Wydział: Fizyki i Informatyki Stosowanej
Kierunek: Informatyka Stosowana
Rok: 2020/21
Semsetr: letni
Typ: stacjonarne
Nr albumu: 401984
Data: 29.03.2021

Sprawozdanie - Laboratorium nr 5
Obliczanie wektorów i wartości własnych za pomocą rozkładu QR metodą Hauseholdera

Spis treści

opracował:
Tomasz Szkaradek

1 Wstęp teoretyczny

1.1 Wektor, wartość oraz problem własny

N iech A będzie kwadratową macierzą $n \times n$. Wówczas A wyznacza przekształcenie liniowe przestrzeni $\mathbb{R}$ w siebie. Niech $v \in R_n$ będzie pewnym niezerowym wektorem oraz niech $L = t \cdot v : t \in \mathbb{R}$ będzie prostą wyznaczoną przez ten wektor. Jeżeli przekształcenie A przekształca prostą L w siebie, to mówimy, że v jest wektorem własnym przekształcenia A. Oznacza to że problem własny macierzy możemy zapisać w postaci równania liniowego

$$A \cdot v = \lambda \cdot v \tag{1}$$

dla pewnej liczby rzeczywistej λ zwanej wartością własną związaną z wektorem własnym v. Obliczenie tego równania jest zwykle skomplikowane. Dzięki własnościom i wektorom własnym możemy np. dokonać diagonalizacji, która z kolei może być przydatna do rozwiązywania układów równań różniczkowych. Często przy tworzeniu modeli matematycznych wykorzystywanych do symulacji zjawisk fizycznych czy zachowania się układu, zachodzi potrzeba rozwiązania problemu własnego

1.2 Metoda Hauseholdera

Metoda Householdera umożliwia znaleźć rozkład QR dowolnej macierzy prostokątnej $m \times n$. Pozwala na zredukowanie symetrycznej macierzy A do tridiagonalnej formy w n-2 ortogonalnych przekształceniach Wówczas transformacją Householdera nazywamy macierz postaci:

$$H = I - Wvv^T, \text{ gdzie } W = \frac{2}{v^T v} \tag{2}$$

Macierz H jest macierzą symetryczną i ortogonalną (transformacja nie zmienia długości wektora) oraz ma taką własność, że dowolny wektor x wymiaru m jest odbiciem lustrzanym wektora Hx względem hiperpłaszczyzny (wymiaru m-1) prostopadłej do wektora v.Wektor v jest rzeczywistym wektorem spełniającym warunek $\|v\| = 1$ a macierz H jest również ortogonalna ponieważ $H^2 = 1$ a wiec:

$$H = I - \frac{2}{vv^T} vv^T \tag{3}$$

gdzie v jet wektorem powstałym według wzoru:

$$v = x \pm \|x\| e_i, \tag{4}$$

x jest wektorem powstałym na początku z pierwszej kolumny macierzy A
e_1 jest wektorem jednostkowym $[1, 0, ..., 0]^T$

1.3 Rozkład QR oraz szukanie wartości i wektorów własnych

1.3.1 Rozkład QR

Rozkład QR to rozkład macierzy do postaci iloczynu macierzy Q i R, gdzie Q jest macierzą ortogonalną, a R jest macierzą trójkątną górną. Transformacja Householdera może zostać wykorzystana w celu przeprowadzenia rozkładu QR macierzy A. Metoda polega na iteracyjnym szukaniu transformacji Householdera dla kolejnych wektorów pod diagonalą macierzy A. Zdefiniujemy macierz Householdera:

$$H = I - \frac{2}{vv^T} vv^T \tag{5}$$

$$v = z - \alpha \|z\|_2 e_1 \tag{6}$$

gdzie:
$z = [z_1, z_2, ..., z_n]^T$,
$\alpha = \pm 1 = -sign(z_1)$,
e_i wektor jednostkowy z jedynka na i tym miejscu
Gdy już wiemy jak otrzymać macierz Householdera w kolejnych iteracji możemy przejść do omówienia algorytmu który posłuży nam do wyznaczania macierzy Q i R.
Zaczynając iterować warto skopiować macierz A do macierzy R
W i-tej iteracji obliczamy wektor v korzystając ze wzoru numer (6)
gdzie wektor z to i-ta kolumna macierzy R z zerami od 1 do i
następnie obliczamy macierz H_i według wzoru (5) a na sam koniec obliczamy nasza macierz R w danej iteracji:

$$R_i = H_i \cdot A$$

po n (rozmiar macierzy) iteracjach nasza macierz R powinna nabrać kształtu macierzy górnotrójkątnej. Natomiast nasza macierz Q to iloczynu kolejnych macierzy H czyli:

$$Q = H_1 \cdot H_2 \cdot \dots \cdot H_n$$

1.3.2 Wartości i wektory własne

Korzystając z rozkładu QR macierzy A możemy wyznaczyć jej wartości i wektory własne. W następującej metodzie aby obliczyć wektory i własności własne musimy przeprowadzić iter iteracji im więcej wykonamy tym dokładniejsze wyniki otrzymamy
W pierwszej iteracji dokonujemy rozkładu macierzy A na macierz Q oraz macierz R jako:
$A_1 = Q_1 \cdot R_1$
Następnie obliczamy macierz A_2 jako
$A_2 = R_1 \cdot Q_1$
W każdej kolejnej iteracji k
Rozkładamy macierz A_k na macierz Q oraz macierz R jako $A_k = Q_k \cdot R_k$
a następnie obliczamy macierz A_{k+1} jako
$A_{k+1} = R_k \cdot Q_k$

Po przeprowadzeniu iter iteracji możemy obliczyć macierz wynikowa P jako
$P = P_k = Q_1 \cdot Q_2 \cdot Q_3 \cdots Q_{iter}$
natomiast $P^{-1} = P_k^{-1} = Q_1^{-1} \cdot Q_2^{-1} \cdot Q_3^{-1} \cdots Q_{iter}^{-1}$
Wówczas prawdziwe jest równanie:

$$P^{-1} \cdot A \cdot P = A_{k+1} = H \tag{7}$$

gdzie: macierz H jest macierzą górną-trójkątną z wartościami własnymi na diagonali.

$$\lambda_i = h_{ii}$$

Wektor własny y_k macierzy H odpowiadający wartości własnej λ_k wyznaczamy stosując wzory:

$$\begin{cases} x_j^i = 0 & \text{gdy } j = n, n-1, \cdots, i+1 \\ x_j^i = 1 & \text{gdy } j = i \\ x_j^i = -\dfrac{\sum_{k=j+1}^{i} h_{jk} x_k^{(i)}}{h_{jj} - h_{ii}} & \text{gdy } j = i-1, i-2, \cdots, 1 \end{cases} \tag{8}$$

Dysponując wektorami x_k możemy wyznaczyć wektory własne y_k wyjściowego problemu

$$\begin{gathered} H = P^{-1}AP \\ Hx = \lambda x \\ P^{-1}APx = Hx = \lambda x \\ A(Px) = \lambda Px \\ y = Px \\ Ay = \lambda y \end{gathered}$$

Algorytm ten można zmodyfikować do postaci QL, gdzie L to macierz trójkątna dolna

2 Zadanie do wykonania

Podczas 5 laboratoriów byliśmy zobligowani do poszukiwania rozwiązanie równania Schrodingera czyli typowym problemu własnym w fizyce będącego równaniem własnym operatora energii:

$$-\frac{h}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \tag{9}$$

gdzie V(r)— jest energią potencjalną, ψ(r)— funkcją falową zaś E - energią odpowiadającą funkcji ψ(r). Spróbujmy znaleźć poziomy energii i odpowiadające im funkcje falowe dla cząstki o masie m umieszczonej w potencjale jednowymiarowego oscylatora harmonicznego V(x)=$\frac{kx^2}{2}$. Jeśli za jednostkę energii przyjmiemy hω (gdzie ω^2=k/m) a jednostkę długości $\sqrt{h/m\omega}$ to równanie (3) przyjmie postać:

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)\frac{1}{2}x^2\psi(x) = E\psi(x) \tag{10}$$

Zastępując drugą pochodną po lewej stronie równania ilorazem różnicowym:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}(x = x_i) \approx \frac{\psi(x_{i+1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i-1})}{(\Delta x)^2} \tag{11}$$

możemy ustawić równanie iteracyjne na $\psi_i = \psi(x_i)$

$$-\frac{1}{2}\frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{2}x_i^2\psi_i = E \tag{12}$$

żądając zerowania się funkcji falowej ψ(x) w nieskończonościach $\psi(x = L \longrightarrow -\inf) = \psi_0 = 0$ i $\psi(x = +L \longrightarrow +\inf) = \psi_N = 0$ równanie (6) można przedstawić w postaci macierzowej jako:

$$\begin{bmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h_{2,1} & h_{2,2} & h_{2,3} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_{3,2} & h_{3,3} & h_{3,4} & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & \vdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & h_{N-3,N-4} & h_{N-3,N-3} & h_{N-3,N-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & h_{N-2,N-3} & h_{N-2,N-2} & h_{N-2,1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & h_{N-1,N-2} & h_{N-1,N-1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-3} \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-3} \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \end{bmatrix}$$

gdzie $h_{i,i-1} = h_{i-1,1}, i = -1/[2(\triangle\ x)2]$ dla i= 2,...,N-1, $h_{i,i} = (\triangle\ x)^{-2} + x_i^2/2$, $\quad x_i = -L + i\ \triangle$ x dla i= 1,...,N-1 oraz $\triangle\ x = 2L/N$

3 Wyniki

Cały program został napisany w języku Python obliczenia zostały prowadzone na liczbach zmiennoprzecinkowych. Posługując się funkcjami do rozkładu macierzy na Q i R obliczeniem wartości własnych oraz wektorów własnych napisanymi według zasad opisanych powyżej obliczamy kolejne wartości i wektory własne macierzy wejściowej A

$$\lambda_1=0.50$$
$$\lambda_2=1.49$$
$$\lambda_3=2.48$$
$$\lambda_4=3.48$$
$$\lambda_5=4.51$$
$$\vdots$$

W tym zadaniu obliczaliśmy wartości i wektory własne od tyłu to jest λ_1 to 50 wartość własna itd. Czasy wykonywania algorytmu zależne od ustalonej ilości iteracji

- iter=20

  Czas wykonania dla λ_1 równy 0.28 [s]
  Czas wykonania dla λ_2 równy 0.23 [s]
  Czas wykonania dla λ_3 równy 0.23 [s]
  Czas wykonania dla λ_4 równy 0.26 [s]
  Czas wykonania dla λ_5 równy 0.23 [s]

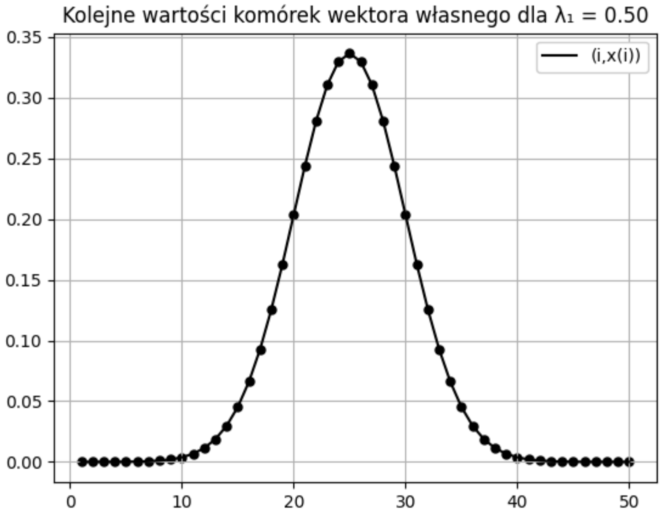
- iter=100

  Czas wykonania dla λ_1 równy 1.32 [s]
  Czas wykonania dla λ_2 równy 1.18 [s]
  Czas wykonania dla λ_3 równy 1.23 [s]
  Czas wykonania dla λ_4 równy 1.23 [s]
  Czas wykonania dla λ_5 równy 1.21 [s]

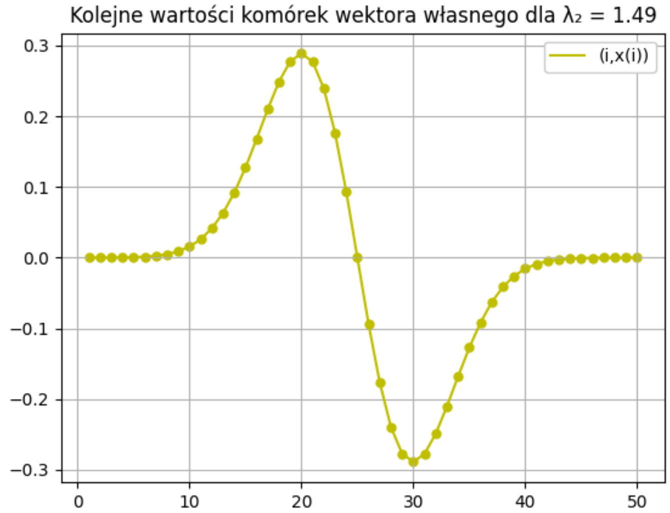
- iter=200

  Czas wykonania dla λ_1 równy 2.78 [s]
  Czas wykonania dla λ_2 równy 2.85 [s]
  Czas wykonania dla λ_3 równy 2.79 [s]
  Czas wykonania dla λ_4 równy 2.93 [s]
  Czas wykonania dla λ_5 równy 3.21 [s]

A następnie na ich podstawie wyliczyliśmy wektory własne które nanieśliśmy na wykresy narysowane również w Pythonie za pomocą biblioteki matplotlib. Wyniki programu (dla iter=50) możemy zaobserwować na wykresach poniżej:

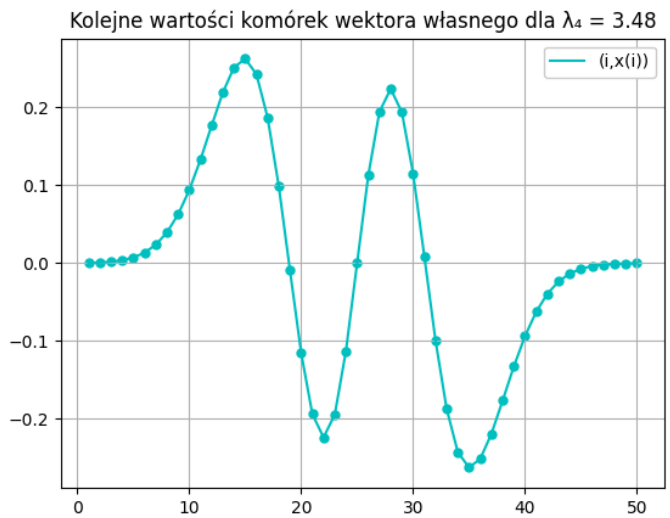


(a) λ_1=0.5



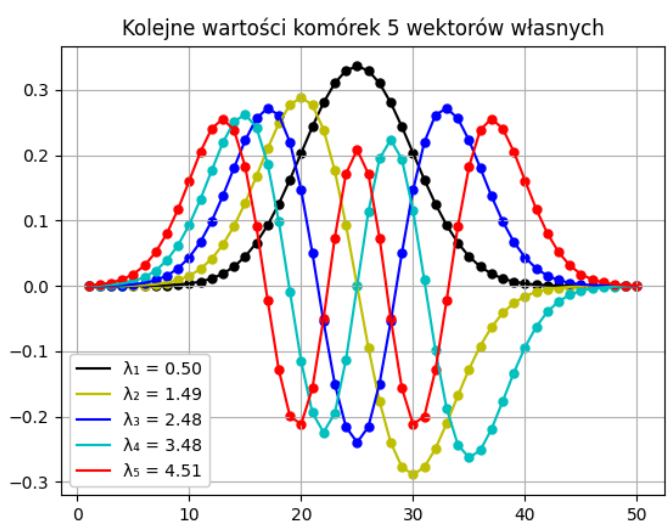
(b) λ_2=1.49

(c) λ_3=2.48



(d) λ_4=3.48

(e) λ_1=4.51



4 Podsumowanie

Znalezienie wartości własnych i wektorów własnych dla macierzy, nawet stosunkowo małej i symetrycznej, jest niezwykle skomplikowane. Złożoność obliczeniowa wyznaczania rozkładu QR macierzy n×n jest równa

$$M = \frac{2}{3}n^3 + O(n^2)$$

jest zatem w przybliżeniu dwukrotnie większa niż np. metoda eliminacja Gaussa. Decydujący wpływ na czas obliczeń ma efektywność wykorzystania pamięci podręcznej (cache'a) procesora przez implementację algorytmu, dlatego nie można powiedzieć z góry, że eliminacja Gaussa działa dwukrotnie szybciej.
Dzięki rozkładowi QR i metodzie Hauseholdera możemy stosunkowo szybko znaleźć wektory i wartości własne. Czas jak widać po wynikach jest zależny od liczby iteracji który dla małej liczby nie jest wielki.

5 Literatura

[1] Tomasz Chwiej, Wyznaczanie wartości i wektorów własnych macierzy
$http://home.agh.edu.pl/\ chwiej/mn/diagonalizacja\_2018.pdf$

[2] Wikipedia, Rozkład QR
$https://pl.wikipedia.org/wiki/Rozk\%C5\%82ad_QR$

[3] Krzysztof Malarz, Wektory i wartości własne
$https://www.cce.pk.edu.pl/\ michal/pdfy/Metody13.pdf$