

Metody Numeryczne N03

Jakub Kurek

1. Wstęp

Celem zadania jest znalezienie dwóch największych oraz czterech najmniejszych co do modułu wartości własnych oraz ich wektorów własnych macierzy:

$$A_{ij} = \begin{cases} -\frac{2}{h^2} + V_i & \text{dla } i = j \\ \frac{1}{h^2} & \text{dla } i - j = \pm 1 \\ 0 & \text{w przeciwnym przypadku} \end{cases} \quad h = \frac{20}{N-1} \quad V_i = (ih - 10)^2$$

Program liczący rozwiązania został napisany w C++23 przy użyciu biblioteki **Eigen** w wersji 5.0.1. Wykresy zostały stworzone w języku Python przy użyciu biblioteki matplotlib. Cały kod wykorzystywany do obliczeń i rysowania wykresów znajduje się w repozytorium na **GitHub**.

2. Metoda potęgowa

Dla naszej macierzy A wiemy, że jest ona symetryczna $A^T = A \in \mathbb{R}^{N \times N}$. Dzięki temu wiemy, że jest ona diagonalizowalna, ma rzeczywiste wartości własne oraz jej unormowane wektory własne tworzą bazę ortonormalną w \mathbb{R}^N . Oznaczmy tę bazę $\{e_i\}_{i=1}^N$ wówczas $Ae_i = \lambda_i e_i$. Przyjmujemy dodatkowo, że wartości własne są dodatnie i uporządkowane $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_N > 0$. Dla dowolnego wektora $y \in \mathbb{R}^N$ istnieje rozkład w bazie:

$$y = \sum_i^N B_i e_i$$

Mamy wówczas:

$$Ay = A \sum_i^N B_i e_i = \sum_i^N B_i A e_i = \sum_i^N B_i \lambda_i e_i$$
$$A^k y = \sum_i^N B_i \lambda_i^k e_i$$

Dla dostatecznie dużych k wyraz z λ_1^k będzie dominował w sumie, a reszta współczynników będzie zaniedbywalna. Dla dostatecznie dużych k prawa strona będzie dążyć do wektora proporcjonalnego do e_1 czyli wektora własnego największej wartości własnej.

Dla $\|y_1\| = 1$ iteracja:

$$z_k = Ay_k$$
$$y_{k+1} = \frac{z_k}{\|z_k\|}$$

zbiega się do unormowanego wektora własnego A odpowiadającego największej wartości własnej. Dla $y_k \simeq e_1$ (wartości przestają się zauważalnie zmieniać). Unormowaną wartość własną obliczamy $\|\lambda_1\| = \|z_k\| = \|Ay_k\|$.

2.1. Kolejne wartości własne

Wektor y_k nie będzie zbiegał do największej wartości własnej (każdej wartości własnej większej niż λ_i). Wtedy i tylko wtedy gdy współczynniki $B_j = 0$ dla $j < i$. Dlatego trzeba zapewnić, żeby y_1 oraz kolejne y_k były prostopadłe do wcześniej obliczonych wektorów własnych.

W arytmetyce dokładnej ortogonalizacja musi nastąpić tylko dla y_1 , lecz ze względu na błędy arytmetyki nie dokładnej. Trzeba ortogonalizować każdy wektor y_k .

Iteracja wówczas dla i -tej wartości własnej wygląda:

Założenia: $\|y_1\| = 1 \wedge \forall_{j < i} e_j^T y_1 = 0$

$$\begin{aligned} z_k &= Ay_k \\ z_k &= z_k - \sum_{j < i} e_j(e_j^T z_k) \\ y_{k+1} &= \frac{z_k}{\|z_k\|} \end{aligned}$$

2.2. Najmniejsze wartości własne

Dla macierzy $A^T = A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ najmniejsza wartość własna odpowiada $\frac{1}{\max\{\mu_i\}}$ macierzy A^{-1} . Metoda potęgowa wówczas przybiera postać:

$$\begin{aligned} z_k &= A^{-1}y_k \\ y_{k+1} &= \frac{z_k}{\|z_k\|} \end{aligned}$$

Zapis $A^{-1}y_k = z_k$ rozwiązujemy jako $Az_k = y_k$. Dla naszej macierzy A ze względu na jej trójdziagonalną postać możemy skorzystać z algorytmu Thomasa, przez co obliczanie kolejnych wektorów z_n wykonujemy w czasie $O(N)$.

3. Metoda Rayleigha

Metoda Rayleigha jest modyfikacją metody potęgowej, która wykorzystuje fakt iż wartości własne macierzy $A - \sigma\mathbb{I}$ wynoszą $\lambda_i - \sigma$, gdzie λ_i są wartościami własnymi macierzy A dla odpowiadających wektorów własnych. Szukając największej wartości własnej λ_i tak naprawdę szukamy najmniejszych wartości własnych macierzy $A - \sigma\mathbb{I}$, ponieważ $\max\{\lambda_i\} - \sigma \simeq 0$

Dla najlepszych efektów najlepiej zacząć rozwiązywanie zwykłą metodą potęgowa na parę iteracji, żeby później aktualizować lepiej przybliżoną wartość σ .

Po zmianie metody iteracja przybiera postać:

$$\begin{aligned} \sigma &= y_k^T Ay_k \\ z_k &= (A - \sigma\mathbb{I})^{-1}y_k \\ z_k &= z_k - \sum_{j < i} e_j(e_j^T z_k) \\ y_{k+1} &= \frac{z_k}{\|z_k\|} \end{aligned}$$

W zależności od tego czy chcemy znaleźć największą czy najmniejszą wartość własną pre-iterujemy metodą potęgowa lub odwrotną metodą potęgowa.

4. Rozwiązanie

Przyjmując $N = 500$ metody dają rozwiązania

$\min\{ \lambda_i \}$	Wartość
$\frac{1}{\mu_1}$	0.490098
$\frac{1}{\mu_2}$	0.713051
$\frac{1}{\mu_3}$	-0.806307
$\frac{1}{\mu_4}$	-1.75069

Tabela 1: Najmniejsze wartości własne

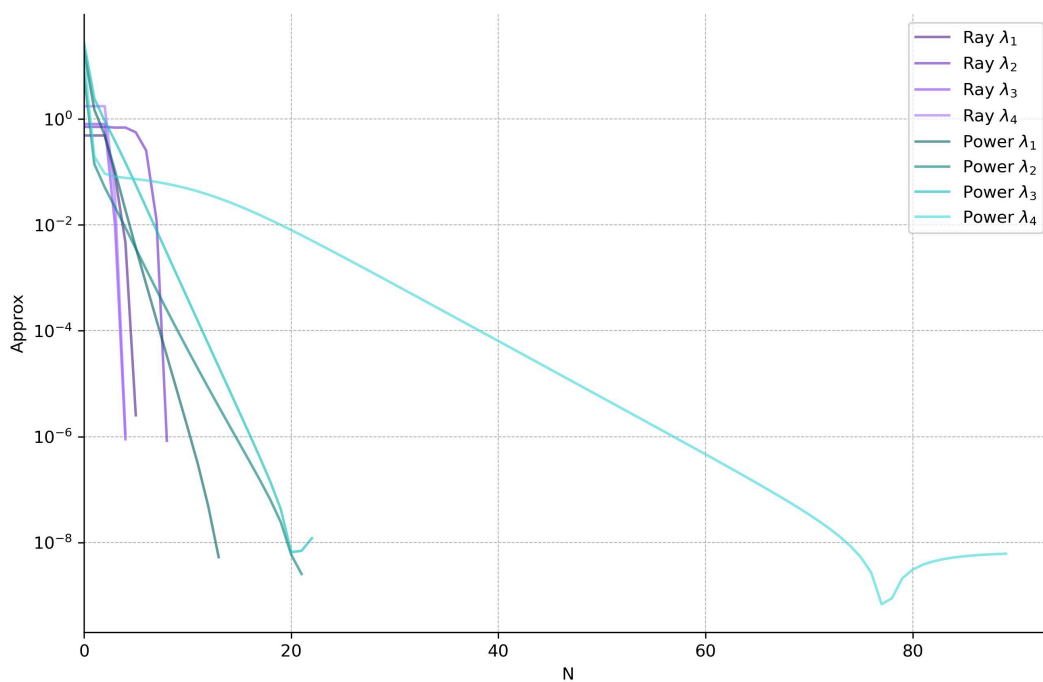
$\max\{ \lambda_i \}$	Wartość
λ_1	-2489.01
λ_2	-2487.01

Tabela 2: Największe wartości własne

Kluczową różnicą w obu metodach jest szybkość zbieżności:

$\min\{ \lambda_i \}$	Ilość iteracji potęgowa	Ilość iteracji Rayleigha	Ilość iteracji Rayleigha minus preiteracje
$\frac{1}{\mu_1}$	21	6	3
$\frac{1}{\mu_2}$	89	9	6
$\frac{1}{\mu_3}$	13	5	2
$\frac{1}{\mu_4}$	22	5	2

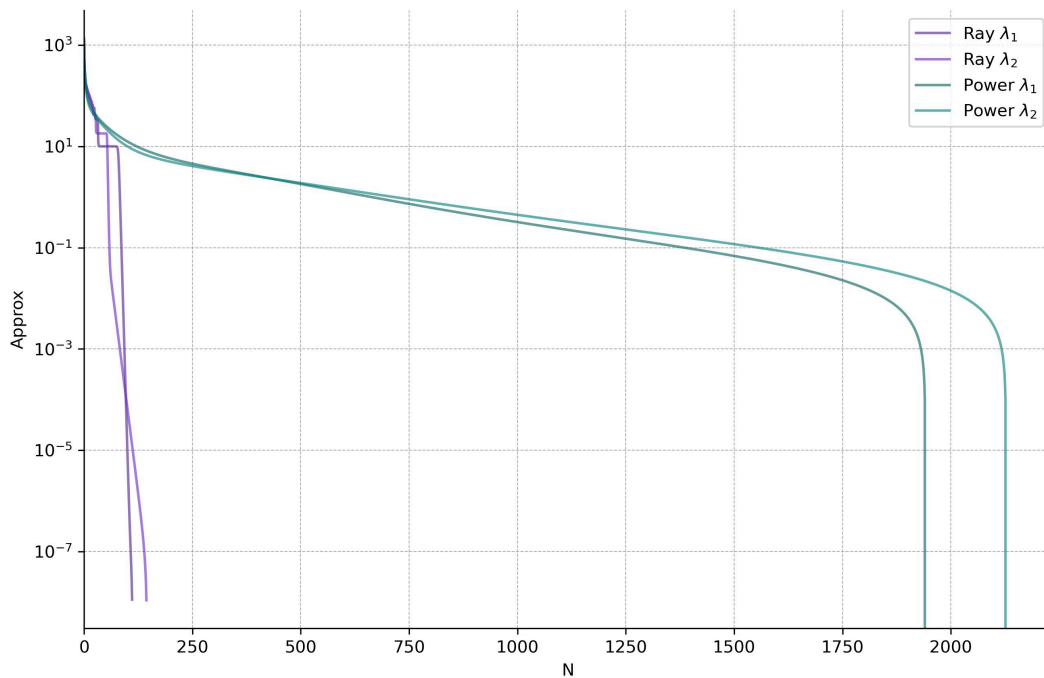
Tabela 3: Zbieżność dla najmniejszych wartości własnych



Wykres 1: Zbieżność dla najmniejszych wartości własnych

$\max\{ \lambda_i \}$	Ilość iteracji potęgowa	Ilość iteracji Rayleigha	Ilość iteracji Rayleigha minus preiteracje
λ_2	1941	129	126
λ_1	2127	111	108

Tabela 4: Zbieżność dla największych wartości własnych



Wykres 2: Zbieżność dla największych wartości własnych

W zależności od tego jak dobrze jest zbieżna metoda dla danej macierzy i kolejnych wartości własnych metoda Rayleigha potrzebowała 15-20 razy mniej iteracji niż metoda potęgowa Tabela 4 oraz 10-15 razy mniej iteracji niż odwrotna metoda potęgowa Tabela 3. Ze względu na dość szybką zbieżność odwrotnej metody potęgowej dla zadanej macierzy połowa wszystkich iteracji w metodzie Rayleigha zostaje wykorzystana do naprowadzenia metodą potęgową. Dopiero porównanie ich od momentu, w którym iteracje się różnią daje nam rzeczywiste porównanie różnic w zbieżności.

5. Podsumowanie

Metoda Rayleigha jest zdecydowanie bardziej efektywna niż metoda potęgowa pod względem wykonywanych iteracji, chociaż trzeba zwrócić uwagę, że dla niej rozkład macierzy jest wykonywany w każdym kroku iteracji, a nie jak w metodzie potęgowej tylko na początku. W tym przypadku rozkład i rozwiązywanie przy użyciu algorytmu Thomasa jest szybkie, lecz nie zawsze zachodzi to w ogólności.

Drugim ważnym problemem metody Rayleigha jest to, że jeśli nie wykonamy dostatecznie dużo iteracji metodą potęgową lub dla szukanej wartości własnej λ_i zachodzi $\frac{\lambda_{i+1}}{\lambda_i} \ll 1$ to metoda ta, może zbiec do fałszywego maksimum (lub minimum), gdyż najlepiej ona znajduje wartość własną najbliższą σ , co w przypadku złego uwarunkowania może prowadzić do złych szacowań σ .