Laboratorium z Metod Numerycznych
Sprawozdanie

Autor Łukasz Gut - WFiIS, Informatyka Stosowana, Rok 2.
2 marca 2019

Laboratorium nr 1 - Odwracanie macierzy, obliczanie wyznacznika i wskaźnika uwarunkowania macierzy przy użyciu rozkładu LU

Cel laboratorium

Celem pierwszego laboratorium było zapoznanie się z biblioteką GSL (GNU Scientific Library) i wykorzystanie jej do napisania programu znajdującego macierz odwrotną, wyznacznik oraz wskaźnik uwarunkowania przy użyciu rozkładu LU.

Wstęp teoretyczny

Macierz - dwuwymiarowy obiekt matematyczny zawierający liczby, symbole lub wyrażenia. Bardzo często reprezentowany za pomocą prostokątnej tablicy.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

Rys. 1 - Macierz

Na macierzach zdefiniowane są takie działania jak dodawanie/odejmowanie, mnożenie macierzy przez skalar, oraz mnożenie macierzy przez inną macierz.

Z macierzami można związać wiele odwzorowań w różne przestrzenie, a także można je grupować ze względu na różne własności. W dzisiejszym zagadnieniu będą nas interesowały jedynie najprostsze odwzorowania takie jak wyznacznik macierzy oraz podstawowe rodzaje macierzy: trójkątna i odwrotna.

Macierz trójkątna - macierz, w której wszystkie współczynniki na głównej diagonali oraz pod (lub nad) nią są niezerowe.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

Rys. 2 - Przykład macierzy trójkątnej górnej

Macierz odwrotna - element odwrotny w pierścieniu (strukturze algebraicznej dla której zdefiniowane zostało dodawanie, odejmowanie oraz mnożenie) macierzy kwadratowych. Macierze odwrotne możemy traktować jak "uogólnienie" znanych nam liczb odwrotnych zdefiniowanych w dziedzinie rzeczywistej, ponieważ ich idea jest ta sama - tak jak iloczyn liczby i jej odwrotności daje w wyniku jedynkę, tak iloczyn macierzy oraz jej odwrotności zwraca macierz jednostkową (taką, która na głównej przekątnej ma same jedynki). Mówimy, że macierz jest odwracalna, gdy zachodzi poniższa równość:

$$A * A^{-1} = I\,,$$

gdzie: $A\ -\ macierz,\ A^{-1} - macierz\ odwrotna\ do\ macierzy\ A,\ I\ -\ macierz\ jednostkowa$.

Aby macierz była odwracalna jej wyznacznik musi być różny od 0!

Wyznacznik macierzy - odwzorowanie przyporządkowujące macierzy kwadratowej o współczynnikach z pewnego pierścienia przemiennego (struktura pierścienia z dodatkowo zapewnioną przemiennością mnożenia) pewien element z tego pierścienia.

Rozkład LU (Lower-Upper) - w analizie numerycznej oraz algebrze liniowej rozkładem LU nazywamy dekompozycję pewnej macierzy na dwie inne, tak aby zachowana została relacja:

$$A\ =\ L * U$$

Dodatkowo macierze L oraz U muszą spełniać następujące warunki:

- L musi być macierzą trójkątną dolną oraz zawierać same jedynki na głównej diagonali
- U musi być macierzą trójkątną górną (nie musi zawierać jedynek na głównej diagonali)

Do znalezienia macierzy L i U wykorzystuje się metodę eliminacji Gaussa. Głównymi zaletami rozkładu LU jest to, że za jego pomocą można:

- Wydajnie rozwiązywać duże układy równań
- W miarę optymalnie znajdować macierz odwrotną
- Obliczyć wyznacznik
- Zużywać niewielką ilość pamięci (macierze L i U jesteśmy w stanie "trzymać" w jednym obiekcie ze względu na ich charakterystykę)

Jest to jedna z podstawowych metod numerycznych. Jej autorem jest Tadeusz Banachiewicz.

Wskaźnik uwarunkowania macierzy - w analizie numerycznej jest to narzędzie do określania w jakim stopniu błąd reprezentacji numerycznej danych wejściowych problemu wpływa na błąd wyniku. Problemy o niskim wskaźniku uwarunkowania nazywamy **dobrze uwarunkowanymi**, zaś o wysokim **źle uwarunkowanymi**. Wskaźnik ten obliczamy jako iloczyn dwóch norm (często różnie zdefiniowanych).

$$\kappa(A) = ||A^{-1}|| * ||A||$$

W naszym przypadku normę definiujemy następująco:

$$||A|| = max(a_{i,j}),\ dla\ i,j \in [0, n-1],$$

gdzie: $n - rozmiar\ macierzy$.

Problem

Problemem, z którym przyszło nam się zmierzyć na pierwszych laboratoriach był problem odwrócenia macierzy, obliczenia jej wyznacznika oraz obliczenia wskaźnika uwarunkowania przy pomocy metody rozkładu LU.

Macierzą, na której mieliśmy operować była macierz kwadratowa o A rozmiarach $4x4$, zdefiniowana następująco:

$$a_{i,j} = \frac{1}{i+j+\delta},$$

gdzie: $a_{i,j} - element\ macierzy,\ i - numer\ wiersza,\ j - numer\ kolumny,\ \delta = 2$.

Wyniki

Poniżej prezentuję wyniki działania programu.

Zdefiniowana macierz A:

$$\begin{bmatrix} 0.5 & 0.333333 & 0.25 & 0.2 \\ 0.333333 & 0.25 & 0.2 & 0.166667 \\ 0.25 & 0.2 & 0.166667 & 0.142857 \\ 0.2 & 0.166667 & 0.142857 & 0.125 \end{bmatrix}$$

Rys. 3 - Macierz A

Elementy na głównej diagonali macierzy LU:

$a_{0,0} = \quad 0.5$

$a_{1,1} = \quad 0.0333333$

$a_{2,2} = -0.00138889$

$a_{3,3} = \quad 0.000102041$

Wyznacznik macierzy A:

$$det(A) = 2.36206 * 10^{-9}$$

Macierz odwrotna do macierzy A:

$$\begin{bmatrix} 200 & -1200 & 2100 & -1120 \\ -1200 & 8100 & -15120 & 8400 \\ 2100 & -15120 & 29400 & -16800 \\ -1120 & 8400 & -16800 & 9800 \end{bmatrix}$$

Rys. 4 - Macierz A^{-1}

Iloczyn $A * A^{-1}$:

$$\begin{bmatrix} 1 & -2.27374 * 10^{-13} & 0 & 0 \\ -2.84217 * 10^{-14} & 1 & 4.54747 * 10^{-13} & 0 \\ 0 & -2.27374 * 10^{-13} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Rys. 5 - Macierz $A * A^{-1}$

Wskaźnik uwarunkowania macierzy:

$$\kappa(A) = 14700$$

Wnioski

Zastosowanie rozkładu LU do znajdowania macierzy odwrotnej oraz wyznacznika w naszym przypadku okazało się całkiem szybkie oraz na pierwszy rzut oka dokładne. Piszę na pierwszy rzut oka, ponieważ gigantyczny wskaźnik uwarunkowania macierzy pokazuje nam, że w tym przypadku nawet niewielki błąd w reprezentacji numerycznej danych wejściowych może okazać się katastrofalny dla naszych wyników.

Warto również zauważyć, że stosując rozkład LU możemy w sposób trywialny obliczyć wyznacznik macierzy, mianowicie mnożąc przez siebie jedynie elementy na głównej diagonali. Jest to możliwe dzięki temu, że wyznacznik macierzy trójkątnej możemy obliczyć wymnażając elementy takiej macierzy na głównej diagonali, zaś z prawa Cauchy'ego wiemy, że:

$$det(A * B) = detA * detB$$