Numerieke Modellering en Benadering: Practicum 2

23 april 2018

Eigenwaardenproblemen en iteratieve methoden

In dit practicum onderzoeken we enkele methoden voor het bepalen van eigenwaarden van matrices. In het eerste gedeelte van het practicum beschouwen we enkele theoretische eigenschappen van de methoden. In het tweede gedeelte worden de convergentie-eigenschappen van de methoden onderzocht aan de hand van MATLAB-experimenten. In het derde gedeelte bekijken we de Jacobi-methode in meer detail. Ten slotte wordt in deel 4 de methode van de toegevoegde gradiënten bestudeerd.

1 Theoretische eigenschappen

Opgave 1. Gelijktijdige iteratie of 'simultaneous iteration' past de methode van de machten toe op d kolommen tegelijk. Op die manier kunnen de d grootste eigenwaarden en bijhorende eigenvectoren bepaald worden. Schrijf een variant van het algoritme uit om de d eigenwaarden en bijhorende eigenvectoren van een matrix A te bepalen die het dichtst liggen bij een waarde τ. Je mag veronderstellen dat τ niet samenvalt met een eigenwaarde van A. Schrijf het algoritme in pseudo-code uit, en geef ook een verklaring waarom het gewenste resultaat met dit algoritme bekomen wordt.

Opgave 2. Beschouw de Rayleigh quotiënt iteratie.

a) Naarmate de benaderende eigenwaarde $\lambda^{(k-1)}$ dichter in de buurt komt van de exacte eigenwaarde, wordt dit stelsel meer en meer singulier. Geef een beknopte (intuïtieve) verklaring waarom het in dit geval geen numerieke problemen geeft een (bijna) singulier stelsel op te lossen.

b) Gegeven een matrix $A \in \mathbb{R}^{m\times m}$ en een vector $x \in \mathbb{R}^{m\times 1}$, met x een benadering voor een eigenvector van A. Toon aan dat de oplossing $\rho \in \mathbb{R}$ van het minimalisatieprobleem

$$\min_{\rho\in\mathbb{R}} ||Ax - \rho x||_2$$

overeenkomt met het Rayleigh quotiënt van x.

Opgave 3. Beschouw de methode van Arnoldi en veronderstel dat deze wordt uitgevoerd voor een zekere niet defectieve matrix A en vector b totdat in een bepaalde stap j de norm van de vector v (na orthogonalisatie) nul is.

a) Is er een boven- en ondergrens voor j? Kan je iets zeggen voor welke vector b deze bereikt worden?

b) Toon aan dat in dit geval $\mathcal{K}_j$ een invariante deelruimte is van A.

c) Toon aan dat in dit geval $\mathcal{K}_j = \mathcal{K}_{j+1} = \mathcal{K}_{j+2} = \ldots$.

d) Toon aan dat in dit geval alle eigenwaarden van H_j ook eigenwaarden van A zijn.

e) Veronderstellende dat A niet singulier is, toon aan dat de oplossing van $Ax = b$ in $\mathcal{K}_j$ ligt.

2 Het QR-algoritme

In het tweede deel van het practicum beschouwen we een gegeven volle, symmetrische matrix. Een voorbeeld is te vinden in het bestand `mat1.txt`. Deze matrix kan in MATLAB ingeladen worden met behulp van het commando `load`.

Opgave 4. Beschouw de matrix `mat1.txt`. Reduceer deze matrix naar Hessenberg vorm met behulp van het MATLAB commando `hess` en toon de structuur met behulp van `spy`. Valt er iets onverwacht op en hoe verklaar je dat? Waarom is het belangrijk om de matrix te reduceren naar Hessenbergvorm alvorens de QR-methode toe te passen?

Opgave 5. In deze opgave implementeren en bekijken we het QR algoritme in detail. Implementeer de volgende methoden:

- de QR-methode zonder shift (Algoritme 28.1), `[E,Res] = qr_zondershift(A)`
- de QR-methode met Rayleigh quotiënt shift, en `[E,Res] = qr_rayleighshift(A)`
- de QR-methode met Wilkinson shift (Algoritme 28.2). `[E,Res] = qr_wilkinsonshift(A)`

De invoer van de methoden is steeds de matrix `A`. De uitvoer is een vector `E` die de berekende eigenwaarden bevat en een array `Res` die de absolute waardes van de subdiagonaal elementen, $|A^{(k)}_{j,j+1}|$, bevat voor iedere iteratie k. Hou je aan de opgegeven naamgeving.

Als heuristiek om de convergentie te verifiëren, gebruik je

$$|A^{(k)}_{j,j+1}| \leq \epsilon \left(|A^{(k)}_{j,j}| + |A^{(k)}_{j+1,j+1}|\right)$$

Hier is ϵ gelijk aan de machine precisie (`eps` in MATLAB).

Pas je methoden toe om alle eigenwaarden van de matrix `mat1.txt` te berekenen. Illustreer grafisch de convergentie van de verschillende methoden. Is de convergentie lineair, kwadratisch of kubisch? Komen de numerieke resultaten overeen met de theorie? Bespreek.

Opgave 6. De cursus vermeldt een verband tussen het QR-algoritme met Rayleigh quotiënt shift en de Rayleigh quotiënt iteratie, en tussen het QR-algoritme en de gelijktijdige iteratie. Bespreek (kort) deze onderlinge relaties en licht toe hoe het convergentiegedrag van het QR-algoritme met Rayleigh quotiënt shift gezien kan worden als een combinatie van het convergentiegedrag van gelijktijdige iteratie en Rayleigh quotiënt iteratie.

Verduidelijk dit aan de hand van de matrix `mat1.txt` en de implementaties van de Rayleigh quotiënt iteratie (`rayleigh`) en gelijktijdige iteratie (`gelijktijdige_it`) die je op Toledo kan terugvinden.

3 Alternatieve eigenwaardenalgoritmen

Naast de besproken methoden in lecture 27 t.e.m. lecture 29 van het boek 'Numerical Linear Algebra' (L. Trefethen en D. Bau, 1997) bestaan er nog andere belangrijke methoden voor het oplossen van eigenwaardenproblemen. Enkele voorbeelden zijn Jacobi, bisectie, verdeel- en heers en Arnoldi/Lanczos. In dit gedeelte van het practicum bekijken we de Jacobi-methode in meer detail.

De Jacobi-methode steunt op de diagonalisatie van 2×2 symmetrische matrices met behulp van een orthogonale matrix J,

$$J^T \begin{bmatrix} a & d \\ d & b \end{bmatrix} J = \begin{bmatrix} \neq 0 & 0 \\ 0 & \neq 0 \end{bmatrix}, \tag{1}$$

waarbij de orthogonale matrix J gedefinieerd wordt als een rotatie-matrix of een reflectie-matrix. Hier beschouwen we enkel rotatie,

$$J = \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix}. \tag{2}$$

Opgave 7. Bepaal de coëfficiënten c en s van de matrix J in (2) zodat (1) geldt. Geef ook je afleiding.

Opgave 8. Schrijf een algoritme uit in pseudo-code om met de Jacobi-methode de eigenwaardenontbinding VDV^T van een symmetrische matrix A te berekenen, waarbij D een diagonaalmatrix is die de eigenwaarden bevat, en V een orthogonale matrix met de overeenkomstige eigenvectoren. Maak gebruik van de rij per rij *sweep* methode zoals beschreven in het handboek. Voer deze iteratie uit totdat

$$\|R_A\|_F \leq \texttt{tol},$$

met R_A het strikt bovendriehoeksgedeelte van A en `tol` een opgegeven tolerantie. Implementeer dit algoritme vervolgens als een functie in MATLAB: `function [V,D]= jacobi(A,tol)`.

Opgave 9. Pas je implementatie van de Jacobi-methode toe om alle eigenwaarden en eigenvectoren van `mat1.txt` te berekenen. Bekijk de convergentiesnelheid. Komt de experimentele convergentiesnelheid overeen met de theorie?

4 Toegevoegde gradiënten (conjugate gradients)

Opgave 10. Stel dat de methode van de toegevoegde gradiënten toegepast wordt op een matrix A, met resultaten $\|e_0\|_A = 1$ en $\|e_{10}\|_A = 2 \times 2^{-10}$. Welke grens kan je op basis van deze informatie geven

a) voor het conditiegetal $\kappa(A)$, en

b) voor $\|e_{20}\|_A$?

Opgave 11. Toon aan dat als $b = \sum_{i=1}^{j} \gamma_i \, x_i$ met elke γ_i verschillend van nul en elke x_i een (verschillende) eigenvector, dat de methode van de toegevoegde gradiënten een exacte oplossing geeft na j stappen.

Praktische richtlijnen

- Dit practicum wordt gemaakt in groepjes van twee. De deadline is op **21 mei 2018** om 15:00 uur.
- Op de discussieruimte van het vak[1] is het forum *Practicum 2: vind groepslid* beschikbaar gemaakt om het zoeken naar een projectpartner te vergemakkelijken.
- Ten laatste op **21 mei 2018** om 15:00 uur stuur je je verslag (in PDF) samen met alle gevraagde MATLAB code (opgave 5 & 8) in **via Toledo**. Voeg daarvoor alle bestanden samen in één zip-bestand met jullie achternamen in de bestandsnaam, bv. `practicumDeSmetPeeters.zip`. Het is voldoende dat één groepslid alles uploadt.
- Zorg ervoor dat je code aan de opgegeven naamgeving voldoet en vergeet niet om alle mogelijke hulpfuncties die je zelf geschreven hebt toe te voegen zodat de code getest kan worden.
- Vermeld aan het begin van je verslag de volledige naam en studentennummer van de groepsleden.
- Gebruik doordachte figuren en tabellen om je bevindingen te verduidelijken. Gebruik logaritmische grafieken waar nodig. Kies de schaal van je figuren oordeelkundig, vooral als twee verschillende figuren vergeleken moeten worden.
- Bespreek bondig je resultaten en je aanpak in een duidelijke vergezellende tekst. Hou de lengte evenwel onder de 10 pagina's.

Veel succes!

Daan Camps (200A 02.25)
`daan.camps@cs.kuleuven.be`
`http://toledo.kuleuven.be`

[1]zie Toledo > Numerieke modellering en benadering: hoorcollege [H01P3a] > Discussieruimte