

# Scientific Computing I - Übung 6

## 1 Theorie

- 1) Es sei die Matrix  $A = \begin{bmatrix} 1 & \epsilon \\ \epsilon & 1 \end{bmatrix}$  gegeben. Welche Bedingung muss  $\epsilon$  in Maschinengenauigkeit erfüllen, damit die Berechnung der Eigenwerte von  $A$  über das charakteristische Polynom  $\det(A - \lambda I)$  nicht die doppelte Nullstelle 1 ergibt?
- 2) Berechnen Sie die Singulärwertzerlegung (SVD) von  $A = [1, 0; 2, 1; 0, 1]$ . Dazu:
  - a) Berechnen Sie  $B = A^T A$
  - b) Bestimmen Sie die Eigenwerte  $\lambda_1, \lambda_2$  von  $B$  ( $\lambda_1 = 6, \lambda_2 = 1$ )
  - c) Berechnen Sie die Eigenvektoren von  $B$  ( $v_1 = [2, 1]^T, v_2 = [1, -2]^T$ )
  - d) Normalisieren Sie die Eigenvektoren auf Länge 1 ( $v_i \leftarrow \frac{v_i}{\|v_i\|_2}$ )
  - e) Berechnen Sie  $u_1 = \frac{1}{\sqrt{6}} \cdot A \cdot v_1, u_2 = \frac{1}{\sqrt{1}} \cdot A \cdot v_2$
  - f) Berechnen Sie den dritten linear unabhängigen Vektor  $u_3$  mittels des Kreuzproduktes  $u_3 = u_1 \times u_2$ .

Die Singulärwertzerlegung von  $A$  ist dann gegeben durch  $A = USV^T$  mit  $U = [u_1, u_2, u_3], S = [\sqrt{\lambda_1}, 0; 0, \sqrt{\lambda_2}; 0, 0], V^T = [2/\sqrt{5}, 1/\sqrt{5}; 1/\sqrt{5}, -2/\sqrt{5}]$  ( $V = [v_1, v_2]$ )

Die SVD kann nicht nur zum Lösen von Quadratmittelproblemen genutzt werden, sondern ist auch Hilfsmittel zur Klassifikation in der sogenannten Hauptkomponentenanalyse! Dort ermöglicht die SVD die Unterscheidung von relevanten und nichtrelevanten Merkmalen eines Datensatzes.

Zur Erinnerung: Für einen Eigenvektor  $u$  einer Matrix  $A$  und zugehörigem Eigenwert  $\lambda$  gilt  $Au = \lambda u$ . Die Eigenwerte  $\lambda_i$  bestehen aus der Lösungsmenge der Gleichung  $|A - \lambda I| = 0$ . Die zugehörigen Eigenvektoren  $u_i$  ergeben sich durch Lösung von  $(A - \lambda_i I)u_i = 0$ .

## 2 Gram-Schmidt-Orthogonalisierung

Mittels des Gram-Schmidt Orthogonalisierungsverfahren (GSO) können Sätze von Vektoren orthogonalisiert werden, d.h. initial nicht senkrechte (linear unabhängige) Vektoren werden in paarweise orthogonale Vektoren überführt. Dies kann zur QR-Zerlegung einer Matrix  $A$  verwendet werden. Dazu werden die Spaltenvektoren  $a_i$  von  $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$  mit Hilfe des GSO orthogonalisiert. Die resultierenden, orthogonalen (Spalten-)Vektoren  $q_i$  bilden dann die orthogonale Matrix  $Q = [q_1, q_2, \dots, q_N]$ . Die Dreiecksmatrix  $R$  der QR-Zerlegung ist dann gegeben durch  $R = Q^T A$ .

- 1) Implementieren Sie dazu zunächst das klassische Gram-Schmidt-Verfahren nach Vorlesung 3, Folie 40. Ihre Funktion sollte eine reguläre Matrix  $A$  als Inputparameter erwarten und die QR-Zerlegung der Matrix

zurückgeben! Testen Sie es an der Matrix  $A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$  und verifizieren Sie, dass die erhaltene QR-Zerlegung mit den Matrizen  $Q$  und  $R$  entsprechend

$$Q = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{bmatrix}, R = \begin{bmatrix} \frac{2}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ 0 & 0 & \frac{2}{\sqrt{3}} \end{bmatrix} \quad (1)$$

(bis ggf. auf ein Vorzeichen) identisch ist zum Ergebnis der HHT angewendet auf die selbe Matrix!

- 2) Das klassische Verfahren ist numerisch instabil, wenn Matrizen mit nahezu linear abhängigen Spalten orthogonalisiert werden sollen. Die erhaltenen Vektoren "verlieren" dann an Orthogonalität. Prüfen Sie dieses Verhalten, anhand der Matrix  $B = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \epsilon & 0 & \epsilon \\ 0 & \epsilon & \epsilon \end{bmatrix}$  für verschiedene kleine Werte

von  $\epsilon$ . Geben Sie als Test jeweils das Skalarprodukt der resultierenden (eigentlich) orthogonalen Vektoren  $q_2$  und  $q_3$  mittels des `dot`-Befehls aus.

Hinweis: Mit dem Befehl `realmin` (und `realmax`) kann man sich die kleinste (und größte) darstellbare normierte Fließkommazahl doppelter Präzision ausgeben lassen.

- 3) Implementieren Sie nun das modifizierte Gram-Schmidt Verfahren nach Vorlesung 3, Folie 42. Dieses weist eine bessere numerische Stabilität auf, da jeder Vektor gegenüber allen anderen Vektoren der Matrix orthogonalisiert wird. Wiederholen Sie das Experiment aus 2) und beobachte Sie, wie sich das Verhalten vom klassischen Verfahren unterscheidet.

### 3 QR-Iteration ohne Verschiebung

In diesem Abschnitt wollen wir ein erstes Iterationsverfahren durchgehen, das zur Berechnung mehrerer Eigenwerte einer Matrix verwendet werden kann: die sogenannte *QR-Iteration* für reelle, symmetrische Matrizen. Hierbei wird die Ausgangsmatrix  $A$ , deren Eigenwerte und -vektoren wir suchen, wiederholt iterativ QR-zerlegt und anschließend aus der erhaltenen QR-Zerlegung gemäß  $\tilde{A} = RQ$  eine neue Matrix gebildet. Der Algorithmus lautet also wie folgt:

#### QR-Iteration

1) Setze  $A^{(0)} = A$

2) Berechne nun iterativ

$$Q^{(k)} R^{(k)} = A^{(k-1)}$$

$$A^{(k)} = R^{(k)} Q^{(k)}$$

für  $k = 1, 2, \dots$

3) Beende Iteration, wenn  $A^{(k)}$  hinreichend nahe an einer Diagonalmatrix ist

Die nötige QR-Zerlegung können Sie wahlweise mit Ihren eigenen Routinen des vorherigen Blattes oder mittels der Matlab-Funktion *qr* bestimmen. Die Spalten der Produktmatrix  $Q^{(1)} Q^{(2)} \dots Q^{(N)}$  konvergieren dann gegen eine Basis von Eigenvektoren der Ausgangsmatrix  $A$ . Die Diagonalelemente der Matrix  $A^{(k)}$  konvergieren wiederum gegen die Eigenwerte der Ausgangsmatrix  $A$ . Implementieren Sie nun diesen Algorithmus und erproben Sie ihn an den Matrizen

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix} 2 & -3 & 1 \\ -3 & 1 & 3 \\ 1 & 3 & -4 \end{bmatrix} \quad (2)$$

Prüfen Sie das Ergebnis der Iteration in dem Sie mittels Matlabs *eig* Funktion die Eigenwerte und Eigenvektoren der beiden Matrizen berechnen und Ihr Ergebnis mit jenem von Matlab vergleichen.

## 4 QR-Iteration mit Verschiebung

Aus der Vorlesung wissen Sie, dass die Konvergenzrate der QR-Iteration durch eine Verschiebung  $\sigma_k$  verbessert werden kann. Dazu wird der Algorithmus vor der QR-Zerlegung um eine Verschiebung der Matrix  $A_k$  ergänzt. Der dann resultierende Algorithmus lautet dann wie folgt:

### QR-Iteration mit Verschiebung

1) Setze  $A^{(0)} = A$

2) Berechne nun iterativ

$$Q^{(k)} R^{(k)} = A^{(k-1)} - \sigma_k I$$

$$A^{(k)} = R^{(k)} Q^{(k)} + \sigma_k I$$

für  $k = 1, 2, \dots$

3) Beende Iteration, wenn  $A^{(k)}$  hinreichend nahe an einer Diagonalmatrix ist

Hierbei sollte  $\sigma^{(k)}$  eine Schätzung eines Eigenwerts sein. Als Schätzung kann z.B. ein Eigenwert der  $2 \times 2$  - Untermatrix der rechten unteren Ecke der Matrix  $A_{k-1}$  dienen. Implementieren Sie nun diese Erweiterung und vergleichen Sie die nötigen Iterationsschritte für verschiedene Werte von  $\sigma^{(k)}$ , z.B. einmal nahe eines Eigenwertes und einmal fern davon und einmal mit  $\sigma^{(k)} = 0$  (ohne Verschiebung), für die Matrizen  $A$  und  $B$ .