

Trabalho 3

Gustavo Giro Resende - 11340571

Introdução

Quando trabalhando com matrizes esparsas, métodos iterativos para solução de sistemas lineares se mostram mais eficientes computacionalmente que os tradicionais, devido as estruturas dessas matrizes. A convergência desses métodos é equivalente ao raio espectral de uma matriz T , gerada pelo método, ser menor que 1. Logo, em estudos envolvendo esses métodos, é interessante conhecer o auto-valor dominante antes de aplica-los.

O estudo tem como objetivo analisar e comparar três métodos para encontrar auto-valores de uma matriz. O método da potência simétrico e o método da potência inversa buscam o raio espectral da matriz, enquanto a decomposição QR busca o espectro completo, utilizando uma decomposição da mesma. Como as matrizes são simétricas, o método da potência simétrico se mostrou mais eficiente que o método da potência tradicional, utilizando-se então este para a comparação com o método da potência inverso.

Para todos os exemplos expostos aqui foram consideradas as seguintes características:

- As matrizes imputadas são simétricas positivas definidas
- O número máximo de interações considerado para os métodos da potência foi de 300
- Para a decomposição QR foram utilizadas 60 iterações.
- A tolerância foi considerada de 10^{-3} para comparações dos métodos da potência
- O erro nos métodos da potência foi calculado como a norma 2 da diferença entre o vetor x e o vetor y normalizado.
- Foi utilizado o método de Aitken no método da potência simétrico e no método da potência inversa, tendo em vista que são sequências linearmente convergentes.
- Para o método da potência inversa, considerou-se o círculo de Gersgorin para encontrar um intervalo onde está o auto-valor dominante. (q foi encontrado considerando o círculo)

Partindo do pressuposto que todas as matrizes trabalhadas são **simétricas positivas definidas**, a análise será feita considerando os seguintes teoremas, que podem ser encontrados no livro da bibliografia “*Numerical Analysis*” (Burden e Faires), entre as paginas 571 e 573.

- Teorema 9.13: “Uma matriz A ($n \times n$) é similar a uma matriz diagonal se e somente se A tem n auto-vetores linearmente independentes”
- Teorema 9.14: “Uma matriz A ($n \times n$) que tem n auto-valores distintos é similar a uma matriz diagonal”

- Teorema 9.16: “Uma matriz A $n \times n$ é simétrica se e somente se existe uma matriz diagonal D e uma matriz ortogonal Q com $A = QDQ^T$ ”.

Como uma matriz ortogonal possui a propriedade de $Q^{-1} = Q^T$, com esse teorema, podemos dizer que A é similar a uma matriz diagonal D , o que implica que seus auto-vetores formam uma base para o \mathbb{R}^n . Prosseguindo o raciocínio.

- Teorema 9.17: “Supondo que a matriz A é simétrica, então seus auto-vetores formam um conjunto ortonormal e seus auto-valores são números reais”
- Teorema 9.18: “Uma matriz simétrica A é positiva definida se e somente se todos os seus auto-valores são positivos”

Levando em conta os teoremas acima, o método da potência considera que existe um único auto-valor dominante na matriz e que a matriz possui auto-vetores linearmente independentes. Mesmo se não existir um auto-valor dominante, a existência de uma base no \mathbb{R}^n formada por auto-vetores da matriz A e o fato da matriz ser simétrica positiva definida (o que equivale a possuir auto-valores positivos e no conjunto dos reais), já permite o uso do método.

A decomposição QR, utilizada para encontrar o espectro completo, considera o seguinte teorema válido para matrizes arbitrárias.

- Teorema 9.15 (Schur): “Seja A uma matriz arbitrária. Uma matriz U não singular existe com a propriedade $A = U^{-1}TU$, onde T é uma matriz triangular superior onde as entradas diagonais consistem dos auto-valores de A ”.

Como a decomposição QR é aplicada para matrizes densas, não considerou-se o produto de uma matriz por outra usando a forma esparsa da matriz no algoritmo.

Desenvolvimento

Os três métodos foram aplicados sobre as seguintes matrizes:

matrizes	dimensao	nao_nulos	esparsidade
Trefethen_20	20	158	0,605
mesh1em6	48	306	0,8671875
mesh1e1	48	306	0,8671875
nos4	100	594	0,9406
bcsstk05	153	2423	0,896492801913794
mesh2e1	306	2018	0,978448459994019
bcsstm20	485	485	0,997938144329897
Trefethen_700	700	12654	0,974175510204081
bcsstk10	1086	22070	0,981287031667057
nasa1824	1824	39208	0,988215123884272

Analisando primeiro a convergência, os auto-valores dominantes encontrados pelos métodos da potência foram próximos do auto-valor dominante encontrado pela decomposição QR. Como pode ser observado na tabela abaixo, para quase todas as matrizes o erro foi baixo na aproximação feita por cada método, quando comparado a magnitude do respectivo auto-valor.

- Na tabela, o método da potência simétrico é indicado por “MPS”, o método da potência inverso é indicado por “MPI” e a decomposição QR por “QR”. O raio espectral da matriz é indicado por “raio_esp_”

	matrizes	raio_esp_MPS	raio_esp_MPI	raio_esp_QR	erro_MPS	erro_MPI
6	Trefethen_20	7.151243e+01	7.151243e+01	7.147996e+01	0.032473	0.032473
3	mesh1em6	7.205989e+00	7.205989e+00	7.203349e+00	0.002640	0.002640
4	mesh1e1	9.134157e+00	9.134158e+00	9.101201e+00	0.032956	0.032957
8	nos4	8.491369e-01	8.491364e-01	8.450233e-01	0.004114	0.004113
2	bcsstk05	6.197273e+06	6.197285e+06	6.197286e+06	-13.521296	-1.388083

	matrizes	raio_esp_MPS	raio_esp_MPI	raio_esp_QR	erro_MPS	erro_MPI
5	mesh2e1	3.813006e+02	3.813006e+02	3.813006e+02	-0.000006	-0.000002
0	bcsstm20	4.779572e+07	4.785387e+07	4.779555e+07	164.810496	58321.295274
7	Trefethen_700	5.278101e+03	5.279287e+03	5.275885e+03	2.216547	3.402458
1	bcsstk10	4.474293e+07	4.474306e+07	4.424715e+07	495782.226	495909.016469
9	nasa1824	2.121717e+07	2.121717e+07	2.121717e+07	5.969403	5.792322

Fazendo a diferença entre o raio espectral encontrado pela decomposição QR e o raio espectral encontrado pelos outros dois métodos, considerando que a decomposição QR também é uma aproximação dos auto-valores, percebe-se que os erros na aproximação das matrizes “*bcsstm20*” e “*bcsstk10*” foram altos. Isso pode ter acontecido devido a alta esparsidade de ambas as matrizes, ou pela escolha do vetor inicial.

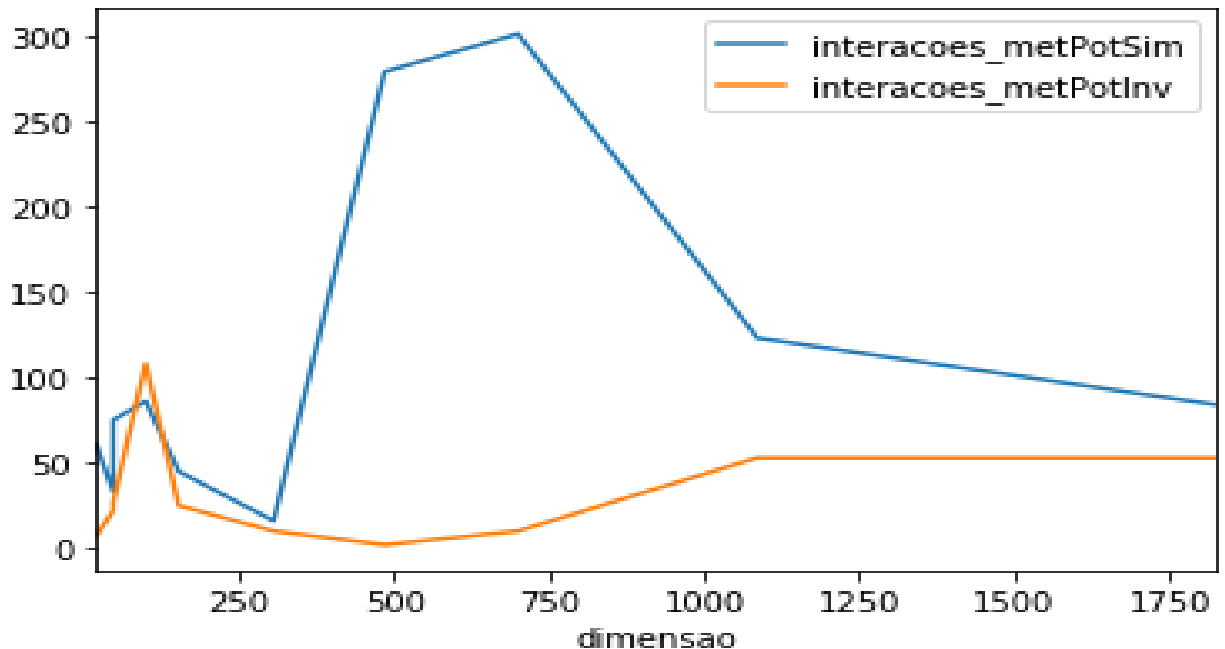
Quando comparando os métodos, em ambas as matrizes com o maior erro na aproximação o método da potência simétrico se mostrou mais preciso que o método da potência inversa mas, no geral, o erro de aproximação do método da potência inverso foi menor que o erro de aproximação do método da potência simétrico.

Analisando então o tempo computacional, como os métodos da potência foram fixados em no máximo 300 iterações, o tempo gasto pelo algoritmo está relacionado a velocidade de convergência e consequentemente a necessidade de realização do produto matriz vetor, no método da potência simétrico, e solução do sistema $Ay=x$ no método da potência inversa. O Gráfico e a tabela abaixo mostram que o método da potência simétrico necessitou, em grande maioria, de mais iterações para encontrar o raio espectral. Para a decomposição QR, que realiza sempre 60 iterações, o tempo está relacionado com a dimensão da matriz e com o gasto com cálculo dos produtos RQ e UQ .

	matrizes	dimensao	tempos_MPS	tempos_MPI	tempos_QR
6	Trefethen_20	20	0.093601	0.003727	0.010169
3	mesh1e6	48	0.036452	0.013289	0.023155
4	mesh1e1	48	0.043843	0.007684	0.010475
8	nos4	100	0.124050	0.039376	0.116445
2	bcsstk05	153	0.165879	0.020349	0.179633

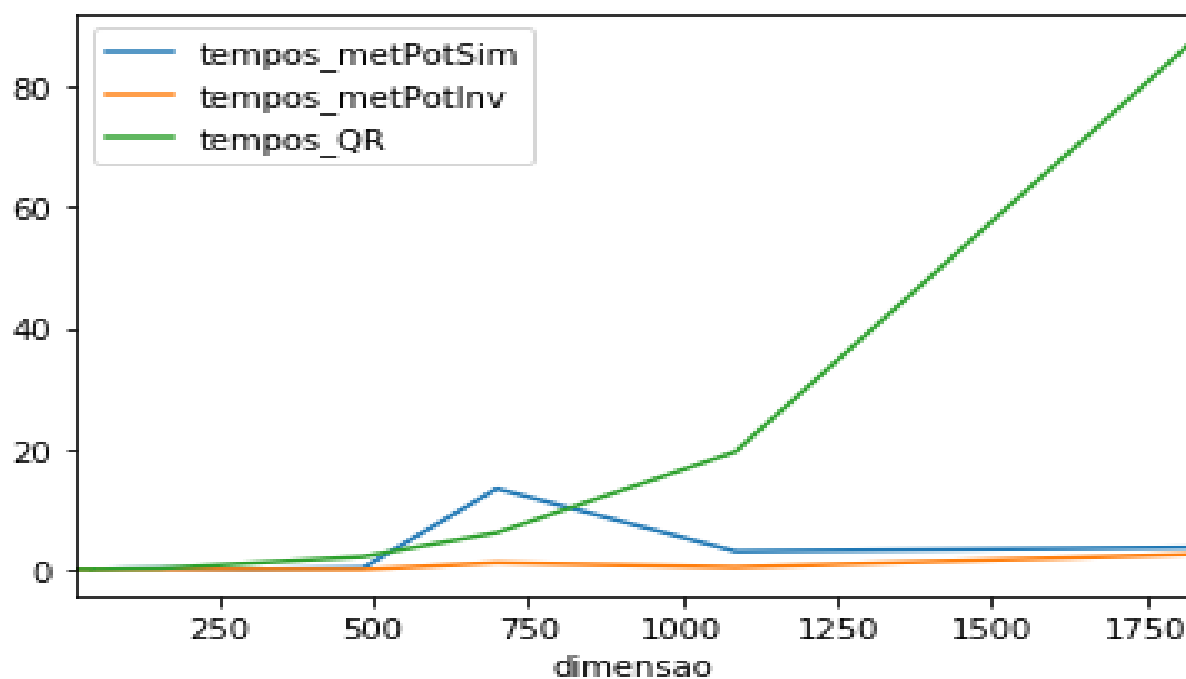
	matrizes	dimensao	tempos_MPS	tempos_MPI	tempos_QR
5	mesh2e1	306	0.038594	0.025919	1.062819
0	bcsstm20	485	0.282801	0.007532	2.131537
7	Trefethen_700	700	13.417531	1.132110	6.101471
1	bcsstk10	1086	3.004631	0.391634	19.543896
9	nasa1824	1824	3.665092	2.521035	87.496205

1) Dimensão da matriz X número de interações nos métodos da potência



Para matrizes com dimensão abaixo de 500, os três métodos obtiveram tempos bem próximos, o que bate com o esperado, tendo em vista o número de iterações que foi necessário para a convergência. Acima dessa dimensão, o método da potência inverso se mostrou mais rápido que os demais, enquanto a decomposição QR aumentou quase linearmente, mostrando-se ser o menos eficiente. O método da potência simétrico teve um pico no tempo gasto para a solução, mas voltou a convergir mais rapidamente para matrizes com dimensão acima de 1000, aproximando-se novamente do tempo do método da potência simétrico.

2) Dimensão da matriz X tempos computacionais gastos por cada método



Resultados encontrados

Como afirmado na teoria, os três métodos aplicados geraram boas aproximações dos auto-valores dominantes nas matrizes selecionadas. Dada a estrutura de cada algoritmo, algumas aproximações foram mais precisas do que outras más, dentre todos os métodos, o método da potência inverso mostrou-se aquele com melhor custo benefício com relação ao tempo computacional gasto.

Para problemas que envolvem soluções de sistemas lineares, como exposto na introdução, ambos os algoritmos seriam eficazes, sendo que não estamos interessados na magnitude e precisão do auto-valor, mas sim se ele está contido no intervalo entre 0 e 1. Para problemas que exigem melhores precisões ou o espectro completo, o algoritmo da decomposição QR seria mais indicado.

Verificação dos dados

Para verificação dos dados expostos acima é possível utilizar o programa T3.py, que possui as funções “*MetodoDaPotenciaNorma2*”, “*MetodoDaPotenciaSimetrico*”, “*DecomposicaoQR*” que aplicam os métodos utilizados neste experimento, e outras funções como: “*AproximacaoAutoValorDominante*” que encontra uma aproximação do auto-valor dominante utilizando o círculo de Gersgorin.

Um jupyter notebook “*analise_T3*”, que pode ser encontrado no mesmo diretório, possui uma sequencia de passos para geração dos dados, tabelas e gráficos expostos acima. Uma planilha do Excel com todas as informações a respeito das matrizes aqui trabalhadas esta salva com o nome “*analise_resultados.xlsx*” no mesmo diretório.