Sprawozdanie - laboratorium 2

Rozkład LU macierzy

Łukasz Wajda

18 marca 2021

1 Wstęp teoretyczny

1.1 Metoda LU

Metodą LU nazywamy metodę rozwiązywania układu równań liniowych. Nazwa pochodzi od użytych w tej metodzie macierzy trójkątnych, tj. dolnotrójkątnej (dolnej, ang. lower) i górnotrójkątnej (górnej, ang. upper). Metoda pozwala także na szybkie wyliczenie wyznacznika macierzy układu. Dekompozycja LU jest rozłożeniem oryginalnej macierzy współczynników A na dwie macierze trójkątne - dolną oraz górną, takie że:

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

gdzie L i U są następującej postaci:

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}, \tag{2}$$

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u1n \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}. \tag{3}$$

1.1.1 Rozwiązywanie układów równań z wykorzystaniem metody LU

Dysponując macierzami **L** oraz **U** można rozwiązać układ równań:

$$\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}, \tag{4}$$

$$\mathbf{LU}\vec{x} = \vec{b}, \tag{5}$$

poprzez rozwiązanie dwóch układów równań:

$$\mathbf{L}\vec{y} = \vec{b}, \tag{6}$$

$$\mathbf{U}\vec{x} = \vec{y}, \tag{7}$$

Dzięki właściwościom macierzy trójkątnych tak rozbity układ równań można dużo szybciej rozwiązać. Wystarczy najpierw wyznaczyć wartość y , co umożliwia już rozwiązanie kolejnego układu i wyznaczenie x .

1.1.2 Wyznaczanie macierzy L oraz U metodą Gaussa

Metoda Gaussa umożliwia wyznaczenie macierzy **L** i **U** poprzez wykorzystanie metody eliminacji Gaussa. Do macierzy, której rozkładu się dokonuje, należy dopisać lewostronnie macierz jednostkową. Na prawym bloku macierzy wykonuje się operacje elementarne takie jak w metodzie Gaussa, zaś w lewym bloku macierzy należy zapisywać współczynniki użyte do eliminacji.

$$\begin{gathered}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \\ \Downarrow \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} \\ l_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & u_{22} & u_{23} & \dots & u_{2n} \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & u_{33} & \dots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & u_{nn} \end{pmatrix}.\end{gathered} \tag{8}$$

1.1.3 Obliczanie wyznacznika macierzy po rozkładzie LU

Obliczenie wyznacznika macierzy rozłożonej na macierz dolnotrójkątną **L** oraz górnotrójkątną **U** jest trywialnie proste, jeśli zostanie zastosowane twierdzenie Cauchy'ego:

$$\det(\mathbf{AB}) = \det\mathbf{A}\cdot\det\mathbf{B}. \tag{9}$$

Wykorzystując fakt, że wyznacznik macierzy trójkątnej sprowadza się do iloczynu elementów na jej przekątnej, a także że macierz **L** przewiduje na swojej głównej przekątnej same jedynki:

$$\det\mathbf{A} = \det\mathbf{L}\cdot\det\mathbf{U} = \det\mathbf{U} = \prod_{i=1}^{n} u_{ii}. \tag{10}$$

1.1.4 Wyznaczanie macierzy odwrotnej z wykorzystaniem metody LU

Aby znaleźć przy pomocy macierzy **L** i **U** macierz odwrotną $\mathbf{A}^{-1}$ należy rozwiązać n układów równań:

$$\mathbf{LU}\vec{x}^{(i)} = \vec{e}^{(i)}, \quad i = 1, 2, ..., n, \tag{11}$$

$$\vec{e}^{(i)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{12}$$

$$\mathbf{LUX} = \mathbf{I} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{X} = \mathbf{A}^{-1}. \tag{13}$$

Rozwiązania układów równań $\vec{x}^{(i)}$ stanowią kolumny macierzy odwrotnej $\mathbf{A}^{-1}$ (po uwzględnieniu ewentualnych przestawień wierszy wynikających z wyboru elementu podstawowego).

1.1.5 Wskaźnik uwarunkowania macierzy

Wskaźnik uwarunkowania macierzy określa, jak wpływ danych wejściowych wpływa na błąd wyniku. Problemy o niskim wskaźniku uwarunkowania nazywamy dobrze uwarunkowanymi, natomiast te o wysokim źle uwarunkowanymi.
Do obliczenia wskaźnika uwarunkowania macierzy stosuję się wzór:

$$\kappa_A = \left\| \mathbf{A} \right\| \cdot \left\| \mathbf{A^{-1}} \right\|, \tag{14}$$

gdzie norma obliczana jest jako:

$$\left\| \mathbf{A} \right\|_{1,\infty} = \max_{1 \leqslant i,j \leqslant n} |a_{i,j}|. \tag{15}$$

i analogicznie dla macierzy $\mathbf{A^{-1}}$.

2 Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

Macierz $\mathbf{A}$ zdefiniowana jest następująco:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix}, \tag{16}$$

natomiast macierz $\mathbf{B}$ różni się od $\mathbf{A}$ tylko wartością elementu a_{11}:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1.1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix}, \tag{17}$$

Pierwszym celem zadania jest znalezienie rozkładów LU macierzy A i B. Następnie należy znaleźć macierze $\mathbf{A^{-1}}$ oraz $\mathbf{B^{-1}}$. Aby znaleźć macierz odwrotną należy rozwiązać 3 układy równań dla wektorów wyrazów wolnych:

$$\vec{b_1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{b_2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{b_3} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{18}$$

Uzyskane rozwiązania stanowią kolejne kolumny macierzy odwrotnej. Układ należy rozwiązać stosując znalezione rozkłady LU.

Kolejno należy obliczyć wskaźniki uwarunkowania macierzy $\mathbf{A}$ i macierzy $\mathbf{B}$, stosując normę:

$$\left\| \mathbf{A} \right\|_{1,\infty} = \max_{1 \leqslant i,j \leqslant n} |a_{i,j}| \tag{19}$$

oraz dokonać analizy ich wartości.

Ostatnim krokiem jest wykonanie iloczynów $\mathbf{AA^{-1}}$ oraz $\mathbf{BB^{-1}}$ i analiza otrzymanych wyników.

2.2 Zastosowane rozwiązanie

Do rozwiązania zadania wykorzystano język programowania C z dołączoną biblioteką Numerical Recipes.
Do zainicjalizowania wektora liczb całkowitych użyto funkcji **ivector**, natomiast do inicjalizacji macierzy liczb zmiennoprzecinkowych funkcji **matrix**.
W celu uzyskania rozkładu LU macierzy **A** i **B** wykorzystano procedurę **ludcmp(A, n, indx, &d)**, gdzie:
A - macierz kwadratowa o rozmiarze n, której elementy są typu float (po wywołaniu procedury jest jest ona nadpisywana macierzami L i U),
n - rozmiar macierzy typu integer,
indx - wektor permutacji typu integer,
d - zmienna typu float, której znak określa parzystą lub nieparzystą liczbę permutacji.

Do rozwiązania układu równań stosując znalezione rozkłady LU wykorzystano procedurę **lubksb(LU, n, indx, x)**, gdzie:
LU - to rozkład LU macierzy,
indx - wektor otrzymany z procedury ludcmp,
x - jest aktualnym wektorem wyrazów wolnych, nadpisywanym przez znalezione rozwiązanie.

Do obliczenia iloczynu macierzy zastosowano prosty algorytm mnożenia macierzy.

2.3 Wyniki

Otrzymane macierze **L** oraz **U**, kolejno dla rozkładu LU macierzy **A** i **B** prezentują się następująco:

$$\mathbf{L_A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.142857 & 1 & 0 \\ 0.571429 & 0.5 & 1 \end{pmatrix}, \tag{20}$$

$$\mathbf{U_A} = \begin{pmatrix} 7 & 8 & 9 \\ 0 & 0.857143 & 1.71429 \\ 0 & 0 & 1 \cdot 10^{20} \end{pmatrix}, \tag{21}$$

$$\mathbf{L_B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.157143 & 1 & 0 \\ 0.571429 & 0.576923 & 1 \end{pmatrix}, \tag{22}$$

$$\mathbf{U_B} = \begin{pmatrix} 7 & 8 & 9 \\ 0 & 0.742857 & 1.58571 \\ 0 & 0 & -0.0576923 \end{pmatrix}. \tag{23}$$

Wskutek odwrócenia macierzy **A** i **B** otrzymano macierze odwrotne $\mathbf{A^{-1}}$ i $\mathbf{B^{-1}}$, które prezentują się następująco:

$$\mathbf{A^{-1}} = \begin{pmatrix} -5 \cdot 10^{19} & 1 \cdot 10^{20} & -5 \cdot 10^{19} \\ 1 \cdot 10^{20} & -2 \cdot 10^{20} & 1 \cdot 10^{20} \\ -5 \cdot 10^{19} & 1 \cdot 10^{20} & -5 \cdot 10^{19} \end{pmatrix}, \tag{24}$$

$$\mathbf{B^{-1}} = \begin{pmatrix} 10 & -20 & 10 \\ -20 & 37 & -18 \\ 10 & -17.3333 & 8.33334 \end{pmatrix}. \tag{25}$$

Kolejno obliczono normy macierzy i macierzy do nich odwrotnych. Iloczyn tych dwóch norm nazywamy wskaźnikiem uwarunkowania macierzy. Dokonano tego zarówno dla macierzy **A** jak i **B**:

$$\|\mathbf{A}\| = 9, \tag{26}$$

$$\|\mathbf{A^{-1}}\| = 200000004008175468544 = 2 \cdot 10^{20}, \tag{27}$$

$$\kappa_A = 1800000106442323394560 \approx 1.8 \cdot 10^{21}, \tag{28}$$

$$\|\mathbf{B}\| = 9, \tag{29}$$

$$\|\mathbf{B^{-1}}\| = 37.000015, \tag{30}$$

$$\kappa_B = 333.000122. \tag{31}$$

Jak łatwo zauważyć, wskaźnik uwarunkowania macierzy dla macierzy **A** jest bardzo duży. Oznacza to, że mała zmiana wartości współczynników macierzy **A** może znacząco wpłynąć na wynik. Wskaźnik uwarunkowania macierzy dla macierzy **B** jest wyraźnie mniejszy, zatem błąd reprezentacji w danych wejściowych macierzy **B** będzie miał już mniejszy wpływ na błąd wyniku, lecz nadal będzie zauważalny.

Następnie dokonano mnożenia obliczonych macierzy odwrotnych z macierzami początkowymi. Otrzymano rezultaty:

$$\mathbf{AA^{-1}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 3.51844 \cdot 10^{13} & -7.03687 \cdot 10^{13} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{32}$$

$$\mathbf{BB^{-1}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1.90735 \cdot 10^{-6} \\ -3.8147 \cdot 10^{-6} & 1 & 3.8147 \cdot 10^{-6} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{33}$$

W obu przypadkach nie otrzymano macierzy jednostkowych. Zgodnie z obliczonymi wskaźnikami uwarunkowania macierzy κ_A i κ_B wynik iloczynu $\mathbf{BB^{-1}}$ jest dużo bliższy macierzy jednostkowej niż wynik iloczynu $\mathbf{AA^{-1}}$.

3 Wnioski

Wykorzystując metodę LU dokonano dekompozycji macierzy początkowych, odwrócenia ich oraz obliczenia wskaźników uwarunkowania.
Wiadomo, że macierze osobliwe (o wyznaczniku równym zero) są nieodwracalne. Można zauważyć, że im dana macierz jest bliższa macierzy osobliwej, tym bardziej zaburzony wynik zostanie otrzymany podczas procesu jej odwracania. Wyznacznik macierzy $\mathbf{A}$, który łatwo policzyć, jest równy zero, a zatem stąd wynika tak duży wskaźnik uwarunkowania macierzy oraz nieprawidłowy wynik iloczynu $\mathbf{AA^{-1}}$. Wyznacznik macierzy $\mathbf{B}$ wynosi -0.3, co również jest bliskie zera i wskutek czego wskaźnik uwarunkowania macierzy jest odpowiednio wysoki. Duże wskaźniki uwarunkowania macierzy wskazują, że zadanie w obu przypadkach zostało źle uwarunkowane (jednak szczególnie dla macierzy A). Zostało to uwidocznione w wynikach iloczynów $\mathbf{AA^{-1}}$ oraz $\mathbf{BB^{-1}}$, gdzie w obu przypadkach nie były to macierze jednostkowe. Pokazuje to bardzo dobrze, że oprócz błędów zaokrągleń, które wprowadzają zaimplementowane w kodzie algorytmy, należy również zwracać uwagę na informację o błędach przenoszonych z danych wejściowych.

Reasumując, pomimo zalet metody LU, która jest szybka i znacznie ułatwia obliczenia, można natrafić na tak postawione problemy, które poprzez swoje złe uwarunkowanie nie będą się nadawać do numerycznego rozwiązywania.