

Practicum NMB : Practicum 1

Alexander Boucquey, Tristan Van Thielen

vrijdag 21 april 2017

Opgave 1

Om de eigenvectoren en eigenwaarden van een Householdermatrix te bekijken is het nodig om te weten hoe deze wordt opgesteld. De transformatiematrix \mathbf{Qk} is een combinatie van een $(k-1) \times (k-1)$ identiteitsmatrix en de $(m-k+1) \times (m-k+1)$ unitaire householdermatrix \mathbf{F} . \mathbf{F} wordt opgesteld via:

$$F = I - 2(vv^*)/(v^*v)$$

In deze vorm is de projectiematrix $P = (vv^*)/(v^*v)$ makkelijk herkenbaar. Het verschil is hier dat er dubbel zo ver geprojecteerd wordt. Het is mogelijk om van deze matrix de eigenwaardenontbinding op te schrijven:

$$P = Q\Lambda Q^T = \begin{bmatrix} \vdots & \vdots & & \vdots \\ v/\|v\| & q_2 & \dots & q_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vdots & \vdots & & \vdots \\ v/\|v\| & q_2 & \dots & q_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \end{bmatrix}^T$$

De vectoren q_2, \dots, q_n vormen hier dan een orthonormale basis voor de $(n-1)$ dimensionele deelruimte loodrecht op v . De vectoren q kunnen gevonden worden via Gram-Schmidt. Belangrijk is om nu in te zien dat $QQ^T = I$. Daardoor kan de formule voor F geschreven worden als:

$$F = QQ^T - 2QQ^T = Q(I - 2\Lambda)Q^T$$

In deze formule is makkelijk te zien dat de eigenwaarden van F voldoen aan $\lambda_i(F) = 1 - 2\lambda_i(P)$. De reeks van eigenwaarden voor F is dus $(-1, 1, 1, \dots, 1)$. De eigenvectoren van F zijn dezelfde als deze van P en dus voldoen ze ook aan dezelfde eigenschappen. Omdat F reëel en symmetrisch is, voldoet deze ook aan de eigenschap dat al zijn eigenwaarden -1 of 1 zijn.

Opgave 2

Wanneer we de tijdsduur berekenen van de gebruikte methode zien we dat het voor kleine matrices een klein verschil geeft, maar voor grote matrices het een

grote orde verschil is.

Grootte van A	10x10	100x100	1000x1000
Expliciet	0.0022s	0.0165s	48.8148s
Impliciet	0.0020s	0.0082s	4.3914s

Tabel 1: Tijdsduur van Householder.

Wanneer de fout (zowel op x als op het residu) nader bekeken wordt, blijkt deze nagenoeg hetzelfde te zijn. Het verschil in beide algoritmes bevindt zich dus in de tijdsduur, de impliciete berekening is dus de snelste. De resultaten van de fout zijn te vinden in bijlage 1.

$\kappa(A)$	1	10^4	10^8
$\frac{\ \delta(x)\ }{\ (x)\ }$	$2.9198 * 10^{-16}$	$9.3708 * 10^{-14}$	$5.6261 * 10^{-10}$
$\frac{\ (r)\ }{\ (b)\ }$	$2.2459 * 10^{-16}$	$1.7845 * 10^{-13}$	$5.5055 * 10^{-10}$

Tabel 2: Expliciet 10x10 matrix

$\kappa(A)$	1	10^4	10^8
$\frac{\ \delta(x)\ }{\ (x)\ }$	$3.5509 * 10^{-15}$	$1.6728 * 10^{-13}$	$3.0981 * 10^{-10}$
$\frac{\ (r)\ }{\ (b)\ }$	$1.8524 * 10^{-16}$	$4.5991 * 10^{-14}$	$2.9846 * 10^{-10}$

Tabel 3: Expliciet 100x100 matrix

$\kappa(A)$	1	10^4	10^8
$\frac{\ \delta(x)\ }{\ (x)\ }$	$4.4829 * 10^{-14}$	$2.3379 * 10^{-13}$	$8.4525 * 10^{-11}$
$\frac{\ (r)\ }{\ (b)\ }$	$1.4379 * 10^{-14}$	$5.8550 * 10^{-13}$	$1.7420 * 10^{-10}$

Tabel 4: Expliciet 1000x1000 matrix

$\kappa(A)$	1	10^4	10^8
$\frac{\ \delta(x)\ }{\ (x)\ }$	$5.2933 * 10^{-16}$	$1.2576 * 10^{-13}$	$3.7587 * 10^{-10}$
$\frac{\ (r)\ }{\ (b)\ }$	$3.9053 * 10^{-16}$	$1.3825 * 10^{-13}$	$7.3118 * 10^{-10}$

Tabel 5: Impliciet 10x10 matrix

$\kappa(A)$	1	10^4	10^8
$\frac{\ \delta(x)\ }{\ (x)\ }$	$2.8649 * 10^{-15}$	$3.0999 * 10^{-14}$	$5.7423 * 10^{-10}$
$\frac{\ (r)\ }{\ (b)\ }$	$8.8370 * 10^{-16}$	$3.5461 * 10^{-14}$	$1.2068 * 10^{-10}$

Tabel 6: Impliciet 100x100 matrix

$\kappa(A)$	1	10^4	10^8
$\frac{\ \delta(x)\ }{\ (x)\ }$	$4.1427 * 10^{-14}$	$7.8200 * 10^{-14}$	$1.1195 * 10^{-10}$
$\frac{\ (r)\ }{\ (b)\ }$	$2.9521 * 10^{-15}$	$1.6401 * 10^{-14}$	$7.4928 * 10^{-11}$

Tabel 7: Impliciet 1000x1000 matrix

Opgave 3

De resultaten van deze vraag zijn te vinden in Bijlage 1. In deze tabel staan de coëfficiëntenvector x en het residu. Het is logisch dat het residu verkleint wanneer n stijgt. Er zijn meer vectoren u en dus is komt men steeds dichterbij een basis voor \mathbb{R}^m . Het verhogen van n heeft steeds een kleiner effect, aangezien het bereik van alle vectoren samen slechts minimaal wordt vergroot. In de resultaten is dit gedrag zeer herkenbaar. We zien dat vanaf $n = 23$ elke verhoging van n slechts een verschil maakt van ongeveer 0.1. Dit is merkbaar kleiner dan de stappen ervoor die een verschil van eenheden of zelfs tientallen tweewegbrengen. Merk wel dat het residu nog steeds zeer groot is. Dit is omdat er nog steeds veel te weinig vectoren zijn ivm. de dimensie van het probleem nl. 400. Voor een $n = 200$ wordt het residu veel kleiner. Dan zijn er immer veel meer vectoren om een lineaire combinatie van te maken.

Opgave 4

Opgave 5

Vraag 5a

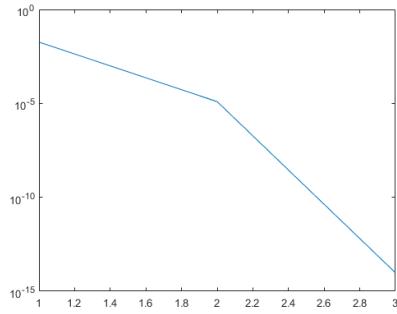
QR en gelijktijdige iteratie berekenen alle eigenwaarden en bijhorende eigenvectoren. Gelijktijdige iteratie bij een vierkante matrix met $Q(0) = I$ is hetzelfde als het QR algoritme zonder shift. Beide algoritmen convergeren lineair.

Het QR algoritme met (RQ) shift gebruikt het principe van inverse iteratie. Dit berekent alle eigenwaarden. De Rayleigh Quotient iteratie maakt ook gebruik van inverse iteratie en Rayleigh Quotient, om te convergeren naar de hoogste eigenwaarden. Beide laatste convergeren kubisch naar hun eigenwaarden.

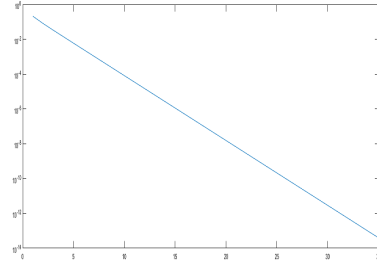
Alle algoritmen, behalve de Rayleigh Quotient iteratie, berekenen alle eigenwaarden.

Vraag 5b

Het QR-algoritme met RQ shift past de Rayleigh Quotient iteratie toe op alle vectoren tegelijk. Het gelijktijdig toepassen op een hele matrix is het gelijktijdige iteratie algoritme, de Rayleigh Quotient iteratie is wat er gebeurt op iedere vector.

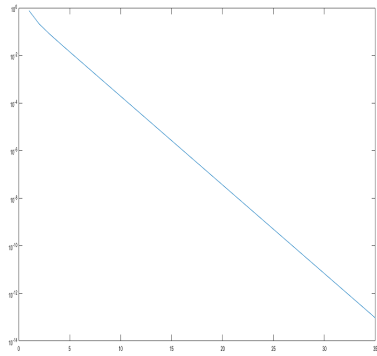


(a) Residu Rayleigh

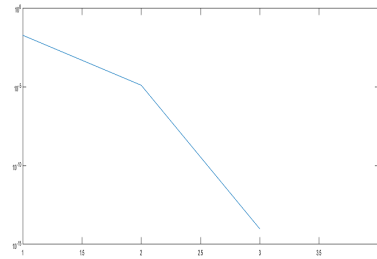


(b) Residu gelijktijdige iteratie

Figuur 1: Links residu Rayleigh, rechts residu gelijktijdige iteratie.



(a) Residu QR algoritme zonder shift



(b) Residu QR algoritme met Rayleigh shift

Figuur 2: Links residu QR algoritme zonder shift, rechts residu QR algoritme met Rayleigh shift.

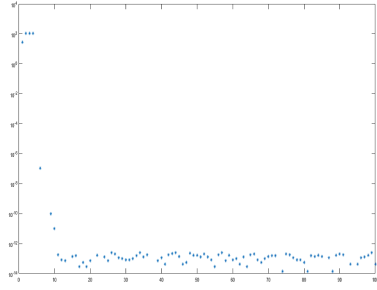
Wanneer naar het residu gekeken wordt zien we dat het Rayleigh Quotiënt in een drie stappen naar machine precisie convergeert. De gelijktijdige iteratie en QR zonder shift 35 iteratie stappen over het berekenen van alle eigenwaarden op machine nauwkeurigheid. QR met Rayleigh Quotiënt shift convergeert even snel als het Rayleigh Quotiënt zelf, maar voor alle eigenwaarden.

Opgave 6

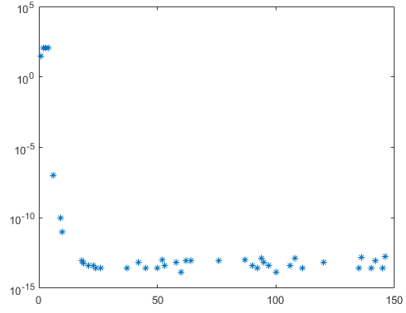
De grenzen voor de methode van geconjungeerde gradinten worden gegeven door formule 38.10 uit Trefethen en Bau:

$$\frac{\|e_n\|_A}{\|e_0\|_A} \leq 2 \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^n$$

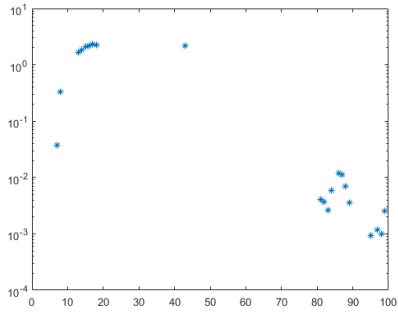
In de opgave is alles gegeven om met $n = 10$ het conditiegetal κ te kunnen



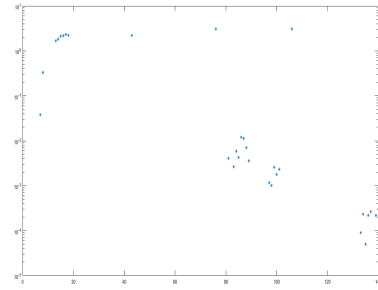
(a) arnoldi 1, 100 iteraties



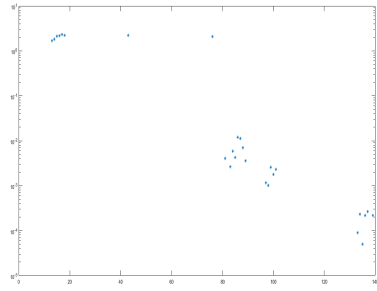
(b) arnoldi 1, 150 iteraties



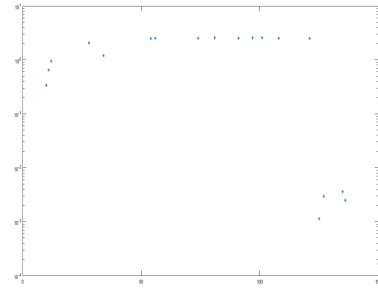
(a) arnoldi 2, 100 iteraties



(b) arnoldi 2, 150 iteraties

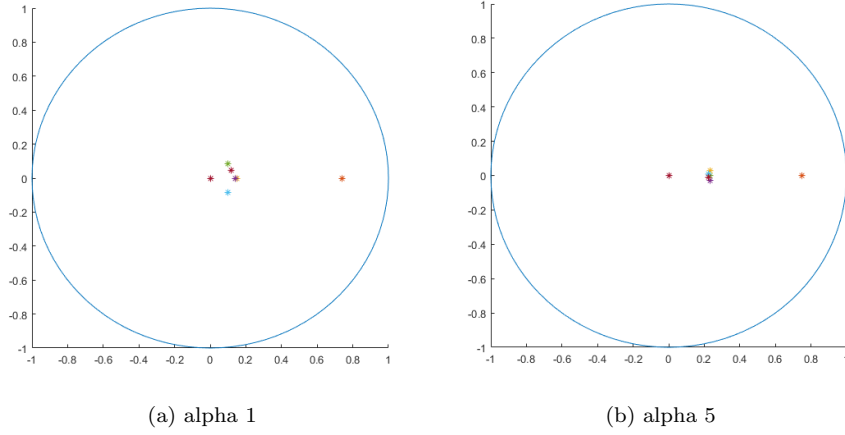


(a) arnoldi 3, 150 iteraties



(b) arnoldi 4, 150 iteraties

berekenen. Na omvorming van de formule vindt men dat $\kappa \geq 9$. Nu deze ondergrens bekend is, kan men hieruit een nieuwe bovengrens afleiden voor de fout bij $n = 20$. Nogmaals na omvormen van de formules geeft dit als bovengrens $\|e_{20}\|_A \leq 1.9073 * 10^{-6}$.



Figuur 3: Links eigenwaarden voor $\alpha = 1$, rechts voor $\alpha = 5$

Opgave 7

Opgave 8

De verschillende α waarden hebben een invloed op de ligging van de eigenwaarden alsook het conditiegetal $\kappa(A)$ van A . Voor $\alpha = 1$ is het conditiegetal $\kappa(A) = 9.4108 \cdot 10^3$, voor $\alpha = 5$ is $\kappa(A) = 46.6201$, voor $\alpha = 10$ is $\kappa = 13.3134$ en tot slot voor $\alpha = 100$ is $\kappa(A) = 1.5601$.

Wanneer we nu de eigenwaarden gaan bekijken zien we dat de eigenwaarden bij 3a het meest verspreid liggen en het meest naar het centrum, hoe hoger de α waarde hoe verder de meeste eigenwaarden (behalve het nulpunt) zich naar de rand van de eenheidscirkel begeven en dichter bij elkaar komen te liggen.

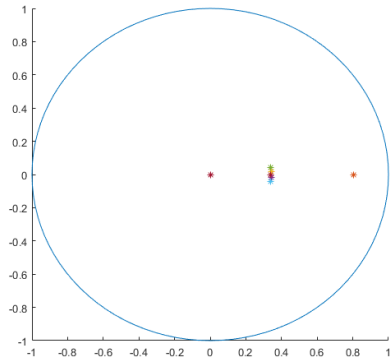
Dit komt ook overeen met de eigenschap:

$$\|r_n\| \leq \inf \|p(A)\| \leq \kappa_2(V) \inf(\max |p(\lambda)| \|r_0\|), \forall p \in P_n, \forall \lambda \in \sigma(A).$$

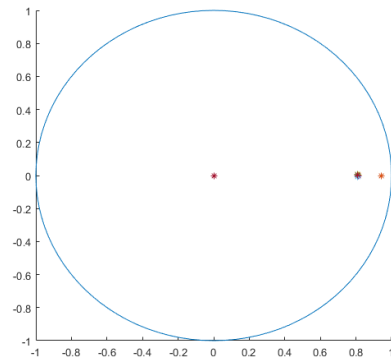
Deze stelt immers dat snelle convergentie bereikt wordt voor eigenwaarde van A die geclusterd zitten, weg van de oorsprong en met A gelijkend op een normaal matrix ($A * A^* = A^* * A$).

Opgave 9

Opgave 10

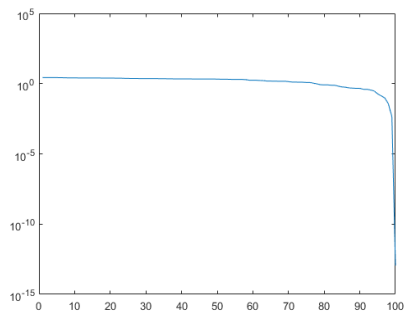


(a) alpha 10

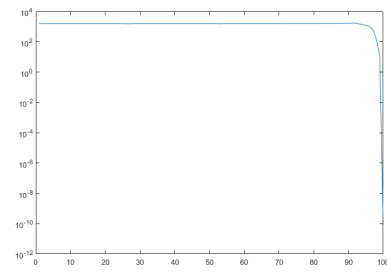


(b) alpha 100

Figuur 4: Links eigenwaarden voor $\alpha = 10$, rechts voor $\alpha = 100$

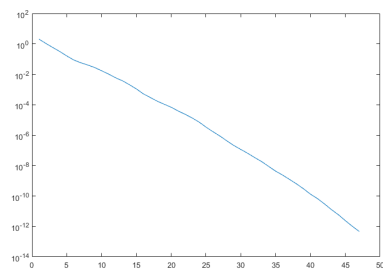


(a) fout op $\|r_n\|$

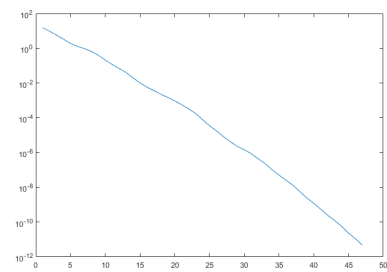


(b) fout op exacte oplossing

Figuur 5: Resp. fouten voor $\alpha = 1$.

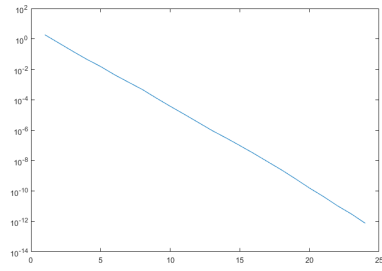


(a) fout op $\|r_n\|$

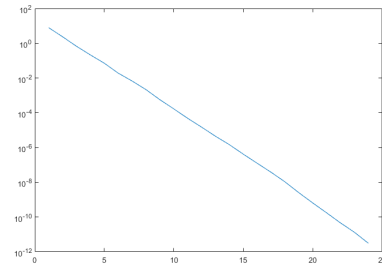


(b) fout op exacte oplossing

Figuur 6: Resp. fouten voor $\alpha = 5$.

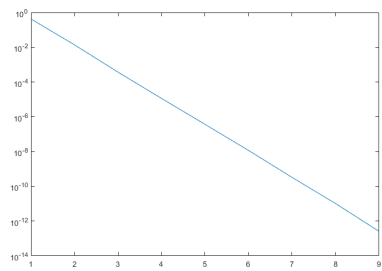


(a) fout op $\|r_n\|$

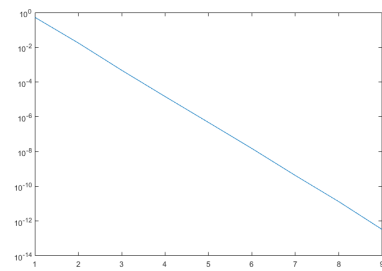


(b) fout op exacte oplossing

Figuur 7: Resp. fouten voor $\alpha = 10$.



(a) fout op $\|r_n\|$



(b) fout op exacte oplossing

Figuur 8: Resp. fouten voor $\alpha = 100$.