Metody numeryczne

Laboratorium 2

Odwracanie macierzy, obliczanie wyznacznika i wskaźnika uwarunkowania macierzy przy użyciu rozkładu LU

12.03.2020r.

Adrian Furman

1. Wstęp teoretyczny [1]

Rozkładem LU macierzy A nazywamy procedurę wyznaczania macierzy L oraz U, których iloczyn daje w wyniku macierz wejściową A:

$$A = L \cdot U$$

Schemat postępowania opiera się na metodzie eliminacji Gaussa. W pierwszym kroku, wiersz pierwszy mnożymy przez czynnik:

$$l_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{1}}$$

i odejmujemy go od i-tego wiersza (i = 2, 3, … , n). Takie działanie równoważne jest lewostronnym przemnożeniu równania macierzowego $A \cdot \vec{x} = \vec{b}$ przez macierz L:

$$L^{(1)} A^{(1)} = A^{(2)},$$

$$L^{(1)} \vec{b}^{(1)} = \vec{b}^{(2)},$$

gdzie:

$$L^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ -l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -l_{n1} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

Analogicznie postępujemy eliminując zmienną x_2 z wierszy (równań) i = 3, 4, …, n. Działamy oczywiście na zmodyfikowanym układzie równań: $A^{(2)}$, $\vec{b}^{(2)}$. Wiersze i, mnożymy tym razem przez:

$$l_{i2} = \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{2}}.$$

Teraz mamy:

$$L^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & -l_{n2} & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$L^{(2)} A^{(2)} = A^{(3)},$$

$$L^{(2)} \vec{b}^{(2)} = \vec{b}^{(3)}.$$

Wykonujemy n-1 analogicznych operacji w rezultacie otrzymujemy:

$$L^{(n-1)} L^{(n-2)} \cdots L^{(1)} A^{(1)} = A^{(n)},$$

$$L^{(n-1)} L^{(n-2)} \cdots L^{(1)} \vec{b}^{(1)} = \vec{b}^{(n)}.$$

Jako że każda z macierzy $L^{(i)}$ jest nieosobliwa, dla każdej z nich istnieje macierz odwrotna. Fakt ten pozwala nam z powyższych równań wyznaczyć $A^{(1)}$ oraz $\vec{b}^{(1)}$:

$$A^{(1)} = (L^{(1)})^{-1} (L^{(2)})^{-1} \cdots (L^{(n-1)})^{-1} A^{(n)},$$

$$\vec{b}^{(1)} = (L^{(1)})^{-1} (L^{(2)})^{-1} \cdots (L^{(n-1)})^{-1} \vec{b}^{(n)}.$$

Finalnie wprowadzamy oznaczenia:

$$L = (L^{(1)})^{-1} (L^{(2)})^{-1} \cdots (L^{(n-1)})^{-1},$$

$$U = A^{(n)} = \left(L^{(n-1)} L^{(n-2)} \cdots L^{(1)} A^{(1)}\right) \ A^{(1)},$$

$$A = L \cdot U.$$

Wynikowe macierze są następującej postaci (przykład dla 4 wymiarów):

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & 1 \end{pmatrix} \qquad U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{pmatrix}$$

Istotnym faktem jest łatwość znalezienia macierzy odwrotnej dla $L^{(i)}$, w tym celu wystarczy w i-tej kolumnie rozważanej macierzy zmienić znaki przy czynnikach l. Na przykład:

$$L^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ -l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -l_{n1} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \qquad (L^{(1)})^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

2. Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

Podczas zajęć przy użyciu biblioteki GSL pracowaliśmy na macierzy 4x4 wypełnionej zgodnie z następującym wzorem:

$$a_{i,j} = \frac{1}{i+j+\delta}, \text{ gdzie } \quad \delta = 2.$$

Na tak powstałej macierzy dokonaliśmy rozkładu LU przy użyciu funkcji gsl_linalg_LU_decomp. Kolejnym krokiem było obliczenie wyznacznika macierzy A. Z racji posiadanego rozkładu LU, podstawowych własności wyznacznika macierzy oraz faktu iż macierz L jest macierzą trójkątną dolną z samymi jedynkami na diagonali, szukany wyznacznik równy jest iloczynowi elementów diagonalnych macierzy U.

Następnym zadaniem było obliczenie macierzy odwrotnej A^{-1}. W tym celu za pomocą funkcji gsl_linalg_LU_solve rozwiązaliśmy 4 układy równań, w których wektory wyrazów wolnych były kolejnymi kolumnami macierzy jednostkowej 4x4:

$$b_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad b_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad b_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad b_4 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Kolejnym posunięciem było obliczenie iloczynu $A \cdot A^{-1}$, który zgodnie z teorią algebry liniowej powinien dać w wyniku macierz jednostkową.

Ostatnią czynnością było obliczenie wskaźnika uwarunkowania macierzy – czyli iloczynu norm macierzy wejściowej i macierzy do niej odwrotnej:

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

gdzie norma to w tym przypadku maksymalny moduł elementu:

$$\|A\|_{1\infty} = max_{i,j}|a_{ij}|.$$

Wskaźnik uwarunkowania informuje nas w jakim stopniu błąd reprezentacji numerycznej danych wejściowych wpływa na błąd wyniku.

2.2 Wyniki

Funkcja z biblioteki GSL: gsl_linalg_LU_decomp w wyniku swojego działania modyfikuje wejściową macierz w taki sposób, że zawarte są w niej obie macierze L oraz U:

$$A' = \begin{pmatrix} 0.5 & 0.333333 & 0.25 & 0.2 \\ l_{21} & 0.0333333 & 0.0416667 & 0.0428571 \\ l_{31} & l_{32} & -0.00138889 & -0.00238095 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & 0.000102041 \end{pmatrix},$$

gdzie górna część macierzy wraz z diagonalą to macierz U, natomiast jej dolna część pod diagonalą to fragment macierzy L, który należy uzupełnić jedynkami na diagonali:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0.5 & 1 & 0 & 0 \\ 0.666667 & 0.833333 & 1 & 0 \\ 0.4 & 1 & -0.857143 & 1 \end{pmatrix},$$

$$U = \begin{pmatrix} 0.5 & 0.333333 & 0.25 & 0.2 \\ 0.5 & 0.0333333 & 0.0416667 & 0.0428571 \\ 0.666667 & 0.833333 & -0.00138889 & -0.00238095 \\ 0.4 & 1 & -0.857143 & 0.000102041 \end{pmatrix}.$$

Jak wcześniej wspomniano, wyznacznik macierzy A odpowiada iloczynowi elementów na diagonali macierzy U, co w wyniku daje:

$$\det A = sgn * \det(LU) = sgn * detL * detU = sgn * 1 * \mathrm{detU} = 2.362056\text{e-}09$$

gdzie sgn to znak permutacji ustawiany przez funkcję rozkładu LU.

Macierz odwrotna uzyskana w efekcie rozwiązania wspomnianych układów równań przy pomocy funkcji biblioteki GSL prezentuje się w następujący sposób:

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 200 & -1200 & 2100 & -1120 \\ -1200 & 8100 & -15120 & 8400 \\ 2100 & -15120 & 29400 & -16800 \\ -1120 & 8400 & -16800 & 9800 \end{pmatrix},$$

Podczas obliczeń macierzy odwrotnej, a dokładniej rozwiązywania układów równań należało mieć na uwadze obecność wektora permutacji tworzonego przez funkcję rozkładu LU.

Zaskoczeniem był iloczyn $A \cdot A^{-1}$, który nie dał w rezultacie idealnej macierzy jednostkowej, mianowicie poza jedynkami na diagonali pojawiły się również inne wyrazy jednak o bardzo małych wartościach:

$$A \cdot A^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -2.273737\text{e-}13 & 0 & 0 \\ -2.2842171\text{e-}14 & 1 & 4.547474\text{e-}13 & 0 \\ 0 & -2.273737\text{e-}13 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

Trochę światła na uzyskane zaburzenia iloczynu macierzy $A \cdot A^{-1}$, rzuciła nam wartość wskaźnika uwarunkowania macierzy, którego wartość wyniosła:

$$\kappa(A) = 14700.$$

Jest to wysoka wartość, która świadczy o tym, że problem nie jest najlepiej uwarunkowany.

3. Wyniki

Za pomocą rozkładu LU możemy w łatwy sposób obliczyć wyznacznik macierzy, daje nam on także kolejny sposób na wyznaczenie macierzy odwrotnej. W naszym przypadku uzyskaliśmy jednak pewne zaburzenia w iloczynie $A \cdot A^{-1}$. Mogło być to spowodowane znacznymi różnicami rzędów wielkości elementów macierzy wejściowej oraz tej do niej odwrotnej. Również elementy macierzy wejściowej nie sprzyjały obliczeniom numerycznym ze względu na brak ich dokładnej reprezentacji binarnej (okresowe liczby zmiennoprzecinkowe itp.). W tym przekonaniu utwierdza nas wartość wskaźnika uwarunkowania macierzy, której wysokość daje nam powody do stwierdzenia, że dla naszych danych wejściowych, metoda rozkładu LU nie należy do optymalnych.

4. Literatura

[1] – Wykład dr. Tomasza Chwieja - „Rozwiązywanie algebraicznych układów równań liniowych metodami bezpośrednimi ”.