 e[[i + 1]] = a[[i + 1]] - d[[i]] f[[i]]
                    , {i, n - 1}];
                     (* Rjesavanje sustava Lz=y i Ux=z *)
             z[[1]] = y[[1]];
                Do[z[[i]] = y[[i]] - d[[i - 1]] z[[i - 1]], {i, 2, n}];
                   x[[n]] = z[[n]]/e[[n]];
                Do[x[[n - i]] = (z[[n - i]] - f[[n - i]] x[[n - i + 1]])/
                        e[[n - i]], {i, 1, n - 1}]; x // N
                            ]
```

Nakon definiranja i ispisa podataka, pozovemo modul `LUtri` i ispišemo rezultate.

```
In[2]:= n=5;
        a = Table[2i, {i,n}]; b = Table[i-1, {i, n-1}]; c = Table[i+1, {i,n-1}];
        y = Table[i, {i,n}];
        A = Table[0, {i,n}, {j,n}];
           Do[ A[[i,i]] = a[[i]], {i,n}];
           Do[ A[[i,i+1]] = b[[i]]; A[[i+1,i]] = c[[i]], {i, n-1}];
        Print["A=", MatrixForm[A], "   y=", MatrixForm[y]]
        x = LUtri[n, a, b, c, y];
        Print["x = ", x ]
```

Dobivamo

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 6 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 8 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 10 \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$x = \{0.5, -0.0488038, 0.195215, -0.0124402, 0.10622\}$$

Primjer 1. *Definirajmo trodijagonalnu matricu reda $n = 3\,000$ i vektor slobodnih koeficijenata čiji su dijagonalni elementi uniformno distribuirani slučajni brojevi na $[0, 100]$:*

```
In[1]:= n = 3000; SeedRandom[13];
        a = Table[Random[Real, {0, 100}], {i, n}];
        b = Table[Random[Real, {0, 100}], {i, n - 1}];
        c = Table[Random[Real, {0, 100}], {i, n - 1}];
        y = Table[Random[Real, {0, 100}], {i, n}];
```

Pozivanjem modula `LUtri` *dobivamo rezultat u puno kraćem vremenu nego korištenjem originalnog* Mathematica *programa*

```
In[2]:= A = Table[0, {i, n}, {j, n}];
        Do[A[[i, i]] = a[[i]], {i, n}];
          Do[A[[i, i + 1]] = b[[i]]; A[[i + 1, i]] = c[[i]], {i, n - 1}];
             (* Print["A=", MatrixForm[A], "   y=", MatrixForm[y]]  *)
                x2 = Timing[LUBackSubstitution[LUDecomposition[A], y]]; x2[[1]]
```

Modulom `LUtri` *lako možemo riješiti i puno veći trodijagonalni sustav. Originalni* Mathematica *program dalje ovisi o veličini memorije računala.*

Zadatak 2. (LU – dekompozicija ciklične trodijagonalne matrice)

Konstruirajte LU – dekompoziciju tzv. ciklične trodijagonalne matrice (vidi primjerice [4],[11])

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & c_1 \\ c_2 & a_2 & b_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & c_3 & a_3 & b_3 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{n-1} & b_{n-1} \\ b_n & 0 & 0 & 0 & \cdots & c_n & a_n \end{bmatrix}$$

Izvedite eksplicitne formule za rjesenje sustava $\mathbf{Ax}=\mathbf{y}$. *Izradite odgovarajući program.*

Zadatak 3. Rješavanje vrpčastih sustava primjenom LU-dekompozicije
Specijalizirajte LU-dekompoziciju za slučaj velikih vrpčastih sustava koji se javljaju prilikom rješavanja rubnih problema uz maleni korak. Konzultirajte [4], [5], [7], [8], [10], [11], [13].

Zadatak 4. Rješavanje trodijagonalnog simetričnog sustava. *Napravite Cholesky dekompoziciju trodijagonalne simetrične matrice* $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, *tj. pronađite donje trokutastu matricu* $L \in \mathbb{R}^{n\times n}$, *takvu da je* $A = LL^T$. *Koji uvjet moraju ispunjavati elementi matrice* A *da bi ova dekompozicija bila provediva? Napišite eksplicitne formule za rjesavanje sustava* $Ax = y$, *gdje je* A *trodijagonalna simetrična matrica. Izradite odgovarajuci* Mathematica-*modul i testirajte ga na velikim sustavima.*

Primjer 2. *Rubni problem (primjerice harmonijski oscilator i problem rezonancije)*

$$y'' = f(x, y, y'), \qquad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta$$

ili specijalno:

$$y'' + p(x)y' + q(x)y = f(x), \qquad y(a) = \alpha, \quad y(b) = \beta \tag{5}$$

može se riješiti metodom konačnih diferencija:

Interval $[a, b]$ podijelit ćemo na n jednakih dijelova, stavljajući:

$$h = \frac{b-a}{n}, \quad x_i = a + ih.$$

Prvu (y') i drugu (y'') derivaciju funkcije y u točkama $x_1 < x_2 < \cdots < x_{n-1}$ možemo aproksimirati formulama:

$$y'(x_k) \approx \frac{y_{k+1} - y_{k-1}}{2h}, \quad y''(x_k) \approx \frac{y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}}{h^2}.$$

Naime, primjenom Taylorove formule na funkciju y u okolini toćke $a \in (a, b)$ dobivamo

$$y(x) \approx y(a) + y'(a)(x - a)$$

odnosno uz oznaku $\Delta x = x - a$,

$$y(a + \Delta x) \approx y(a) + \Delta x y'(a),$$

pri čemu Δx može biti i pozitivan i negativan. Za $\Delta x = h$, odnosno $\Delta x = -h$ dobivamo

$$y(a + h) \approx y(a) + hy'(a), \quad \text{odnosno} \quad y(a - h) \approx y(a) - hy'(a).$$

Oduzimajući ove dvije jednakosti, dobivamo

$$y'(a) \approx \frac{y(a + h) - y(a - h)}{2h}. \tag{6}$$

Slično, zbrajajući jednakosti

$$y(a+h) \approx y(a) + hy'(a) + \tfrac{h^2}{2} y''(a),$$
$$y(a-h) \approx y(a) - hy'(a) + \tfrac{h^2}{2} y''(a),$$

dobivamo

$$y''(a) \approx \frac{y(a+h) - 2y(a) + y(a-h)}{h^2}. \tag{7}$$

Na taj način rubni problem (5) svodi se na rješavanje sustava tzv. diferencijskih jednadžbi:

$$\frac{y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}}{h^2} + p_k \frac{y_{k+1} - y_{k-1}}{2h} + q_k y_k = f_k, \quad k = 1, 2, \ldots, n-1, \tag{8}$$

gdje je

$$y_k = y(x_k), \quad p_k = p(x_k), \quad q_k = q(x_k), \quad f_k = f(x_k),$$

pri čemu je specijalno: $y_0 = \alpha, \quad y_n = \beta$.

Primijetite da je (8) trodijagonalan sustav linearnih jednadžbi.

Zadatak 5. (Metoda konačnih diferencija za rješavanje rubnih problema)

Neka su $f : \Omega \mapsto \mathbb{R}^2, \quad \Omega \subset \mathbb{R}^2$ *i* $\varphi : \partial\Omega \mapsto \mathbb{R}^2$ *neprekidne funkcije. Traži se* $u \in C^2(\Omega \cup \partial\Omega)$ *koja je rješenje* rubnog problema za Poissonovu diferencijalnu jednadžbu:

$$\tfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \tfrac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x,y), \quad (x,y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2,$$
$$u(x,y) = \varphi(x,y), \qquad (x,y) \in \partial\,\Omega.$$

Za $\Omega = \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 : 0 \le x \le 1, \quad 0 \le y \le 1\}$ *i* $h = 1/3$ *riješite problem direktno primjenom LU-dekompozicije i primjenom* Jacobijeve Gauss-Seidelove *i* SOR *metode. Uz točnost rješenja na 6 signifikantnih znamenki provjerite brzinu iterativnog postupka spomenutih iterativnih metoda*

a) u slučaju $f(x,y) \equiv 0$ *i*

$$\varphi(x,y) = \begin{cases} 4\,500x(1-x) & (x,y) \in \partial\,\Omega \quad \& \quad y = 1 \\ 0 & (x,y) \in \partial\,\Omega \quad \& \quad y \ne 1 \end{cases},$$

b) u slučaju $f(x,y) = x + y + 1$ *i* $\varphi(x,y) = 1 + x^2$.

Razmotrite prethodne probleme za $h = \frac{1}{40}$. *Konzultirajte [5], [7], [10], [16],*

Zadatak 6. Metoda konačnih diferencija za rješavanje jednadžbe provođenja toplinerubnih problema - Parabolička jednadžba

Promatrajte jednadžbe provođenja topline (parabolička jednadžba)

$$\tfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \tfrac{\partial u}{\partial t}, \qquad (t \ge 0, \quad 0 \le x \le 1),$$
$$u(x,0) = g(x), \quad (0 \le x \le 1)$$
$$u(0,t) = a(t), \quad (t \ge 0)$$
$$u(1,t) = b(t), \quad (t \ge 0)$$

te primjere

a)

$$g(x) = \sum_{i=1}^{n} c_i \sin(i\pi x), \qquad a(t) = b(t) = 0$$

Rješenje usporedite s egzaktnim rješenjem $u(x,t) = \sum_{i=1}^{n} c_i e^{-i^2\pi^2 t} \sin(i\pi x)$.

b)

$$g(x) = \sin(\pi x), \qquad a(t) = b(t) = 0$$

Rješenje usporedite s egzaktnim rješenjem $u(x,t) = e^{-\pi^2 t} \sin(\pi x)$.

Literatura

[1] G. Dahlquist, A. Björck *Numerische Methoden*, R. Oldenbourg Verlag, München, Wien, 1972. (postoji i engleski prijevod)

[2] J. W. Demel, *Applied Numerical Linear Algebra*, SIAM, Philadelphia, 1997.

[3] P. E. Gill, W. Murray and M. H. Wright, *Numerical Linear Algebra and Optimization*, Vol.1., Addison-Wesley Publishing Company, New York, 1991.

[4] G. H. Golub, C. F. van Loan *Matrix Computations*, The J.Hopkins University Press, Baltimore and London, 1996.

[5] D. Kincaid,W. Cheney, *Numerical Analysis*, Brooks/Cole Publishing Company, New York, 1996.

[6] S. Kurepa, *Matematička analiza I*, Tehnička knjiga, Zagreb, 1979.

[7] *The NAG Library:*

[8] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, *Numerical Recipes*, Cambridge University Press, Cambridge, 1989.

[9] H. R. Schwarz, *Numerische Mathematik*, Teubner, Stuttgart, 1986.

[10] R. Scitovski, *Numerička matematika*, Odjel za matematiku, Sveučilište u Osijeku, Osijek, 2000

[11] H. Späth, *Spline–Algoritmen zur Konstruktion glatter Kurven und Flächen*, R. Oldenbourg Verlag, Nünchen, 1973.

[12] J. Stoer, R. Bulirsch *Numerische Mathematik II*, 3. Auflage, Springer-Verlag, Berlin, 1990.

[13] J. Stoer, R. Bulirsch, *Introduction to Numerical Analysis*, Springer-Verlag, New York, 1993.

[14] V.Šimić, *Otpornost materijala I, II*, Školska knjiga, Zagreb, 2002.

[15] L. N. Trefethen, D. Bau, *Numerical Linear Algebra*, SIAM, Philadelphia, 1997.

[16] D. M. Young, *Iterative Solution of Large Linear Systems*, Dover Publications, Inc., New York, 2003.

[17] S. Wolfram, *The Mathematica Book*, Wolfram Media, Champaign, 1998.