Sprawozdanie 2
Odwracanie macierzy, obliczanie wyznacznika i wskaźnika uwarunkowania macierzy przy użyciu rozkładu LU

Yuliya Zviarko

04.03.2024

1 Wstęp teoretyczny

1.1 Rozkład LU

Rozkład LU to proces mający na celu znalezienie macierzy L – dolnotrójkątnej (ang. lower) i **U** – górnotrójkątnej (ang. upper) w taki sposób, aby iloczyn tych macierzy równał się pierwotnej macierzy A. Macierz A jest opisana wzorem:

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{U}, \tag{1}$$

gdzie:

$$\boldsymbol{L} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nm} \end{bmatrix}, \tag{2}$$

$$\boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} u_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ u_{21} & u_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ u_{n1} & u_{n2} & \cdots & u_{nm} \end{bmatrix}. \tag{3}$$

Aby uzyskać jednoznaczny rozkład LU macierzy A, przyjmuje się, że elementy na diagonali jednej z tych macierzy są równe **1**. Istnieje wiele metod prowadzących do takiego rozkładu, takich jak metoda Gaussa, metoda Doolittle'a oraz metoda Crouta (gdzie jedynki znajdują się na przekątnej macierzy U zamiast L).

Zalety rozkładu LU obejmują:

- Wydajne zarządzanie pamięcią - macierz A może zostać zastąpiona przez swój rozkład LU.
- Minimalna liczba operacji w porównaniu z innymi precyzyjnymi metodami (bez uwzględniania specjalnych procedur).

1.2 Zastosowanie rozkładu LU

1.2.1 Obliczanie wyznacznika macierzy A

Wyznacznik macierzy A można obliczyć jako iloczyn elementów diagonalnych macierzy **U** w jej rozkładzie **LU**. Ponieważ elementy na diagonali macierzy **L** są jedynkami, uwzględniamy jedynie elementy macierzy **U**.
Obliczenie wyznacznika macierzy, gdy znany jest jej rozkład **LU**, jest trywialnie proste. Ponieważ wyznacznik macierzy trójkątnej jest iloczynem elementów na jej przekątnej, $\boldsymbol{det(A)}$ jest wyrażony wzorem:

$$det(A) = det(L \cdot U) = det(L) \cdot det(U), \tag{4}$$

gdzie:

$$det(L) = l_{11} \cdot l_{22} \cdot \ldots \cdot l_{nn}, \tag{5}$$

$$det(U) = u_{11} \cdot u_{22} \cdot \ldots \cdot u_{nn}. \tag{6}$$

Dodatkowo, zazwyczaj na przekątnej jednej z tych macierzy znajdują się same jedynki, co upraszcza równanie do

$$\begin{gathered} det(A) = det(L) \\ lub \\ det(A) \; = \; det(L). \end{gathered} \tag{7}$$

To znaczenie redukuje liczbę wymaganych mnożeń z **(2n-1)** do **(n-1)**.

1.2.2 Rozwiązywanie algebraicznych układów równań liniowych

Rozważamy układ równań liniowych:

$$A \cdot x = y. \tag{8}$$

Po dokonaniu rozkładu LU układ przyjmuje postać:

$$L \cdot U \cdot x = y. \tag{9}$$

Aby otrzymać wektor rozwiązania x, należy rozwiązać dwa układy równań z macierzami trójkątnymi:

$$L \cdot z = y, \tag{10}$$

$$U \cdot x = z. \tag{11}$$

Ostateczna ilość mnożeń potrzebna do uzyskania wektora $\boldsymbol{x}$ wynosi $\boldsymbol{n^2}$, a dodawań $\boldsymbol{n^2 - \; n}$.

1.2.3 Znajdywanie macierzy odwrotnej A^{-1}

Rozkład LU można wykorzystać do odwracania macierzy. Proces ten polega na rozwiązaniu $\boldsymbol{n}$ układów równań liniowych z wektorami wyrazów wolnych w postaci:

$$L \cdot z_i = e_i, \tag{12}$$

gdzie $\boldsymbol{e_i}$ to i-ty wektor standardowy, czyli wektor składający się z samych zer, z jedynką na i-tej pozycji. Następnie, dla każdego rozwiązania $\boldsymbol{z_i}$, rozwiązujemy układ równań

$$U \cdot x_i = z_i, \tag{13}$$

Ostatecznie, otrzymane wektory rozwiązań x_i stanowią kolumny macierzy odwrotnej $\boldsymbol{A^{-1}}$. W ten sposób odwracamy macierz $\boldsymbol{A}$ przy użyciu rozkładu **LU**:

$$A^{-1} = [x_1 x_2 \dots x_3], \tag{14}$$

Zastosowanie rozkładu LU do odwracania macierzy może być bardziej efektywne niż bezpośrednie wyznaczanie odwrotnej macierzy, szczególnie dla dużych macierzy, ze względu na wielokrotną używalność rozkładu dla różnych wektorów wyrazów wolnych.

1.2.3 Wskaźnik uwarunkowania macierzy

Wskaźnik uwarunkowania macierzy pokazuje nam jak bardzo zaburzenia danych wejściowych mają wpływ na błąd wyniku. Gdy wskaźnik jest w pobliżu 1, to znaczy, że błąd wyniku nie powinien być duży.

Wskaźnik ten obliczamy korzystając ze wzoru:

$$cond = \|A\|_{\alpha.\beta} \cdot \|A^{-1}\|_{\alpha.\beta}, \tag{15}$$

gdzie:

$$\|A\|_{1.\infty} = \max_{1 \le i,j \le n} |a_{i,j}|, \tag{16}$$

2 Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

Naszym zadaniem było stworzenie macierzy kwadratowej $\boldsymbol{A}$ o liczbie wierszy i kolumn równej 4, której elementy są zdefiniowane następująco:

$$a_{i,j} = \frac{1}{i+j+\delta}, \tag{17}$$

gdzie δ=2 dla biblioteki GSL oraz δ=0 dla NR.

Na etapie początkowym konieczne było uzyskanie rozkładu LU macierzy A za pomocą funkcji ***gsl_linalg_LU_decomp/ludcmp***. Funkcja ta zastępuje macierz A macierzami L i U.

Kolejnym krokiem było zapisanie do pliku elementów diagonalnych macierzy U, a także obliczenie z nich wyznacznika, który stanowił również wyznacznik dla macierzy A.

Potem, ważną rzeczą było znalezienie A^{-1} rozwiązując układ równań podany w podpunkcie 1.2.3. Do tego celu wykorzystaliśmy procedurę ***gsl_linalg_LU_solve/lubksb***. Jako rozwiązanie wyszły nam wektory $\overrightarrow{b_\iota}$, które następnie przekopiowaliśmy do macierzy A^{-1} i zapisaliśmy ją do pliku.

Następnym zadaniem było sprawdzenie czy nasza macierz A^{-1} jest prawidłowa, czyli obliczenie iloczynu $A \cdot A^{-1}$ i zapisanie do pliku. Iloczyn macierzy liczyliśmy ze wzoru:

$$C = A \cdot B, gdzie C_{i,j} = \sum_{k=0}^{n} A_{i,k} B_{k,j} \,. \tag{18}$$

Ostatnim etap – obliczenie i zapisanie do pliku wskaźnika uwarunkowania macierzy, tak jak w podpunkcie 1.2.3.

2.2 Wyniki

Macierz A stworzona na podstawie wzoru (17) miała postać:

$$A = \begin{pmatrix} 0.5 & 0.333333 & 0.25 & 0.2 \\ 0.333333 & 0.25 & 0.2 & 0.166667 \\ 0.25 & 0.2 & 0.166667 & 0.142857 \\ 0.2 & 0.166667 & 0.142857 & 0.125 \end{pmatrix}. \tag{19}$$

Po dokonaniu rozkładu LU otrzymaliśmy macierze:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0.5 & 1 & 0 & 0 \\ 0.666667 & 0833333 & 1 & 0 \\ 0.4 & 1 & -0.857143 & 1 \end{pmatrix}, \tag{20}$$

$$U = \begin{pmatrix} 0.5 & 0.333333 & 0.25 & 0.2 \\ 0 & 0.0333333 & 0.0416667 & 0.0428571 \\ 0 & 0 & -0.00138889 & -0.00238095 \\ 0 & 0 & 0 & 0.000102041 \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Wyznacznik det(A) = 2.36206e-09 wyszedł niezerowy więc można odwrócić macierz.
Wynik odwracania macierzy A wygląda w następujący sposób:

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 199.992 & -1199.95 & 2099.9 & -1119.95 \\ -1199.94 & 8099.62 & -15119.3 & 8399.65 \\ 2099.88 & -15119.3 & 29398.7 & -16799.3 \\ -1119.93 & 8399.58 & -16799.3 & 9799.61 \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Wynik mnożenia ma postać:

$$A \cdot A^{-1} = \begin{pmatrix} 0.999985 & 0 & -0.000976562 & 0.000244141 \\ -1.52588e-05 & 1 & -0.000732422 & 0.000244141 \\ 0 & 0.00012207 & 0.999756 & 0.000244141 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, (23)$$

Wskaźnik uwarunkowania macierzy $cond$ według równania (15) wyszedł 14699.4.

3 Wnioski

Wnioskuję z powyższego, że choć metoda LU jest szeroko stosowana z uwagi na swoją efektywność w miejscu oraz wydajność dla dużych ilości równań, to może być mniej odpowiednia w przypadkach, gdzie oczekiwana jest wysoka dokładność rozwiązania przy macierzach o znacznym współczynniku uwarunkowania. Warto rozważyć inne metody numeryczne, które mogą lepiej radzić sobie z tego typu przypadkami.