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

Michał Saturczak
Informatyka Stosowana, Akademia Górniczo-Hutnicza
Metody Numeryczne

6 marca 2024

1 Wstęp teoretyczny

Metoda LU (Lower-Upper) to algorytm z dziedziny algebry liniowej używany do rozwiązywania układów równań liniowych, obliczania determinantów i tworzenia odwrotności macierzy. Nazwa metody pochodzi od faktu, że macierz wejściową rozkłada na iloczyn dwóch macierzy: dolnotrójkątnej (Lower, L) i górnotrójkątnej (Upper, U).

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{U} \tag{1}$$

L jest macierzą dolnotrójkątną (wszystkie elementy powyżej głównej przekątnej są równe zero), a U jest macierzą górnotrójkątną (wszystkie elementy poniżej głównej przekątnej są równe zero). Rozkład LU ma wiele zastosowań. Na przykład, rozwiązanie układu równań liniowych

$$\mathbf{A}\vec{x} = B \tag{2}$$

może być uproszczone do rozwiązania dwóch układów równań liniowych:

$$\mathbf{L}\vec{y} = \vec{b} \tag{3}$$

$$\mathbf{U}\vec{x} = \vec{y} \tag{4}$$

Ponieważ L i U są macierzami trójkątnymi, te układy równań są łatwiejsze do rozwiązania.

Rozkład LU nie zawsze istnieje dla każdej macierzy, ale istnieje dla wielu ważnych klas macierzy, w tym dla macierzy regularnych oraz dla macierzy symetrycznych dodatnio określonych. W praktyce, algorytm rozkładu LU jest często połączony z częściowym wyborem elementu głównego (pivoting) dla zwiększenia stabilności numerycznej.

Metoda LU jest podstawą wielu algorytmów w algebrze liniowej, a jej zrozumienie jest kluczowe dla wielu dziedzin nauki i inżynierii.

Wyznacznik macierzy A można obliczyć jako iloczyn wyznaczników macierzy L i U. Dla macierzy trójkątnych, wyznacznik jest równy iloczynowi elementów na głównej przekątnej.W standardowym rozkładzie LU macierzy, macierz dolnotrójkątna ma jedynki na głównej przekątnej. Dlatego wyznacznik macierzy L jest zawsze równy 1. Zatem:

$$\det(\mathbf{A}) = \det(\mathbf{L} \cdot \mathbf{U}) = \det(\mathbf{L}) \cdot \det(\mathbf{U}) = 1 \cdot \det(\mathbf{U}) = \det(\mathbf{U}) \tag{5}$$

Wskaźnik uwarunkowania macierzy jest miarą, jak bardzo wynik systemu równań liniowych może zmienić się w wyniku niewielkich zmian w wektorze wyrazów wolnych. Innymi słowy, jest to miara, jak wrażliwy jest system na błędy wejściowe.

Wskaźnik uwarunkowania macierzy A jest zdefiniowany jako iloczyn normy macierzy A i normy jej macierzy odwrotnej A^{-1}:

$$\kappa(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\| \tag{6}$$

Wskaźnik uwarunkowania zależy od wyboru normy, ale dla dowolnej normy, wskaźnik uwarunkowania macierzy jest zawsze większy lub równy 1.

Jeśli wskaźnik uwarunkowania jest bliski 1, mówimy, że problem jest dobrze uwarunkowany, co oznacza, że niewielkie zmiany wejść powodują tylko niewielkie zmiany wyników. Jeżeli wskaźnik uwarunkowania jest dużo większy od 1, problem jest źle uwarunkowany, co oznacza, że niewielkie zmiany wejść mogą powodować duże zmiany wyników.

Wskaźnik uwarunkowania jest bardzo ważny w kontekście numerycznej stabilności algorytmów rozwiązujących systemy równań liniowych.

2 Problem

Podczas przeprowadzanego laboratorium, macierz A poddano analizie przy użyciu rozkładu LU. Dzięki tej technice, możliwe było obliczenie wyznacznika macierzy oraz jej wskaźnika uwarunkowania. Analizie poddano macierz kwadratową o wymiarach 4x4. Elementy tej macierzy zostały wygenerowane zgodnie z określonym poniżej wzorem:

$$a_{ij} = \frac{1}{i+j+2}, \quad \text{gdzie } i, j \in \{0, 1, 2, 3\} \tag{7}$$

Inicjalizacja macierzy **A**, **A_copy**, **A_inv**, product oraz wektory **x** i **b** przy użyciu biblioteki GSL (GNU Scientific Library). Macierz **A_copy** jest kopią macierzy **A**, **A_inv** to przyszła macierz odwrotna do **A**, a product to macierz, która ostatecznie będzie wynikiem mnożenia **A** przez **A_inv**. Wektor **x** będzie używany do rozwiązywania układów równań, a **b** to wektor jednostkowy.

```
gsl_matrix *A{gsl_matrix_calloc(n, m)};
gsl_matrix *A_copy{gsl_matrix_calloc(n, m)}; // Copy of A
gsl_matrix *A_inv{gsl_matrix_calloc(n, m)};
gsl_matrix *product{gsl_matrix_calloc(n, m)}; //  AA^-1
gsl_vector *x{gsl_vector_calloc(m)};
gsl_vector *b{gsl_vector_calloc(m)};
int signum{1};
gsl_permutation *p{gsl_permutation_calloc(m)};
```

Następnie wypełniono macierze podanym wyżej wzorem oraz dokonano rozkładu LU macierzy A przy pomocy funkcji **gsl_linalg_LU_decomp** z biblioteki GSL.

```
for (int i = 0; i < n; i++)
  {
    for (int j = 0; j < m; j++)
    {
      double value = 1.0 / (i + j + 2);
      gsl_matrix_set(A, i, j, value);
      gsl_matrix_set(A_copy, i, j, value);
    }
  }

  gsl_linalg_LU_decomp(A, p, &signum);
```

Otworzono plik tekstowy **NumericalLab01.txt** do zapisu wyników. Wypisano do pliku przekątną macierzy A oraz za pomocą elementów z przekątnej obliczono jej wyznacznik, mnożąc elementy na przekątnej.

```
myfile.open("NumericalLab01.txt");

myfile << "Diagonal A: ";

double determinant{1};

for (size_t i = 0; i < 4; i++)
{
  determinant *= gsl_matrix_get(A, i, i);
  myfile << gsl_matrix_get(A, i, i) << " ";
}
myfile << std::endl
       << "Det(A): " << std::fixed << determinant << std::endl;
```

Obliczono macierz odwrotną do A przy użyciu rozkładu LU. Zrobiono to poprzez rozwiązanie układu równań Ax = b dla każdego wektora jednostkowego b, macierz odwrotna została dopisana do pliku.

```
for (int i = 0; i < n; i++)
{
  gsl_vector_set_zero(b);
  gsl_vector_set(b, i, 1.0);
  gsl_linalg_LU_solve(A, p, b, x);
  gsl_matrix_set_col(A_inv, i, x);
}
myfile << std::endl;
myfile << "A^-1 :" << std::endl;
for (int i = 0; i < n; i++)
{
  for (int j = 0; j < m; j++)
  {
    myfile << std::setw(10) << std::fixed << gsl_matrix_get(A_inv, i, j) << " ";
  }
  myfile << std::endl;
}
```

Wykonano mnożenie macierzy *A_copy* oraz *A_inv* czyli wykonano operację AA^{-1} za pomocą **gsl_blas_dgemn** i dopisano ją do pliku.

```
matrix_multiply(A_copy, A_inv, product, n); // AA^-1
myfile << std::endl;
myfile << "AA^-1 :" << std::endl;
for (int i = 0; i < n; i++)
{
  for (int j = 0; j < m; j++)
  {
    myfile << std::setw(20) << std::setprecision(17) << gsl_matrix_get(product, i, j) << " ";
  }
  myfile << std::endl;
}
```

Na końcu obliczono normę nieskończoności macierzy *A_copy* i *A_inv*, a następnie obliczono liczbę uwarunkowania, która jest miarą stabilności numerycznej układu równań liniowych, którą dopisano do pliku oraz po wykonaniu tej czynności plik zamknięto

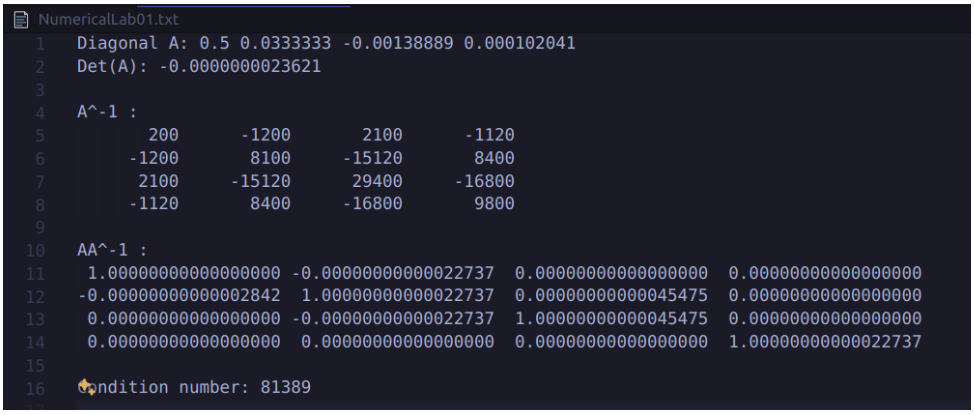
```
double norm_A = matrix_infinity_norm(A_copy, n);
double norm_A_inv = matrix_infinity_norm(A_inv, n);

double cond = norm_A * norm_A_inv;
myfile << std::endl;
myfile << "Condition number: " << std::setprecision(0) << cond << std::endl;

myfile.close();
```

3 Wyniki

3.1 Surowe wyniki z pliku


```
NumericalLab01.txt
Diagonal A: 0.5 0.0333333 -0.00138889 0.000102041
Det(A): -0.0000000023621

A^-1 :
        200      -1200       2100      -1120
      -1200       8100     -15120       8400
       2100     -15120      29400     -16800
      -1120       8400     -16800       9800

AA^-1 :
 1.00000000000000000 -0.00000000000022737  0.00000000000000000  0.00000000000000000
-0.00000000000002842  1.00000000000022737  0.00000000000045475  0.00000000000000000
 0.00000000000000000 -0.00000000000022737  1.00000000000045475  0.00000000000000000
 0.00000000000000000  0.00000000000000000  0.00000000000000000  1.00000000000022737

Condition number: 81389
```

Rysunek 1: Wyniki zapisane do pliku wyjściowego.

3.2 Elementy na diagonali macierzy U

$$\begin{bmatrix} 5.0 \times 10^{-1} \\ 3.33333 \times 10^{-2} \\ -1.38889 \times 10^{-3} \\ 1.02041 \times 10^{-4} \end{bmatrix} \tag{8}$$

3.3 Wyznacznik macierzy A

$$\text{Det}(A) = -2.3621 \times 10^{-9} \tag{9}$$

3.4 Macierz A^{-1}

$$\mathbf{A^{-1}} = \begin{bmatrix} 200 & -1200 & 2100 & -1120 \\ -1200 & 8100 & -15120 & 8400 \\ 2100 & -15120 & 29400 & -16800 \\ -1120 & 8400 & -16800 & 9800 \end{bmatrix} \tag{10}$$

3.5 Iloczyn macierzy AA^{-1}

$$\mathbf{AA^{-1}} = \begin{bmatrix} 1.0 & -2.2737 \times 10^{-13} & 0.0 & 0.0 \\ -2.842 \times 10^{-14} & 1.00000022737 & 4.5475 \times 10^{-13} & 0.0 \\ 0.0 & -2.2737 \times 10^{-13} & 1.00000045475 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & 1.00000022737 \end{bmatrix} \tag{11}$$

3.6 Wskaźnik uwarunkowania macierzy

$$\kappa(A) = 81389 \tag{12}$$

4 Wnioski

Wykorzystano metodę rozkładu LU do obliczenia odwrotności macierzy oraz wyznacznika. Rozkład LU jest często używany w numerycznym rozwiązywaniu układów równań liniowych, obliczaniu wyznaczników i odwrotności macierzy.

Wyznacznik macierzy A jest bardzo bliski zeru (-0.0000000023621), co sugeruje, że macierz jest prawie singularna. To może prowadzić do problemów numerycznych, ponieważ macierze bliskie singularytności są źle uwarunkowane.

Macierz odwrotna jest taka, że gdy jest pomnożona przez oryginalną macierz, daje macierz jednostkową. W tym przypadku, mimo że wyniki nie są idealnie równe 1 dla elementów na przekątnej i 0 dla pozostałych, są one bardzo bliskie tych wartości, co sugeruje, że obliczenia są prawidłowe do pewnego poziomu precyzji.

Wskaźnik uwarunkowania macierzy wynosi 81389, co jest dość dużą wartością. Wskaźnik uwarunkowania jest miarą, jak bardzo wyniki mogą zmienić się w wyniku małych zmian w danych wejściowych. Duży wskaźnik uwarunkowania sugeruje, że macierz jest źle uwarunkowana, co może prowadzić do znaczących błędów numerycznych.

Podsumowując, choć metoda LU pozwala na obliczenie odwrotności i wyznacznika macierzy to wyniki sugerują, że macierz jest prawie singularna i źle uwarunkowana. To oznacza, że wyniki mogą być bardzo wrażliwe na małe zmiany w danych wejściowych i mogą zawierać znaczne błędy numeryczne.