Centro de Investigación en Matemáticas, A.C.
Métodos Numéricos

CIMAT

Examen 1

José Miguel Saavedra Aguilar

Resumen

En este examen se resolvió el sistema lineal $Ax = b$, se obtuvo la inversa de una matriz A y los 10 eigenvalores más pequeños y más grandes de A.

1. Problemas

1.1. Problema 1

Sea $A \in \mathbb{R}^{5000\times 5000}$ pentadiagonal y $b \in \mathbb{R}^{5000}$ dados por:

$$A = \begin{pmatrix} 40 & -8 & -4 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -8 & 40 & -8 & -4 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -4 & -8 & 40 & -8 & -4 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -4 & -8 & 40 & -8 & -4 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -8 & 40 \end{pmatrix} \qquad b = \begin{pmatrix} 20 \\ 50 \\ 100 \\ 100 \\ \vdots \\ 20 \end{pmatrix}$$

Si deseamos resolver $Ax = b$, es conveniente utilizar la factorización de Cholesky $A = LDL^\top$, pues sabemos que L será igualmente pentadiagonal y triangular inferior, y D es diagonal. Si tenemos L, D podemos resolver:

$$\begin{aligned} Ly &= b \\ L^\top x &= D^{-1}y \end{aligned}$$

Una vez que L es triangular superior y pentadiagonal, podemos resolver estos sistemas con pocas operaciones, pues:

$$\begin{aligned} y_1 &= \frac{b_1}{L_{1,1}} \\ y_2 &= \frac{b_2 - L_{2,1}y_1}{L_{2,2}} \\ y_i &= \frac{b_i - L_{i,i-2}y_{i-2} - L_{i,i-1}y_{i-1}}{L_{i,i}}, && i \geq 3 \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
x_m &= \frac{\frac{y_m}{D_{m,m}}}{L_{m,m}} \\
x_{m-1} &= \frac{\frac{y_{m-1}}{D_{m-1,m-1}} - L_{m,m-1}x_m}{L_{m-1,m-1}} \\
x_i &= \frac{\frac{y_i}{D_{i,i}} - L_{i+2,i}y_{i+2} - L_{i+1,i}y_{i+1}}{L_{i,i}}, \qquad\qquad & i \leq m-2
\end{aligned}
$$

1.2. Problema 2

Ahora, para la misma matriz, buscamos calcular A^{-1}. Sea e_i el i-ésimo vector canónico de tamaño 5000 para $i = 1, \ldots, 5000$. Consideramos el sistema

$$Ax_i = e_i$$

para $i = 1, \ldots, 5000$. Nótese que si $B = \big(x_1, x_2, \ldots, x_{5000}\big)$, entonces $AB = I$. Una vez que A es de rango completo, $B = A^{-1}$, de forma que si resolvemos los 5000 sistemas para x_i, tenemos la inversa de A. Estos sistemas los podemos resolver utilizando la factorización de Cholesky como en el ejercicio 1.

1.3. Problema 3

Ahora, nos interesa calcular los 10 eigenvalores más pequeños y los 10 más grandes de la matriz A, así como sus correspondientes eigenvectores.

Una vez que no tenemos información de los eigenvectores de A, excepto que son positivos por A S.P.D, por lo que no podemos utilizar el método del cociente de Rayleigh. Si bien, el método de Jacobi es factible, únicamente requerimos 20 de 5000 eigenvalores, por lo que no es lo más óptimo. Entonces, las opciones son el método de la potencia generalizado y el método de iteración en subespacios.

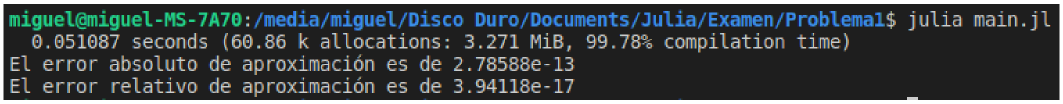
Para iniciar, tomamos el método de la potencia generalizado para los 10 eigenvalores más grandes y a esos eigenvectores obtenidos se les aplica el método de iteración en subespacios para los 10 eigenvalores más grandes. De forma similar, para los más pequeños se toma el método de la potencia inversa generalizado para los 10 eigenvalores más pequeños y a los eigenvectores obtenidos se les aplica el método de iteración en subespacios para los 10 eigenvalores más pequeños.

2. Ejecución

Para la ejecución de los algoritmos, debemos ejecutar

```
julia main.jl
```

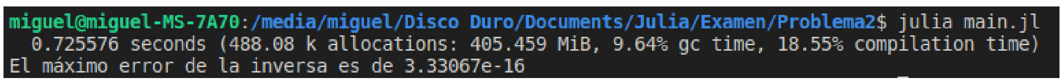
desde la carpeta del problema. Para el problema 1, al ejecutar se crea un archivo `xExamen.txt` solución de $Ax = b$, además se imprime en la pantalla el error absoluto $E_{abs} = \left\|b - \tilde{b}\right\|_2$ y relativo $\frac{E_{abs}}{\|b\|_2}$.



```
miguel@miguel-MS-7A70:/media/miguel/Disco Duro/Documents/Julia/Examen/Problema1$ julia main.jl
  0.051087 seconds (60.86 k allocations: 3.271 MiB, 99.78% compilation time)
El error absoluto de aproximación es de 2.78588e-13
El error relativo de aproximación es de 3.94118e-17
```

Figura 1: Ejecución del problema 1

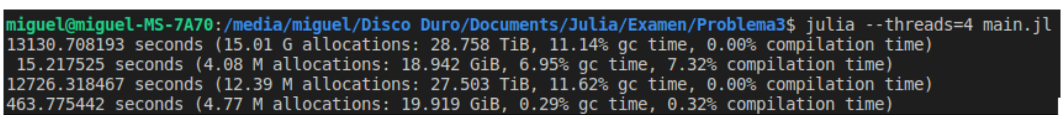
Para el problema 2, al ejecutar se crea un archivo `InversaExamen.txt` resolviendo los 5000 sistemas de ecuaciones $Ax_i = e_i$, además se imprime el máximo error de aproximación $A * \tilde{A^{-1}} - I$.



```
miguel@miguel-MS-7A70:/media/miguel/Disco Duro/Documents/Julia/Examen/Problema2$ julia main.jl
  0.725576 seconds (488.08 k allocations: 405.459 MiB, 9.64% gc time, 18.55% compilation time)
El máximo error de la inversa es de 3.33067e-16
```

Figura 2: Ejecución del problema 2

El problema 3 se ejecutó en dos partes, primero se ejecutaron los algoritmos de potencia, potencia inversa e iteración en subespacios, y se guardaron los resultados en archivos `PhiPotencia.txt`, `lambdaPotencia.txt`, `PhiIteracion.txt`, `lambdaIteracion.txt`, `PhiInversa.txt`, `lambdaInversa.txt`, `PhiIteracionInversa.txt` y `lambdaIteracionInversa.txt`.



```
miguel@miguel-MS-7A70:/media/miguel/Disco Duro/Documents/Julia/Examen/Problema3$ julia --threads=4 main.jl
13130.708193 seconds (15.01 G allocations: 28.758 TiB, 11.14% gc time, 0.00% compilation time)
 15.217525 seconds (4.08 M allocations: 18.942 GiB, 6.95% gc time, 7.32% compilation time)
12726.318467 seconds (12.39 M allocations: 27.503 TiB, 11.62% gc time, 0.00% compilation time)
463.775442 seconds (4.77 M allocations: 19.919 GiB, 0.29% gc time, 0.32% compilation time)
```

Figura 3: Ejecución del problema 3

Después, tenemos un archivo `mainAuxiliar.jl` que calcula el error $\|Av_i - \lambda_i v_i\|_2$ para $i = 1, \ldots, 10$ de cada uno de los algoritmos utilizados.

3. Resultados

Los resultados para el problema 1 se presentan en la tabla 1. Nótese que $E_{rel} < \epsilon$ donde ϵ es el épsilon de máquina, por lo que la solución es buena.

E_{abs}	E_{rel}	tiempo(s)
2.78588×10^{-13}	3.94118×10^{-17}	0.051087

Tabla 1: Resultados del problema 1

Los resultados para el problema 2 se presentan en la tabla 2. Nótese que $\left|\left(A\tilde{A^{-1}}\right)_{i,j}\right| <$ 3.33067×10^{-16} para toda i, j, y en promedio $\left|\left(A\tilde{A^{-1}}\right)_{i,j}\right| \approx 3.64358 \times 10^{-20}$, por lo que la aproximación de la inversa es buena.

$E_{\text{máx}}$	E_{avg}	tiempo(s)
3.33067×10^{-16}	3.64358×10^{-20}	0.725576

Tabla 2: Resultados del problema 2

Para el problema 3, se presentan los resultados por algoritmo, el método de la potencia generalizado y el método de iteración en subespacios para los eigenvalores más grandes en 3, el método de la potencia inversa generalizado y el método de iteración en subespacios para los eigenvalores más pequeños en 4.

i	λ_i	$\|Av_i - \lambda_i v_i\|$
5000	51.999934	2.94942E-03
4999	51.999933	9.92845E-04
4998	51.999931	5.91033E-03
4997	51.999892	8.41805E-03
4996	51.999887	8.84875E-03
4995	51.999882	3.92068E-03
4994	51.999876	5.10040E-03
4993	51.999864	1.32404E-03
4992	51.999863	9.20235E-03
4991	51.999855	2.42489E-03

i	λ_i	$\|Av_i - \lambda_i v_i\|$
5000	51.999758	2.38405E-03
4999	51.999806	1.22742E-04
4998	51.999857	4.34916E-03
4997	51.999863	2.91184E-03
4996	51.999884	1.11573E-02
4995	51.999899	8.65938E-03
4994	51.999941	3.57835E-03
4993	51.999959	4.75671E-03
4992	51.999966	4.98377E-03
4991	51.999983	5.87287E-03

Tabla 3: Resultados para el método de la potencia y de iteración en subespacios para los 10 eigenvalores más grandes

i	λ_i	$\|Av_i - \lambda_i v_i\|$
1	16.00002	6.59653E-03
2	16.000082	1.01009E-02
3	16.000099	6.76691E-03
4	16.000126	1.38411E-02
5	16.000201	1.85685E-03
6	16.000335	2.38522E-02
7	16.000474	1.48903E-02
8	16.000628	2.53785E-02
9	16.000757	2.26497E-02
10	16.000923	4.56270E-02

i	λ_i	$\|Av_i - \lambda_i v_i\|$
1	16.000009	2.87708E-03
2	16.000038	7.38647E-03
3	16.000085	8.63167E-03
4	16.000152	1.47733E-02
5	16.000237	1.43826E-02
6	16.000341	2.21529E-02
7	16.000464	2.01571E-02
8	16.000606	2.92423E-02
9	16.000767	2.54010E-02
10	16.000947	3.81581E-02

Tabla 4: Resultados para el método de la potencia inversa y de iteración en subespacios para los 10 eigenvalores más pequeños

La tolerancia en todos los métodos fue de 10^{-8}, el punto inicial para los métodos de potencia y potencia inversa es aleatorio pero ortogonalizado por QR, el método de potencia tiene como máximo 200000 iteraciones, el de potencia inversa 170000 iteraciones máximas, mientras que los dos de iteración en subespacios 10000 iteraciones, con punto inicial los obtenidos por el método de la potencia.

4. Conclusiones

Para los primeros dos problemas utilizar la factorización de Cholesky nos da un muy buen resultado, pues tenemos un algoritmo para obtener la factorización de matrices bandadas, por ejemplo, una matriz pentadiagonal con pocas operaciones, y posteriormente resolver los sistemas $Ly = b$ y $L^\top x = D^{-1}y$ igualmente en pocas operaciones pues L conserva la estructura.

En el caso del problema 3, hay complicaciones pues tenemos 5000 eigenvalores concentrados en $[16, 52]$, con los primeros 10 eigenvalores concentrados en $[16, 16.001]$, y los últimos 10 en $[51.9998, 52]$, lo que explica que los resultados no sean tan precisos como esperamos, pues necesitan muchas iteraciones para converger a los eigenvalores exactos.