Metody numeryczne
Sprawozdanie z ćwiczeń laboratoryjnych nr 5

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

Jan Zajda
Informatyka Stosowana
WFiIS
Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie
4 kwietnia 2020

1. Wstęp teoretyczny

Przy obliczaniu wartości i wektorów własnych często zależy nam na znalezieniu jednej pary własnej, np. gdy rozważana macierz jest bardzo dużych rozmiarów. W takiej sytuacji możemy wykorzystać iteracyjną metodę potęgową, która pozwala znaleźć dominującą wartość własną wraz jej wektorem własnym.

Załóżmy, że macierz $\mathbf{A}$ rozmiaru $n \times n$ posiada wektory własne:

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq ... \geq |\lambda_n|. \tag{1}$$

Mówimy wtedy, że wartość własna λ_1 jest dominująca.

Załóżmy także, że macierz $\mathbf{A}$ posiada bazę złożoną z n liniowo niezależnych wektorów własnych $\vec{q_1}, \vec{q_2}, ..., \vec{q_n}$.

Wybieramy dowolny wektor $\vec{x}$ taki, że:

$$\vec{x} = a_1\vec{q_1} + a_2\vec{q_2} + ... + a_n\vec{q_n} = \sum_{i=1}^{n} a_i\vec{q_i}.$$

Wtedy:

$$\mathbf{A}\vec{x} = \mathbf{A}\sum_{i=1}^{n} a_i\vec{q_i} = \sum_{i=1}^{n} a_i\mathbf{A}\vec{q_i} = \sum_{i=1}^{n} a_i\lambda_i\vec{q_i},$$

$$\vec{x}_m = \mathbf{A}^m\vec{x} = \sum_{i=1}^{n} a_i\lambda_i^m\vec{q_i} = \lambda_1^m(a_1\vec{q_1} + a_2(\frac{\lambda_2}{\lambda_1})^m\vec{q_2} + ... + a_n(\frac{\lambda_n}{\lambda_1})^m\vec{q_n}), \tag{2}$$

gdzie m oznacza liczbę iteracji. Zauważmy zatem, że $\lim_{m\to\infty} \frac{\vec{x}_m}{\lambda_1^m} = a_1\vec{q_1}$, o ile $|\frac{\lambda_i}{\lambda_1}| < 1$ (zapewnia nam to założenie (1)) oraz $a_1 \neq 0$, które to warunki decydują o zbieżności metody. Wartość własną w każdej iteracji obliczamy korzystając ze wzoru:

$$\lambda_1 = \frac{\vec{x}_{m+1}^T\vec{x}_m}{\vec{x}_m^T\vec{x}_m},$$

natomiast wektor własny jest w przybliżeniu równy $\vec{x}_m \approx \lambda_1^m a_1 \vec{q_1}$ ze wzoru (2), więc normujemy go w każdej iteracji:

$$\vec{x}_{m+1} = \frac{\vec{x}_{m+1}}{||\vec{x}_{m+1}||},$$
(3)

aby uniknąć nadmiaru dla $|\lambda_1| > 1$ oraz niedomiaru dla $|\lambda_1| < 1$.

Jeżeli chcemy obliczyć tą metodą kolejne pary własne, możemy przeprowadzić redukcję Hotellinga, która jest skuteczna w przypadku macierzy symetrycznych. Polega ona na redukowaniu macierzy $\mathbf{A}_i$ po obliczeniu kolejnych wartości własnych:

$$\mathbf{A}_1 = \mathbf{A},$$

$$\mathbf{A}_{i+1} = \mathbf{A}_i - \lambda_i \vec{x}_i \vec{x}_i^T, \quad i = \{1, 2, ..., n\}.$$

2. Zadanie do wykonania

2.1. Opis problemu

W zadaniu definiujemy macierz $\mathbf{A}$ rozmiaru $n \times n$ i wypełniamy ją wg wzoru:

$$\mathbf{A}_{ij} = \sqrt{i + j}.$$

Dokonujemy obliczenia wektorów i własności własnych metodami bezpośrednimi, najpierw sprowadzając $\mathbf{A}$ do macierzy trójdiagonalnej za pomocą funkcji $tred2(\mathbf{A}, n, \vec{d}, \vec{e})$, a następnie korzystając z funkcji $tqli(\vec{d}, \vec{e}, n, \mathbf{A})$, pamiętając, że macierz $\mathbf{A}$ została nadpisana w $tred2$ przez macierz przekształcenia $\mathbf{P}$.

W drugiej części zadania do obliczenia wektorów i wartości własnych wykorzystujemy iteracyjną metodę potęgową z redukcją Hotellinga, zaimplementowaną samodzielnie.

Przyjmujemy dane:

$$n = 7, \qquad m = 8.$$

Wektor startowy:

$$\vec{x}_0 = [1, 1, 1, 1, 1, 1, 1].$$

Normę obliczamy ze wzoru:

$$||\vec{x}_{m+1}|| = \sqrt{\vec{x}_{m+1}^T \vec{x}_{m+1}}.$$

2.2. Wyniki

Jako wynik działania programu wypisujemy wartości własne uzyskane pierwszą i drugą metodą.

Pierwsza metoda:

$\lambda_1 = -4.02198e - 07,$

$\lambda_2 = 4.43579e - 07,$

$\lambda_3 = -7.10793e - 06,$

$\lambda_4 = -0.00033598,$

$\lambda_5 = -0.0133178,$

$\lambda_6 = -0.712341,$

$\lambda_7 = 19.7862.$

Druga metoda:

$\lambda_1 = 19.7862,$

$\lambda_2 = -0.71234,$

$\lambda_3 = -0.0133172,$

$\lambda_4 = -0.000335307,$

$\lambda_5 = -6.60271e - 06,$

$\lambda_6 = 8.49657e - 07,$

$\lambda_7 = -2.38169e - 07.$

3. Wnioski

Zgodnie z oczekiwaniami, w metodzie iteracyjnej uzyskaliśmy wartości własne w kolejności na moduł malejącej. Możemy zauważyć, że pierwsza (największa) wartość jest identyczna jak ta uzyskana za pomocą metody bezpośredniej, natomiast każda kolejna różni się coraz bardziej, a ostatnia jest już niemal dwa razy większa od odpowiadającej, chociaż ciągle zachowany jest poprawny rząd wielkości. Wynik ten prawie nie zmienia się przy większej liczbie iteracji, więc podejrzewam, że różnica wynika z niedokładności liczb zmiennoprzecinkowych przy przeprowadzanej redukcji Hotellinga.

Sprawdziłem także wartości wektorów własnych przy pominięciu równania (3), korzystającego z obliczonej normy wektora x_{m+1} . Dla $\lambda_1 > 1$ uzyskałem wektor z wartościami inf, czyli olbrzymi nadmiar, natomiast pozostałe wartości własne i ich wektory były wypełnione wartościamy $-nan$, co świadczy o bardzo dużym niedomiarze. Możemy więc stwierdzić, że bez stosowania normy ciężko uzyskać interpretowalne wyniki.