SPRAWOZDANIE - LABORATORIUM NR 5

Metoda potęgowa z ortogonalizacją Gramma-Schmidta

Damian Płóciennik

27 marca 2019

1 Wstęp teoretyczny

1.1 Metoda potęgowa

Załóżmy że istnieje n liniowo niezależnych wektorów własnych macierzy \mathbf{A} , które stanowią bazę przestrzeni liniowej:

$$\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3, \dots \vec{x_n}. \tag{1}$$

Wówczas dla dowolnego wektora $\vec{v_0}$:

$$\vec{v}_0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i x_i. \tag{2}$$

Jeśli λ_i stanowią wartości własne macierzy, zachodzi: **A**:

$$\mathbf{A}\vec{v}_0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i \vec{x}_i$$

$$\vec{v} = \mathbf{A}^m \vec{v}_0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^m \vec{x}_i.$$
(3)

Załóżmy, że wartości własne tworzą ciąg:

$$|\lambda_1| \geqslant |\lambda_2| \geqslant |\lambda_3| \geqslant \dots \geqslant |\lambda_n|. \tag{4}$$

Jeśli λ_1 jest dominującą wartością własną oraz wektor $\vec{v_0}$ ma składową w kierunku $\vec{x_1}$ to wówczas zachodzi:

$$\lim_{m \to \infty} \frac{\mathbf{A}^m \vec{v_0}}{\lambda_1^m} = \alpha_1 \vec{x_1},\tag{5}$$

z czego wynika, że wartość własną można obliczyć następująco:

$$\lambda_1 = \lim_{m \to \infty} \frac{\vec{y}^{\mathrm{T}} \vec{v}_{m+1}}{\vec{y}^{\mathrm{T}} \vec{v}_m} \tag{6}$$

dla dowolnego wektora \vec{y} nieortogonalnego do $\vec{x_1}$.

1.2 Ortogonalizacja Gramma-Schmidta

W związku z błędami zaokrągleń wektory rozpinające podprzestrzeń Kryłowa przestają być z czasem ortogonalne (wraz ze wzrostem wymiaru podprzestrzeni). Koniecznością staje się przeprowadzenie ortogonalizacji nowego wektora bazy.

Ortogonalizacją Grama-Schmidta nazywamy przekształcenie układu liniowo niezależnych wektorów w układ wektorów ortogonalnych. Przestrzenie liniowe rozpinane przez układy przed i po ortogonalizacji są tożsame, tak więc proces ten może służyć do ortogonalizowania bazy.

Operator rzutowania ortogonalnego wektora \vec{v} na wektor \vec{u} definiujemy jako:

$$\operatorname{proj}_{\vec{u}}\vec{v} = \frac{\langle \vec{v}, \vec{u} \rangle}{\langle \vec{u}, \vec{u} \rangle} \vec{u}. \tag{7}$$

Wówczas dla układu k wektorów $\{\vec{v_1},\ldots,\vec{v_k}\}$ proces ortogonalizacji przebiega następująco:

$$\vec{u}_{1} = \vec{v}_{1}$$

$$\vec{u}_{2} = \vec{v}_{2} - \operatorname{proj}_{\vec{u}_{1}} \vec{v}_{2}$$

$$\vec{u}_{3} = \vec{v}_{3} - \operatorname{proj}_{\vec{u}_{1}} \vec{v}_{3} - \operatorname{proj}_{\vec{u}_{2}} \vec{v}_{3}$$

$$\vdots$$

$$\vec{u}_{k} = \vec{v}_{k} - \sum_{i=1}^{k-1} \operatorname{proj}_{\vec{u}_{j}} \vec{v}_{k}$$
(8)

Otrzymany zbiór wektorów $\{\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_k\}$ jest zbiorem wektorów ortogonalnych. Aby zbudować w ten sposób zbiór ortonormalny, każdy wektor należy podzielić przez jego normę:

$$\vec{e}_n = \frac{\vec{u}_n}{||\vec{u}_n||}, \quad n = 1, 2, \dots, k.$$
 (9)

2 Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

Na potrzeby zadania utworzono macierz symetryczną ${\bf A}$ rzędu n=7, której elementy są dane wzorem:

$$A_{ij} = \frac{1}{\sqrt{2 + |i - j|}},\tag{10}$$

gdzie: i, j = 0, 1, ..., n - 1.

Następnie przy użyciu metody potęgowej z wykorzystaniem ortogonalizacji Gramma-Schmidta należało wyznaczyć iteracyjnie wartości własne utworzonej macierzy.

Kolejnym zadaniem było wyznaczenie macierzy ${f D}$ zdefiniowanej jako iloczyn:

$$\mathbf{D} = \mathbf{X}^{\mathrm{T}} \mathbf{A} \mathbf{X}. \tag{11}$$

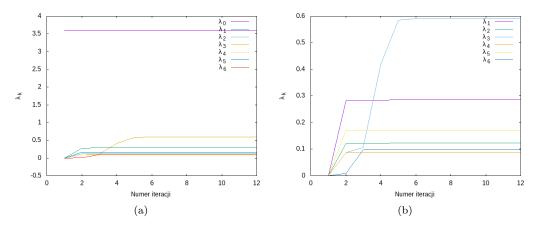
Macierz X w powyższym równaniu składa się z kolumn bedących kolejnymi wektorami własnymi:

$$\mathbf{X} = (\vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n). \tag{12}$$

2.2 Wyniki

2.2.1 Wykresy przybliżeń kolejnych wartości własnych

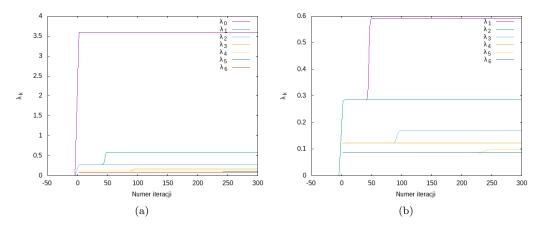
Do rozwiązania problemu wykorzystano program napisany w języku C. Kolejne przybliżenia wartości własnych zostały zapisane do pliku, co pozwoliło na stworzenie wykresu ukazującego zbieżność tych wartości.



Rysunek 1: Kolejne przybliżenia znalezionych wartości własnych λ_k w funkcji numeru iteracji dla wykonanych 12 iteracji. Na rysunku b) przybliżenie na wartości własne $\lambda_1 - \lambda_6$

Jak łatwo zauważyć na powyższych wykresach wszystkie wartości zbiegają bardzo szybko - prawie wszystkie już w trakcie trzech pierwszych iteracji, a jedynie λ_3 zbiega po 5 iteracjach. Możemy zatem stwierdzić, że mamy do czynienia ze stabilizacją.

Aby sprawdzić, czy ilość iteracji $IT_MAX = 12$ jest wystarczająca i jaki wpływ na wynik ma jej zwiększenie, ustawiono jej wartość na 300 i powtórzono ćwiczenie. Z otrzymanych przybliżeń wartości własnych ponownie utworzono wykresy.



Rysunek 2: Kolejne przybliżenia znalezionych wartości własnych λ_k w funkcji numeru iteracji dla wykonanych 300 iteracji. Na rysunku b) przybliżenie na wartości własne $\lambda_1 - \lambda_6$

Jak łatwo zauważyć na powyższych wykresach λ_1 przez około 40 iteracji utrzymuje się w okolicach przybliżenia λ_2 , natomiast λ_3 przez około 80 iteracji utrzymuje się w okolicach przybliżenia λ_4 . Wynika stąd, że $\vec{x_1}$ i $\vec{x_3}$ miały mniejszy wkład niż wektory $\vec{x_2}$ i $\vec{x_4}$, wskutek czego wartości własne zostały znalezione wolniej.

2.2.2 Wyznaczenie macierzy D

Zgodnie ze wzorem (11) wyznaczono macierz **D** dla 12 iteracji:

```
-8.89566 \cdot 10^{-15}
                                                             -2.28983 \cdot 10^{-16}
                                                                                       -6.93889 \cdot 10^{-17}
                                                                                                                -2.71484\cdot10^{-16}
                                                                                                                                           2.70617 \cdot 10^{-16}
                                                                                                                                                                    -5.55112 \cdot 10^{-17}
               3.59586
          -8.99281 \cdot 10^{-15}
                                                                                                                 -1.57912\cdot 10^{-09}
                                                                                                                                                                    -8.67362 \cdot 10^{-18}
                                        0.284988
                                                              -1.88273 \cdot 10^{-6}
                                                                                        -9.6575 \cdot 10^{-9}
                                                                                                                                           -4.85723 \cdot 10^{-17}
          -1.66533 \cdot 10^{-16}
                                    -1.88273 \cdot 10^{-6}
                                                                                                                                                                    -7.45931 \cdot 10^{-17}
                                                                 0.122798
                                                                                          -0.00240002
                                                                                                                   -0.000136113
                                                                                                                                           -2.50361 \cdot 10^{-12}
          -5.55112 \cdot 10^{-16}
                                     -9.6575 \cdot 10^{-9}
                                                                                                                                           -1.38778 \cdot 10^{-17}
                                                                                                                                                                     -9.19403 \cdot 10^{-17}
D =
                                                                 -0.00240002
                                                                                            0.590378
                                                                                                                   -1.13699 \cdot 10^{-8}
          -3.33067 \cdot 10^{-16}
                                    -1.57912 \cdot 10^{-9}
                                                                                         -1.13699 \cdot 10^{-8}
                                                                                                                                                                     -7.26112 \cdot 10^{-15}
                                                                                                                                            -1.60842 \cdot 10^{-9}
                                                               -0.000136113
                                                                                                                    0.0865952
          1.11022\cdot 10^{-16}
                                                             -2.50361 \cdot 10^{-12}
                                                                                        2.77556\cdot 10^{-17}
                                    3.46945\cdot 10^{-17}
                                                                                                                  -1.60842 \cdot 10^{-9}
                                                                                                                                                                     -4.06949 \cdot 10^{-9}
                                                                                                                                               0.170974
           -2.77556 \cdot 10^{-16}
                                                             -2.94903\cdot 10^{-17}
                                                                                                                                            -4.06949 \cdot 10^{-9}
                                    -6.93889 \cdot 10^{-18}
                                                                                       -5.55112 \cdot 10^{-17}
                                                                                                                 -7.29798 \cdot 10^{-15}
                                                                                                                                                                        0.0981544
```

W idealnym przypadku na diagonali takiej macierzy powinny znajdować się kolejne wartości własne a poza nią same zera. W naszym przypadku wartości leżące poza diagonalą są w większości bardzo małe, co świadczy o uzyskaniu bardzo dobrych oszacowań pomimo zaledwie 12 iteracji.

3 Wnioski

Metoda potęgowa z wykorzystaniem ortogonalizacji Gramma-Schmidta jest prostą w implementacji metodą pozwalającą na szybkie wyznaczenie wartości własnych macierzy. Zarówno dla małej ilości iteracji (12), jak i dla kilkudziesięciokrotnie większej udało się uzyskać efekt stabilizacji dla wszystkich wartości własnych. Łatwe do zauważenia jest również to, że różne wartości własne dążą do bardziej dokładnego przybliżenia wolniej lub szybciej. Pomimo tego w naszym przypadku wystarczyło zaledwie kilka iteracji do osiągnięcia pierwszych dokładnych przybliżeń. W praktyce często zamiast określać na sztywno ilość iteracji stosuje się warunek stopu, jako który wybiera się kryterium małej poprawki lub warunek małego residuum.

Użycie ortogonalizacji do usunięcia wartości własnych tuż po ich obliczeniu pozostawiało po nich niewielki ślad, ze względu na jej niedokładność, co potęgowało błędy numeryczne i zaburzało w nieznacznym stopniu poszukiwanie pozostałych wartości.

Należy również pamiętać, że w przypadku metody iteracyjnej możliwy jest brak zbieżności do oczekiwanych przez nas wartości.