Numerieke Modellering en Benadering: Practicum 2

15 april 2020

Eigenwaardenproblemen en iteratieve methoden

In dit practicum onderzoeken we enkele methoden voor het bepalen van eigenwaarden van matrices en voor het oplossen van stelsels. De nadruk ligt hier sterk op theoretische eigenschappen maar er wordt ook gekeken naar de praktische implicaties.

Gelijktijdige iteratie

Opgave 1. Gelijktijdige iteratie of 'simultaneous iteration' past de methode van de machten toe op p kolommen tegelijk. Op die manier kunnen de p grootste eigenwaarden en bijhorende eigenvectoren bepaald worden. Schrijf een variant van het algoritme uit om de p eigenwaarden en bijhorende eigenvectoren van een symmetrische niet-singuliere matrix A te bepalen die het dichtst liggen bij een waarde μ. Je mag veronderstellen dat μ niet samenvalt met een eigenwaarde van A.

a) Schrijf het algoritme in pseudo-code uit, en geef ook een verklaring waarom het gewenste resultaat met dit algoritme bekomen wordt.

b) Beschrijf een theoretisch geval waarin deze methode niet convergeert naar de gewenste eigenwaarden. Bespreek hoe waarschijnlijk dit geval in de praktijk is en waarom dit niet altijd een probleem vormt. (*Tip: denk aan de eindige precisie van de computer.*)

Inverse iteratie en Rayleigh quotiënt iteratie

Opgave 2. Beschouw de Rayleigh quotiënt iteratie.

a) Naarmate de benaderende eigenwaarde $\lambda^{(k-1)}$ dichter in de buurt komt van de exacte eigenwaarde, wordt dit stelsel meer en meer singulier. Geef een beknopte (intuïtieve) verklaring waarom het in dit geval geen numerieke problemen geeft een (bijna) singulier stelsel op te lossen.

b) Gegeven een matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ en een vector $x \in \mathbb{R}^{n\times 1}$, met x een benadering voor een eigenvector van A. Toon aan dat de oplossing $\rho \in \mathbb{R}$ van het minimalisatieprobleem

$$\min_{\rho\in\mathbb{R}} ||Ax - \rho x||_2$$

overeenkomt met het Rayleigh quotiënt van x.

Opgave 3. Inverse iteratie en Rayleigh quotiënt iteratie zijn nauw verwant. Door de kubische convergentie heeft de laatste methode vaak de voorkeur. Toch zijn er situaties waarbij de voorkeur uitgaat naar inverse iteratie [1]. Bespreek voor onderstaande voorbeelden waarom inverse iteratie de voorkeur geniet over Rayleigh quotiënt iteratie.

a) De matrix A is (zeer) groot.

b) De spectrale eigenschappen van A zijn nauwelijks gekend. Het doel is om het eigenpaar te vinden dat het dichtst ligt bij $\mu \in \mathbb{R}$, maar een goede startwaarde voor de eigenvector is niet beschikbaar.

Jacobi

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

$$J^T \begin{bmatrix} a & d \\ d & b \end{bmatrix} J = \begin{bmatrix} \neq 0 & 0 \\ 0 & \neq 0 \end{bmatrix}, \tag{1}$$

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

$$J = \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix}. \tag{2}$$

Opgave 4. Bepaal de coëfficiënten c en s van de matrix J in (2) zodat (1) geldt. Geef ook je afleiding.

Opgave 5. Schrijf een algoritme uit in pseudo-code om met de Jacobi-methode de eigenwaardenontbinding VDV^T van een symmetrische matrix A te berekenen, waarbij D een diagonaalmatrix is die de eigenwaarden bevat, en V een orthogonale matrix met de overeenkomstige eigenvectoren. Maak gebruik van de rij per rij *sweep* methode zoals beschreven in het handboek. Voer deze iteratie uit totdat

$$\|R_A\|_F \leq \texttt{tol},$$

met R_A het strikt bovendriehoeksgedeelte van A en `tol` een opgegeven tolerantie. Implementeer dit algoritme vervolgens als een functie in MATLAB: `function [V,D]= jacobi(A,tol)`.

Opgave 6. Pas je implementatie van de Jacobi-methode toe om alle eigenwaarden en eigenvectoren van `mat1.txt` te berekenen. Bekijk de convergentiesnelheid. Komt de experimentele convergentiesnelheid overeen met de theorie?

Toegevoegde gradiënten (conjugate gradients)

Opgave 7. Stel dat de methode van de toegevoegde gradiënten toegepast wordt op een matrix A, met resultaten $\|e_0\|_A = 1$ en $\|e_{10}\|_A = 2^{-9}$. Welke grens kan je op basis van deze informatie geven

a) voor het conditiegetal $\kappa(A)$, en

b) voor $\|e_{20}\|_A$?

[1] `https://en.wikipedia.org/wiki/There_ain%27t_no_such_thing_as_a_free_lunch`

Praktische richtlijnen

- Dit practicum wordt **individueel** gemaakt. De deadline is op **20 mei 2020** om 18:00 uur.
- Ten laatste op **20 mei 2020** om 18:00 uur stuur je je verslag (in PDF) samen met de gevraagde Matlab code (opgave 4) in **via Toledo**. Voeg daarvoor de bestanden samen in één zip-bestand met je voledige naam in de bestandsnaam, bv. `practicumAchternaamVoornaam.zip`.
- Zorg ervoor dat je code aan de opgegeven naamgeving voldoet en vergeet niet om alle mogelijke hulpfuncties die je zelf geschreven hebt toe te voegen zodat de code getest kan worden.
- Vermeld aan het begin van je verslag je volledige naam en studentennummer.
- Gebruik doordachte figuren en tabellen om je bevindingen te verduidelijken. Gebruik logaritmische grafieken waar nodig.
- Bespreek bondig je resultaten en je aanpak in een duidelijke vergezellende tekst. Er geldt een **paginalimiet van 7 pagina's**.

Veel succes!

Rob Claes
`rob.claes@cs.kuleuven.be`
Charlotte Vermeylen
`charlotte.vermeylen@cs.kuleuven.be`
`http://toledo.kuleuven.be`