Practicum deel: numerieke lineaire algebra

6 mei 2018

Eigenwaardenproblemen

In dit practicum onderzoeken we de methoden voor het bepalen van eigenwaarden van volle matrices. In heel wat toepassingen maakt men gebruik van de eigenwaarden en eigenvectoren van een volle matrix. Bijvoorbeeld, wanneer men in de statistiek de covariantiematrix van een grote dataset berekent, kunnen de eigenwaarden en eigenvectoren gebruikt worden om de dataset te reduceren zonder belangrijke statistische informatie te verliezen. In het eerste gedeelte van het practicum beschouwen we enkele theoretische eigenschappen van de methoden. In het tweede gedeelte worden de convergentie-eigenschappen van de methoden onderzocht aan de hand van Matlab-experimenten.

1 Theoretische vragen

Opgave 1. Bij gelijktijdige iteraties wordt het volgende uitgevoerd:

$$\begin{aligned} W^{(k)} &= AQ^{(k-1)} &(1)\\ Q^{(k)}R^{(k)} &= W^{(k)} &(2)\\ \Lambda^{(k)} &= {Q^{(k)}}^T AQ^{(k)} &(3) \end{aligned}$$

voor een initiële matrix $Q^{(0)} \in \mathbb{R}^{n\times p}$ met $Q^{(0)T}Q^{(0)} = I_p$. Stel dat $\{u_k\}_{k=1}^n$ de eigenvectoren van A noteert met $\|u_k\|_2 = 1$. Schrijf:

$$Q^{(0)} = \left[\begin{array}{ccc|ccc} u_1 & \cdots & u_p & u_{p+1} & \cdots & u_n \end{array}\right] \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix}$$

Onder de aanname dat $C_1 \in \mathbb{R}^{p\times p}$ niet singulier is, geldt:

$$\mathrm{Im}(Q^{(k)}) = \mathrm{Im}(A^kQ^{(0)}).$$

Bewijs dit feit. Je mag hierbij aannemen dat A reëel en symmetrisch is.

Opgave 2. Bij elke cyclus van gelijktijdige iteraties wordt een QR-decompositie berekent van $W^{(k)}$. We hadden er ook voor kunnen kiezen om dat niet te doen. In andere woorden, we bereken dan simpelweg:

$$W^{(k)} = A^kQ^{(0)}, \qquad \tilde{Q}^{(k)}\tilde{R}^{(k)} = W^{(k)}$$

Wat zijn de numerieke consequenties? Bespreek de numeriek gevolgen.

Opgave 3. Beschouw de QR algoritme:

$$A^{(k)} = R^{(k)}Q^{(k)}, \qquad A^{(k-1)} = Q^{(k)}R^{(k)}$$

Toon aan dat als $A^{(k-1)}$ symmetrisch en tridiagonaal is, dat dan ook $A^{(k)}$ symmetrisch en tridiagonaal is. Wat is de rekenkost van één iteratie in de QR algoritme voor symmetrische, tridiagonale matrices? Leg uit wat de impact is van de Hessenberg-reductie stap voor de QR algoritme.

2 Convergentie-experimenten

Op Toledo vind je een aantal MATLAB-programma's die je kan gebruiken voor de rest van het practicum. Plaats de bestanden in een directory en gebruik in MATLAB het commando `cd` om naar deze directory te gaan. Lees grondig de documentatie bij de MATLAB-programma's. Typ `help pract` voor meer informatie.

Je kan experimenten uitvoeren door commando's in te geven aan de MATLAB invoerregel, maar het is aangewezen om zelf m-files (scripts en functies) te schrijven. Op die manier kan je gemakkelijk wijzigingen aanbrengen en vermijd je het herhaald intypen van gelijkaardige bevelen. Met het commando `help` kan je wat meer te weten komen over een bepaald programma. Je mag gerust de code van de programma's aanpassen. Je kan figuren afdrukken met het commando `print` of door in het menu File van een venster met een grafiek de optie Print te selecteren.

Enkele nuttige commando's zijn: `help`, `lookfor`, `figure`, `subplot`, `plot`, `semilogy`, `semilogx`, `loglog`, `xlabel`, `ylabel`, `title`, `legend`, `print`, `save`, `load`. Voor nog meer nuttige commando's zie ook de MATLAB inleiding op Toledo.

In het tweede deel van het practicum beschouwen we een gegeven volle, symmetrische matrix. Een voorbeeld is te vinden in het bestand `matrix.txt`. Deze matrix kan in MATLAB ingeladen worden met behulp van het commando `load`.

Opgave 4. Beschouw de matrix `matrix.txt`. Reduceer deze matrix naar Hessenberg vorm en toon de structuur met behulp van `spy`. Klopt de structuur met wat je zou verwachten?

Opgave 5. In deze opgave bekijken we

- de QR-methode zonder shift,
- de QR-methode met Rayleigh quotiënt shift, en
- de QR-methode met Wilkinson shift.

Pas deze methoden toe om alle eigenwaarden van de matrix `matrix.txt` te berekenen. Illustreer grafisch en in tabelvorm de convergentie. Is de convergentie lineair, kwadratisch of kubisch? Komen de numerieke resultaten overeen met de theorie? Bespreek.

Naast de besproken methoden in lecture 27 t.e.m. lecture 29 van het boek "Numerical Linear Algebra" (L. Trefethen en D. Bau, 1997) bestaan er nog andere belangrijke methoden voor het oplossen van eigenwaardenproblemen. Enkele voorbeelden zijn Jacobi, bisectie, verdeel- en heers en Arnoldi/Lanczos. In dit practicum bekijken we de Jacobi-methode in meer detail.

De Jacobi-methode steunt op de diagonalisatie van 2×2 symmetrische matrices met behulp van een orthogonale matrix J,

$$J^T \begin{bmatrix} a & d \\ d & b \end{bmatrix} J = \begin{bmatrix} \neq 0 & 0 \\ 0 & \neq 0 \end{bmatrix}, \tag{4}$$

waarbij de orthogonale matrix J gedefinieerd wordt als een rotatie-matrix of een reflectie-matrix. Hier beschouwen we enkel rotatie

$$J = \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix}. \tag{5}$$

Een implementatie van deze methode is gegeven in `jacobi.m`.

Opgave 6. Pas de Jacobi-methode toe om alle eigenwaarden en eigenvectoren van `matrix.txt` te berekenen. Bekijk de convergentiesnelheid. Komt de experimentele convergentiesnelheid overeen met de theorie? Wat is de rekenkost van de methode voor een willekeurige symmetrische tridiagonale matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$?

Praktische richtlijnen

- Dit practicum wordt gemaakt in groepjes van twee. Maximaal één groep van drie personen is toegestaan in het oneven geval.
- Het verslag stuur je ten laatste op 1 juni 2020 om 23u59 door naar `nithin.govindarajan@kuleuven.be`.
- Gebruik figuren en tabellen om je bevindingen te verduidelijken. Gebruik logaritmische grafieken waar nodig. Kies de schaal van je figuren oordeelkundig, vooral als twee verschillende figuren vergeleken moeten worden.
- In het experimentele gedeelte, bespreek bondig je resultaten en je aanpak in een duidelijke vergezellende tekst.
- Voeg ook je MATLAB-codes toe als bijlage aan je verslag.

Veel succes!