Metody numeryczne

Laboratorium 5

Wyznaczanie wartości i wektorów własnych macierzy symetrycznej metodą potęgową z redukcją Hotellinga.

09.04.2020r.

Adrian Furman

1. Wstęp teoretyczny

Wektorem własnym macierzy A nazywamy taki wektor $\vec{x}$, który jest nietrywialnym rozwiązaniem równania:

$$(A - \lambda I)\vec{x} = 0.$$

nazywanego problemem własnym macierzy. Takie rozwiązanie istnieje wtedy gdy:

$$det(A - \lambda I) = 0.$$

Obliczając powyższy wyznacznik, otrzymujemy wielomian charakterystyczny macierzy kwadratowej A stopnia n, zmiennej $\lambda,$ gdzie n to wymiar naszej macierzy.

Metoda potęgowa (iteracji wektorów) polega na wyznaczaniu kolejnych, coraz dokładniejszych przybliżeń wektora własnego $\vec{x}_i,$ który odpowiada wartości własnej λ_i o największym module.

Zakładając:

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > ... > |\lambda_n|,$$

przedstawiamy dowolny początkowy wektor jako kombinację liniową wektorów własnych:

$$\vec{x_1} = c_1\vec{u_1} + c_2\vec{u_2} + \dots + c_n\vec{u_n},$$

W każdej iteracji mnożymy równanie stronami przez naszą macierz A i dokonujemy odpowiednich przekształceń.

W ogólności otrzymujemy:

$$\overrightarrow{x_{k+1}} = \vec{u_1} + \frac{c_2(\lambda_2)^k}{c_1(\lambda_1)^k}\vec{u_2} + \dots + \frac{c_n(\lambda_n)^k}{c_1(\lambda_1)^k}\vec{u_n}.$$

Pamiętając, że $\frac{\lambda_i}{\lambda_1} < 1,$ dla i > 1 otrzymujemy $\overrightarrow{x_{k+1}} = \vec{u_1}$ przy $\grave{k} \to \infty.$

Na podstawie tych rozważań możemy dojść do wzoru na dominującą wartość własną (o największym module):

$$\lambda_1 = \lim_{k \to \infty} \frac{\overrightarrow{x_{k+1}}^T \vec{x_k}}{\vec{x_k}^T \vec{x_k}}. \quad (1)$$

Redukując naszą macierz do macierzy o tych samych wartościach własnych oprócz dominującej $\lambda_1,$ która jest zerem, możemy obliczyć pozostałe wartości własne.

W przypadku **redukcji Hotellinga** (tylko dla macierzy symetrycznych) równanie redukujące przyjmuje następującą postać:

$$W_i = W_{i-1} - \lambda_{i-1}\overrightarrow{x_{i-1}}\,\overrightarrow{x_{i-1}}^T. \quad (2)$$

W ogólności ostatni wektor poddawany transponowaniu jest lewym wektorem własnym ale w tym przypadku z racji symetryczności macierzy wektor ten jest identyczny jak ten prawostronny.

2. Zadanie do wykonania

2.1. Opis problemu

Celem zajęć było wyznaczenie wartości własnych symetrycznej macierzy A o wymiarze n = 7, która wypełniona została w następujący sposób:

$$A_{i,j} = \sqrt{i + j}.$$

W celu późniejszego porównania wyników dokonaliśmy diagonalizacji naszej macierzy za pomocą gotowych funkcji *tred2* oraz *tqli* z biblioteki *Numerical Recipes* w sposób analogiczny do zajęć poprzednich.

We właściwej części zadania dla każdej z 7 wartości własnych λ_k wykonaliśmy $i = 8$ iteracji poprawiających dokładność naszego oszacowania. Każda iteracja - i składała się z następujących kroków:

1) Kolejne – i-te przybliżenie k-tego wektora własnego:

$$\vec{x}_k^{\,i+1} = W_k \vec{x}_k^{\,i}.$$

2) Obliczenie i-tego przybliżenia k-tej wartości własnej:

$$\lambda_k^i = \frac{\left(\vec{x}_k^{\,i+1}\right)^T \vec{x}_k^{\,i}}{\left(\vec{x}_k^{\,i}\right)^T \vec{x}_k^{\,i}}.$$

3) znormalizowanie oraz przepisanie przybliżenia wektora własnego:

$$\vec{x}_k^{\,i} = \frac{\vec{x}_k^{\,i+1}}{\left\|\vec{x}_k^{\,i+1}\right\|_2}.$$

Po zakończeniu wszystkich 8 iteracji dla danego wektora własnego k, dokonywano redukcji Hotellinga:

$$W_{k+1} = W_k - \lambda_k \vec{x}_k^{\,i} \left(\vec{x}_k^{\,i}\right)^T,$$

a następnie przechodzono do kolejnego wektora.

2.2. Wyniki

W pierwszej z niżej zamieszczonych tabel przedstawiono wartości własne uzyskane za pomocą funkcji *tred2* i *tqli* – kolumna 2, oraz w kolumnie 3 rezultaty zaimplementowanej metody potęgowej. Druga z tabel przedstawia przebieg kolejnych, coraz dokładniejszych oszacowań dla dwóch pierwszych wartości własnych.

λ	Wyniki otrzymane za pomocą biblioteki Numerical Recipes	Wyniki otrzymane metodą potęgową (iteracji wektorów)
1.	19.7861671448	19.7861671448
2.	-0.7123410106	-0.7123403549
3.	-0.0133177759	-0.0133171650
4.	-0.0003359802	-0.0003353067
5.	-0.0000071079	-0.0000066027
6.	0.0000004436	0.0000008497
7.	-0.0000004022	-0.0000002382

Tabela 1. Porównanie wartości własnych otrzymanych metodą potęgową z wynikami uzyskanymi przy użyciu biblioteki Numerical Recipes.

Numer iteracji - i	Wartość oszacowania λ_1^i	Wartość oszacowania λ_2^i
1.	19.4523563385	-0.0115400208
2.	19.7857265472	-0.7123389840
3.	19.7861671448	-0.7123404741
4.	19.7861671448	-0.7123404145
5.	19.7861671448	-0.7123403549
6.	19.7861671448	-0.7123403549
7.	19.7861671448	-0.7123404145
8.	19.7861671448	-0.7123403549

Tabela 2. Przebieg kolejnych oszacowań dla dwóch pierwszych wartości własnych.

Patrząc na pierwszą tabelę widzimy, że początkowe wyniki pokrywają się z dużą dokładnością oraz są zgodne z oczekiwaniami. Jednak wraz z przesuwaniem się na kolejne wartości własne zauważamy coraz większe rozbieżności – tracimy na precyzji. Wyniki 5, 6, 7 różnią się już co do pierwszej cyfry znaczącej. Wynika to z agregacji błędów oszacowań – metoda potęgowa nie daje nam dokładnych wyników a jedynie ich przybliżenia, których dokładność zależy od liczby iteracji oraz błędów numerycznych. Każda kolejna wartość własna obliczana jest min. w oparciu o ten przybliżony poprzedni wektor własny. Przy dalszych wartościach własnych błędy przybliżeń agregują się co przekłada się na spadającą dokładność kolejnych wartości własnych a ostatecznie w połączeniu z dużą różnicą w rzędach wielkości wartości dominującej oraz wartości końcowych może doprowadzić do kompletnie niepoprawnych wyników.

Istotnym krokiem w metodzie potęgowej jest normalizacja wektora własnego, która jak wiemy z algebry nie zmienia jego własności – nadal pozostaje wektorem własnym. Normalizacja ważna jest z dwóch powodów:

1) Wartości w kolejnych przybliżeniach mogą szybko rosnąc co może doprowadzić do błędu nadmiaru/niedomiaru podczas dalszych oszacowań rozpatrywanego wektora,

2) Normalizacja jest niezbędna aby spełniony był warunek redukcji macierzy, który w ogólności wygląda następująco:

$$\vec{v}^T \vec{x_k} = 1,$$

a w przypadku redukcji Hotellinga sprowadza się do postaci:

$$\vec{x_k}^T \vec{x_k} = 1,$$

co jest równoznaczne z koniecznością wcześniejszej normalizacji wektora.

Zaniedbanie tego warunku spowodowało by nieprawidłową redukcję macierzy co przy przejściu do szacowania kolejnego wektora własnego doprowadziło by bo błędnych rezultatów – o ile nie doszło by wcześniej do wspomnianego błędu nadmiaru/niedomiaru.

3. Wnioski

Metoda potęgowa jest dobrym i wydajnym narzędziem do wyznaczania dominującej wartości własnej macierzy. Stosując redukcję Hotellinga można rozszerzyć wykorzystanie tej metody do obliczania kolejnych dominujących wartości własnych jednak należy mieć na uwadze agregujące się błędy oszacowania związane z iteracyjną naturą samej metody oraz zależnością kolejnych wartości własnych od przybliżonych wektorów własnych odpowiadających poprzednim wartościom dominującym.

Szybki wzrost wartości w przybliżanym iteracyjnie wektorze może skutkować błędem nadmiaru/niedomiaru. Istotnym z tego względu krokiem jest normalizacja wektora w każdej kolejnej iteracji. Normalizacji wymaga od nas także stosowana metoda redukcji Hotellina, dla której musi zostać spełniony przytoczony w omówieniu wyników warunek.