MNUM – PROJEKT, zadanie 2.15

Wojciech Rokicki gr. AR2

Zadanie 1

Obliczanie wartości własnych macierzy nieosobliwych metodą rozkładu QR w wersji z przesunięciami oraz bez przesunięć

Idea pojedynczego kroku metody QR bez przesunięć (przekształcenie $A^{(k)}$ do $A^{(k+1)}$):

$$A^{(k)} = Q^{(k)} R^{(k)}$$

$$A^{(k+1)} = R^{(k)} Q^{(k)}$$

Ponieważ $Q^{(k)}$ jest ortogonalna, więc

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

$$A^{(k+1)} = Q^{(k)T} A^{(k)} Q^{(k)}$$

Macierz $A^{(k+1)}$ jest macierzą $A^{(k)}$ przekształconą przez podobieństwo, więc ma te same wartości własne. Można pokazać, że dla macierzy symetrycznej A, macierz $A^{(k)}$ będzie zbiegać do macierzy diagonalnej $diag\{\lambda_i\}$.

Algorytm metody QR z przesunięciami

$$\begin{aligned} A^{(k)} - p_k I &= Q^{(k)} R^{(k)} \\ A^{(k+1)} &= R^{(k)} Q^{(k)} + p_k I \\ &= Q^{(k)T} (A^{(k)} - p_k I) Q^{(k)} + p_k I \\ &= Q^{(k)T} A^{(k)} Q^{(k)} \end{aligned}$$

Za p_k przyjmuje się bliższą wartość własną podmacierzy $2x2$ z prawego dolnego rogu macierzy $A^{(k)}$. Po wyzerowaniu wszystkich elementów ostatniego wiersza poza ostatnim elementem (diagonalnym) postępujemy analogicznie z macierzą zmniejszoną do wymiarowości $(n-1)x(n-1)$.

Algorytm metody QR bez przesunięć (`EigvalQRNoShift.m`):

```
function eigenvalues = EigvalQRNoShift(D,tol, imax)
%tol - tolerancja (górna granica wartosci) elementów
zerowanych
%imax - maksymalna liczba iteracji
n=size(D, 1);
i=1;
while i <= imax && max(max(D-diag(diag(D)))) > tol
    [Q1, R1]=qr(D);
    D=R1*Q1; %macierz przekszta?cona
    i=i+1;
end
if i > imax
    error('imax exceeded program terminated');
end
eigenvalues=diag(D);
disp(i);
end
```

Algorytm metody QR z przesunięciami (`EigvalQRShifts.m`):

```
function eigenvalues = EigvalQRShifts(A, tol, imax)
%tol - tolerancja (gorna granica wartosci) elementow zerowych
%imax - max liczba iteracji dla liczenia jednej wartosci
wlasnej
n=size(A,1);
eigenvalues=diag(zeros(n));
INITIALsubmatrix=A; %macierz poczatkowa (oryginalna)
for k=n:-1:2
    DK=INITIALsubmatrix; %macierz startowa dla jednej wartosci
wlasnej
    i=0;
    while i <= imax && max(abs(DK(k,1:k-1))) > tol
        DD=DK(k-1:k,k-1:k); %2x2 podmacierz prawego dolnego
rogu
        [ev1,ev2]=quadpolynroots(1,-
(DD(1,1)+DD(2,2)),DD(2,2)*DD(1,1)-DD(2,1)*DD(1,2));
        if abs(ev1-DD(2,2)) < abs(ev2-DD(2,2))
            shift=ev1; %najblizsza DK(k,k) wartosc wlasna
podmacierzy DD
        else
            shift=ev2; %najblizsza DK(k,k) wartosc wlasna
podmacierzy DD
        end
        DK=DK-eye(k)*shift; %macierz przesunieta
        [Q1,R1]=qr(DK); %faktoryzacja QR
        DK=R1*Q1+eye(k)*shift; %macierz przeksztalcona
        i=i+1;
    end
    if i > imax
        error('imax exceeded program terminated');
    end
    eigenvalues(k)=DK(k,k);
    if k >2
        INITIALsubmatrix=DK(1:k-1,1:k-1); %deflacja macierzy
    else
        eigenvalues(1)=DK(1,1); %ostatnia wartosc wlasna
    end
end

end
```

Algorytm rozkładu QR - zmodyfikowany algorytm Grama-Shmidta (`QRDecomposition.m`):

```
function [Q,R] = QRDecomposition(A)
%Rozklad QR (waski) zmodyfikowanym alg. Grama-Schmidta dla
%macierzy mxn (m>=n) o rzedzie n, rzeczywistej lub zespolonej
[m, n]=size(A);
Q=zeros(m,n); R=zeros(n,n); d=zeros(1,n);
%rozklad z kolumnami Q ortogonalnymi (nie ortonormalnymi):
for i =1:n
    Q(:,i)=A(:,i);
    R(i,i)=1;
    d(i)=Q(:,i)'*Q(:,i);
    for j=i+1:n
        R(i,j)=(Q(:,i)'*A(:,j))/d(i);
        A(:,j)=A(:,j)-R(i,j)*Q(:,i);
    end
end
%normowanie rozkladu (kolumny Q ortonomralne):
for i=1:n
    dd=norm(Q(:,i));
    Q(:,i)=Q(:,i)/dd;
    R(i,i:n)=R(i,i:n)*dd;
end

end
```

Kod algorytmu oblicznia pierwiastków równania kwadratowego (plik: `quadpolynroots.m`) :

```
function [ x1, x2 ] = quadpolynroots( a,b,c )
%quadpolynroots funkcja zwracajaca pierwistki wielomianu
stopnia 2
%   a,b,c - wspolczynniki wielomianu
    l1 = -b + sqrt(b*b - 4*a*c);
    l2 = -b - sqrt(b*b - 4*a*c);
    %licznik o wiekszym module
    if abs(l1) > abs(l2)
       licznik = l1;
    else
        licznik = l2;
    end
    x1 = licznik/(2*a);
    %drugi pierwiastek (wzory Viete'a)
    x2 = ((-b)/a) - x1;
end
```

Badane będzie 30 losowych macierzy o rozmiarach 5x5, 10x10 i 20x20. Maksymalna liczba iteracji (imax) została ustawiona na 10 000, tolerancja 0.00001.

Rozmiar 5x5

W tym przypadku wszystkie metody były zbieżne.

Macierz i metoda	Średnia liczba iteracji	Liczba nieudanych prób
Macierz symetryczna Algorytm bez przesunięć	33.4333	0
Macierz symetryczna Algorytm z przesunięciami	7.7667	0
Macierz niesymetryczna Algorytm z przesunięciami	9.5667	0

Rozmiar 10x10

W jednym przypadku metoda bez przesunięć okazała się rozbieżna. Algorytm z przesunięciami był zbieżny dla wszystkich macierzy

Macierz i metoda	Średnia liczba iteracji	Liczba nieudanych prób
Macierz symetryczna Algorytm bez przesunięć	226.2333	0/1 (przy imax = 1000)
Macierz symetryczna Algorytm z przesunięciami	14.0667	0
Macierz niesymetryczna Algorytm z przesunięciami	20.6333	0

Rozmiar 20x20

W jednym przypadku metoda bez przesunięć okazała się rozbieżna. Algorytm z przesunięciami był zbieżny dla wszystkich macierzy

Macierz i metoda	Średnia liczba iteracji	Liczba nieudanych prób
Macierz symetryczna Algorytm bez przesunięć	578.4000	0/1 (przy imax = 1000)
Macierz symetryczna Algorytm z przesunięciami	28.6667	0
Macierz niesymetryczna Algorytm z przesunięciami	45.1333	0

Wnioski – porównanie metod:

Rozkład QR w wersji bez przesunięć wymaga znacznie większej liczby iteracji, nie będzie działał także w przypadku macierzy niesymetrycznych. Algorytm w wersji z przesunięciami wymaga mniejszego nakładu obliczeniowego, mimo większej złożoności każdego kroku, gdyż jest szybciej zbieżny. Jest on ponadto bardziej uniwersalny ze względu na obsługę macierzy niesymetrycznych.

Wyniki – porównanie z funkcją eig():

Przetestowane zostały pojedyncze przypadkowe macierze o danych rozmiarach i wyniki powyższych algorytmów zostały porównane z wynikami otrzymanymi za pomocą wbudowanej funkcji eig(). W tabeli przedstawiono średnią różnic wartości własnych otrzymanych tymi dwoma sposobami

	5x5	10x10	20x20
Macierz symetryczna Algorytm bez przesunięć	1,5610437942 2928e-11	9,6017568895 7676e-12	3,6969469152 6590e-12
Macierz symetryczna Algorytm z przesunięciami	1,2628786905 1112e-15	1,1836642777 0411e-12	6,3276432704 6509e-11
Macierz niesymetryczna Algorytm z przesunięciami	2,8514468976 5145e-08	8,6044291380 1266e-08	1,0027006505 9626e-07

Wnioski:

Jak widać rezultaty otrzymane za pomocą powyższych algorytmów można uznać za dokładne w stosunku do wbudowanej funkcji eig(). Dla macierzy niesymetrycznych uzyskujemy najmniejszą dokładność ze względu na występowanie wśród wartości własnych liczb zespolonych.

Zadanie 2

Wyznaczanie metodą najmniejszych kwadratów funkcji wielomianowej najlepiej aproksymującej dane.

Definiując macierz A jako macierz Nxn, gdzie N – ilość próbek, n – stopień wielomianu, dla której

$$A_{(i,j)} = {x_j}^{i-1}$$

$$i = 1, 2, 3, \dots, n;\ j = 1, 2, 3, \dots, N$$

Rozwiązanie zadania najmniejszych kwadratów polega na znalezieniu wektora a zawierającego współczynniki wielomianu. W tym przypadku zrobimy to na dwa sposoby:

Układ równań normalnych:

$$A^T A\, a = A^T y$$

Układ równań wynikający z rozkładu QR:

$$A = QR$$

$$Ra = Q^T y$$

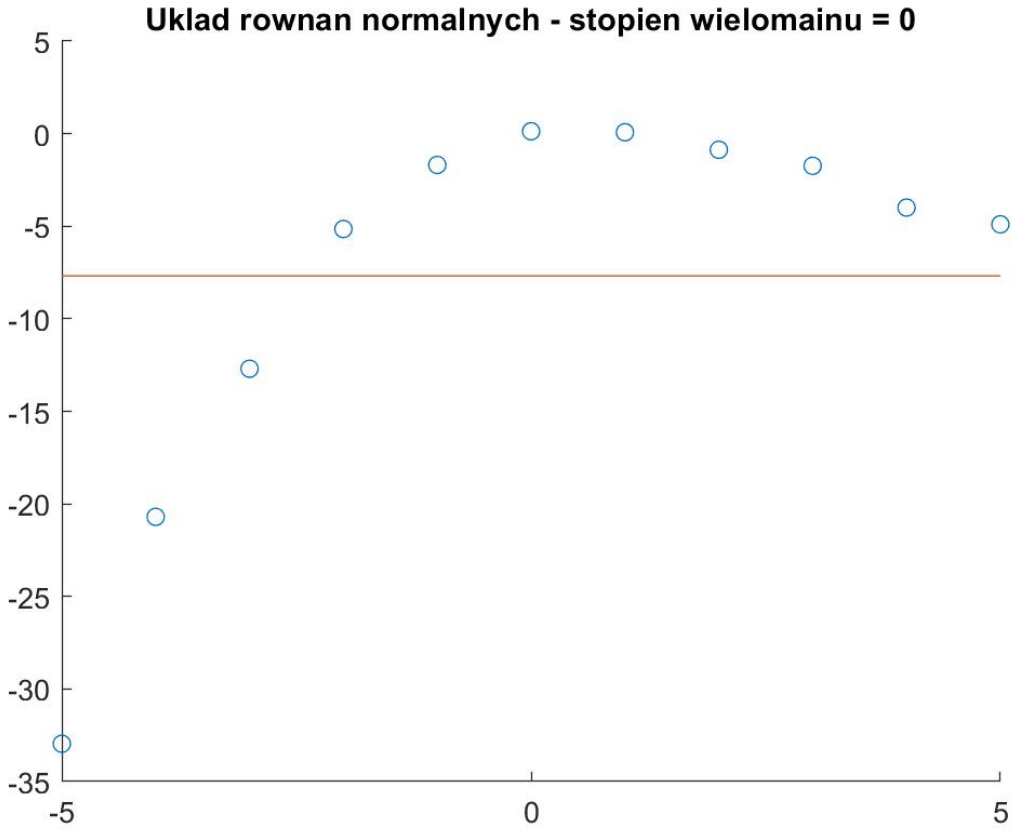
Algorytm aproksymujący (`Approximation.m`):

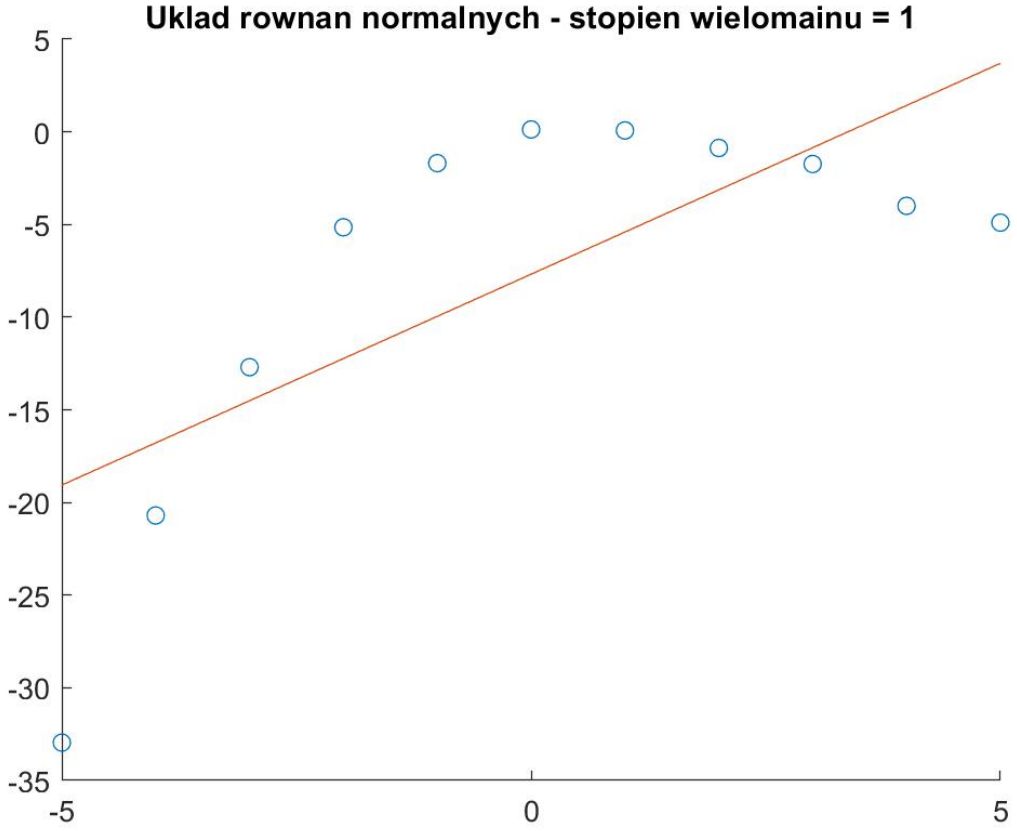
```
function [ a, res ] = Approximation( x, y, n, meth )
%   n - stopien wielomianu
%   meth : 1 - uklad rownan normalnych; 2 - qr
    N = size(x,1);
    A = zeros(N,n);

    %Wypelniamy macierz A odpowiednimi potêgami x
    for i=1:N
        for j = 1:n
            A(i,j) = x(i,1)^(j-1);
        end
    end

    %uklad rownan normalnych
    if meth == 1
        ata = A'*A;
        aty = A'*y;
        a = ata\aty;
        res = norm(aty - ata*a);
    %uklad wynikajacy z rozkladu QR
    elseif meth == 2
        [Q,R] = QRDecomposition(A);
        a =R\Q'*y;
        res = norm(R*a - Q'*y);
    end
end
```

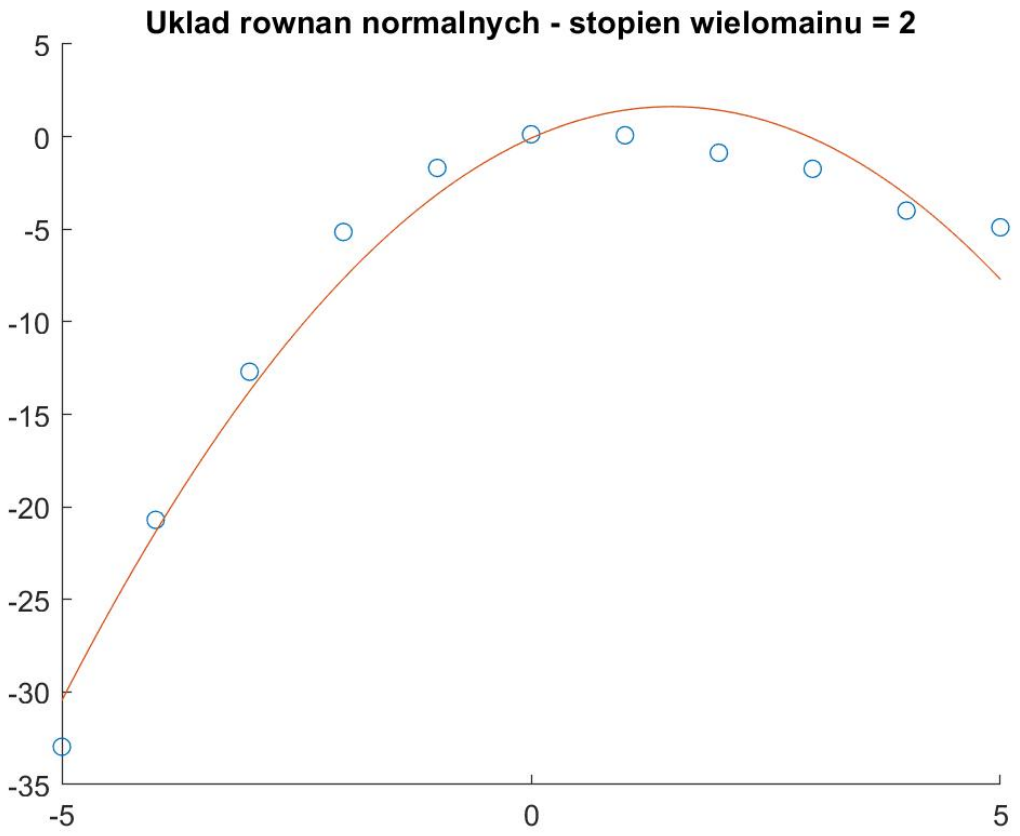
Algorytm obliczający wartości wielomianu (`pval.m`):

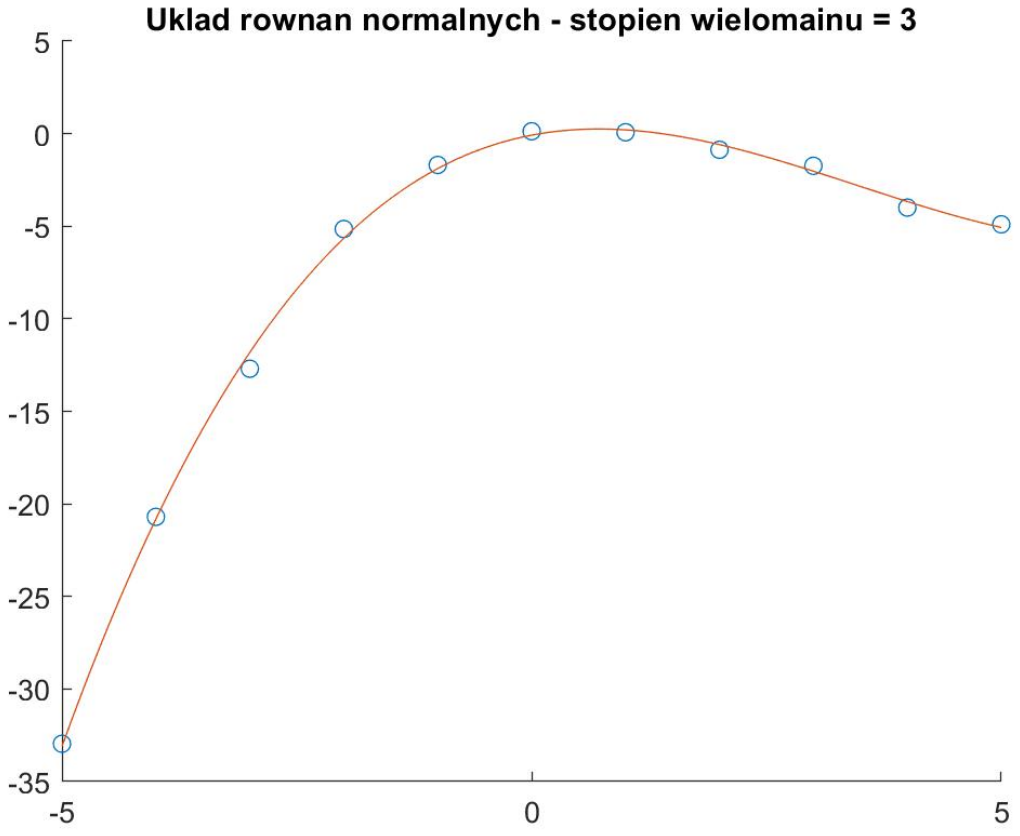
```
function [ w ] = pval(a , x)
%   pval oblicza wartosci wielomianu o wspolczynnikach a w
%   punktach x (a(1) odpowiada x^0)
%   w - wartosci wielomianu w danych punktach x
    ilprobek = size(x,1);
    stwiel = size(a,1);
    w = zeros(ilprobek,1);
    for i = 1: ilprobek
        for j = 1:stwiel
            w(i) = w(i) + a(j) * x(i)^(j-1);
        end
    end
end
```

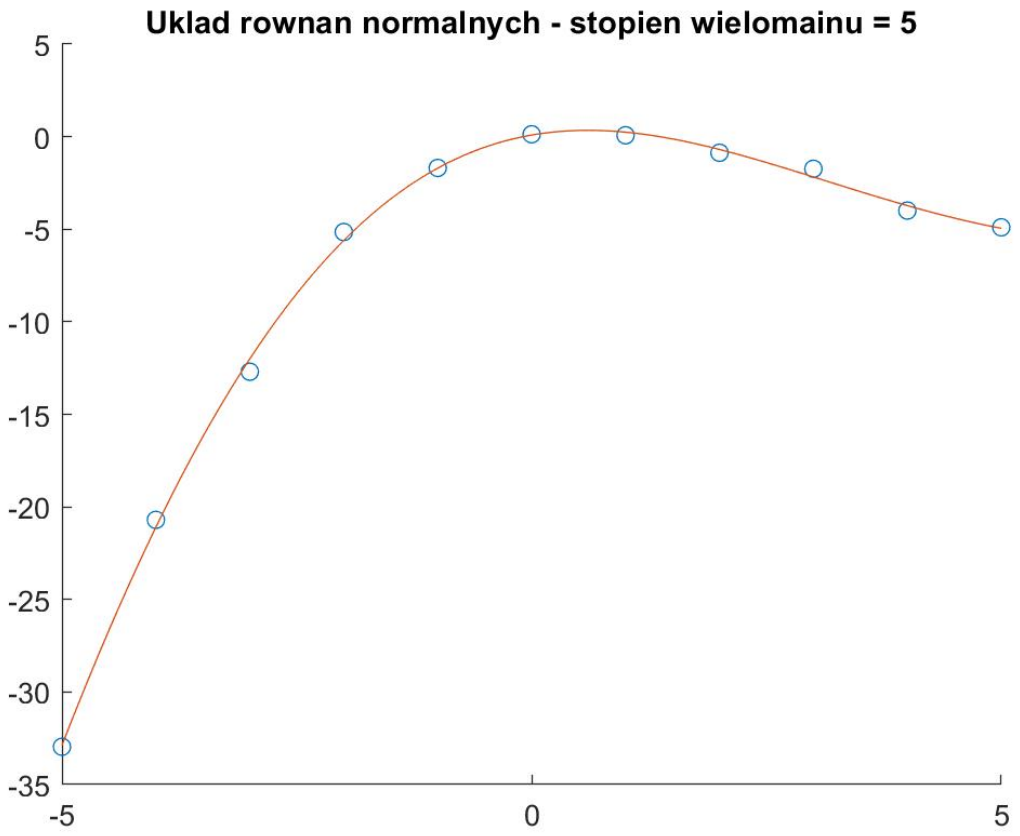
Zadanie 2 – Wykresy (funkcja aproksymacji na tle danych)

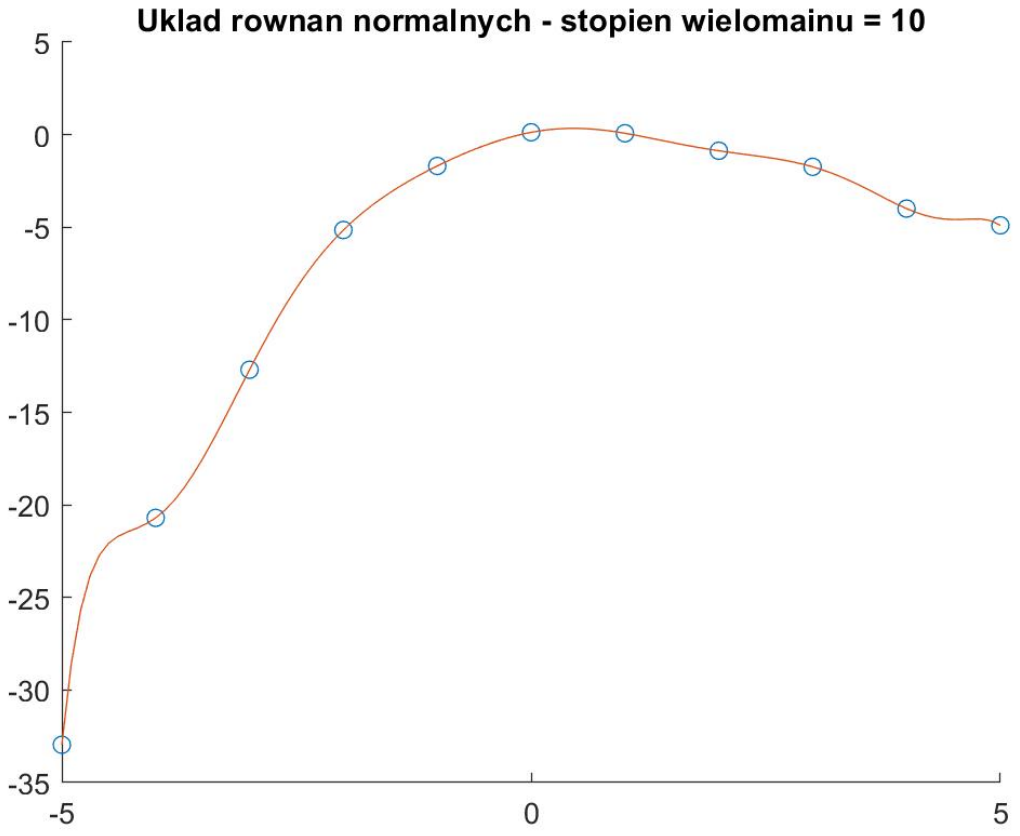


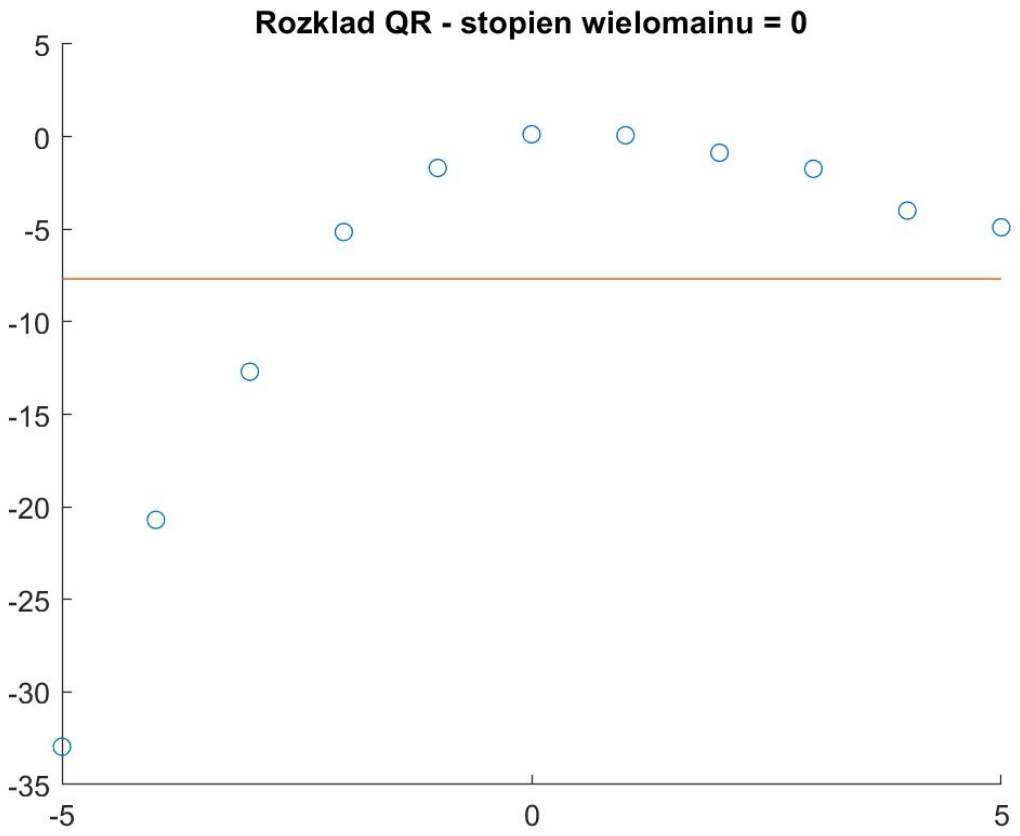


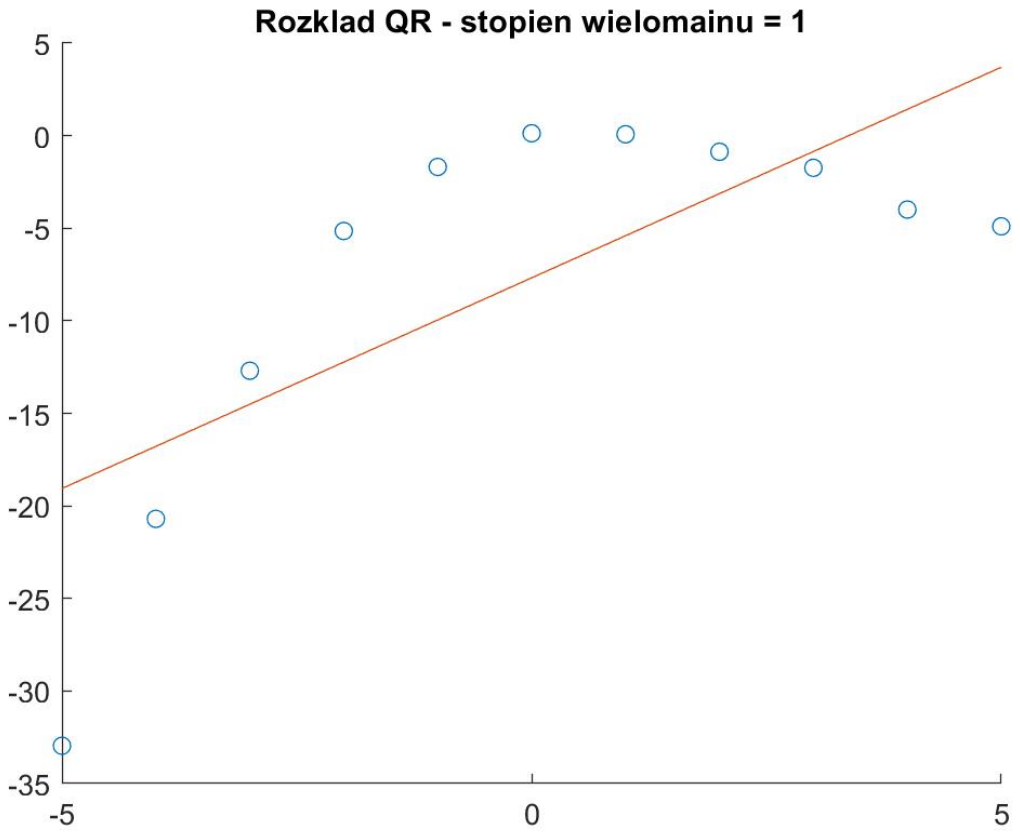

Uklad rownan normalnych - stopien wielomainu = 2
5
0
-5
-10
-15
-20
-25
-30
-35
-5
0
5

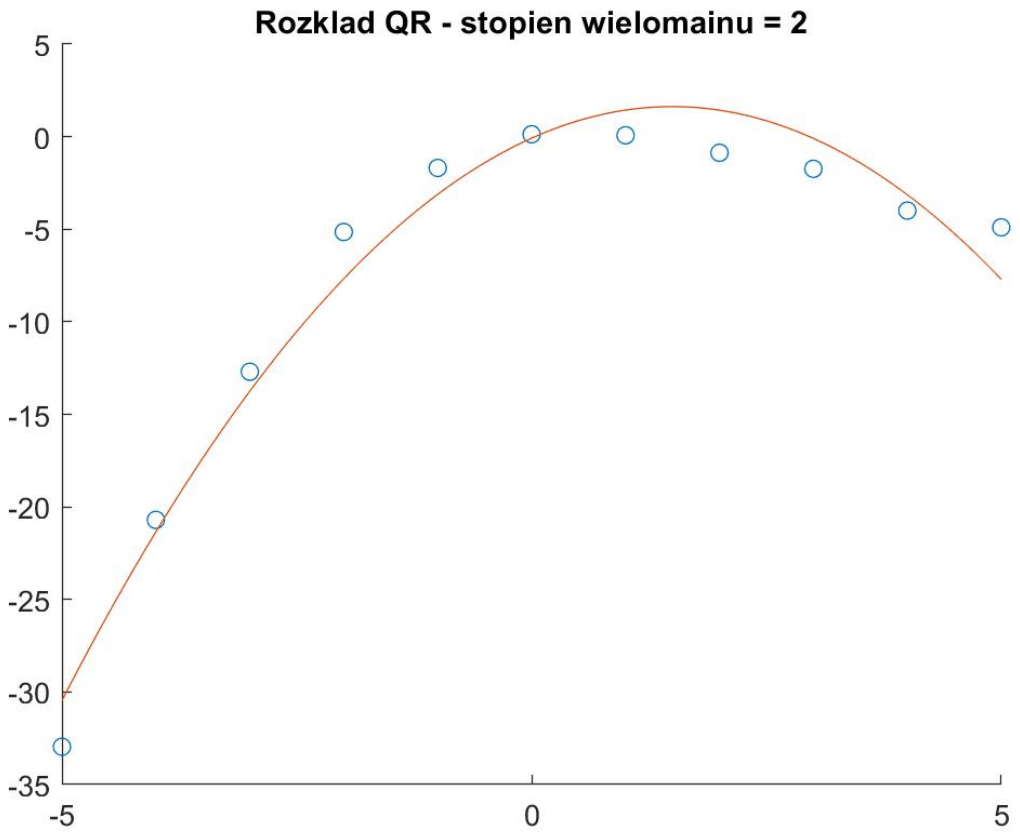

Uklad rownan normalnych - stopien wielomainu = 3
5
0
-5
-10
-15
-20
-25
-30
-35
-5
0
5

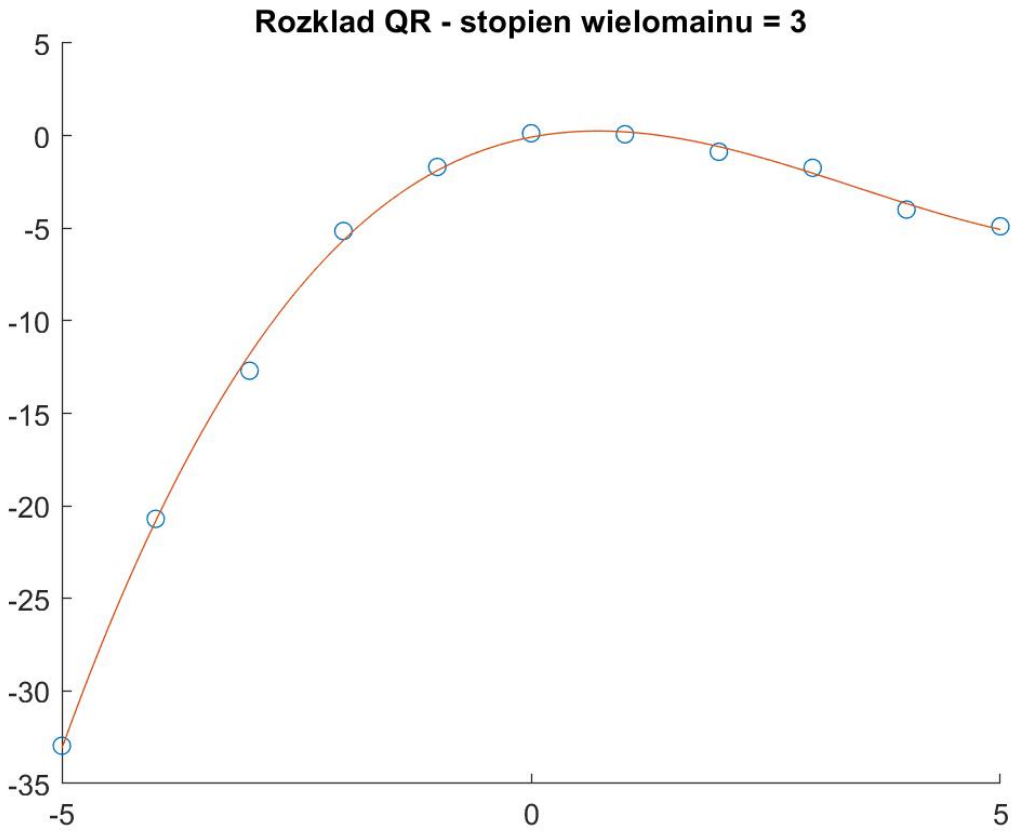

Uklad rownan normalnych - stopien wielomainu = 5
5
0
-5
-10
-15
-20
-25
-30
-35
-5
0
5

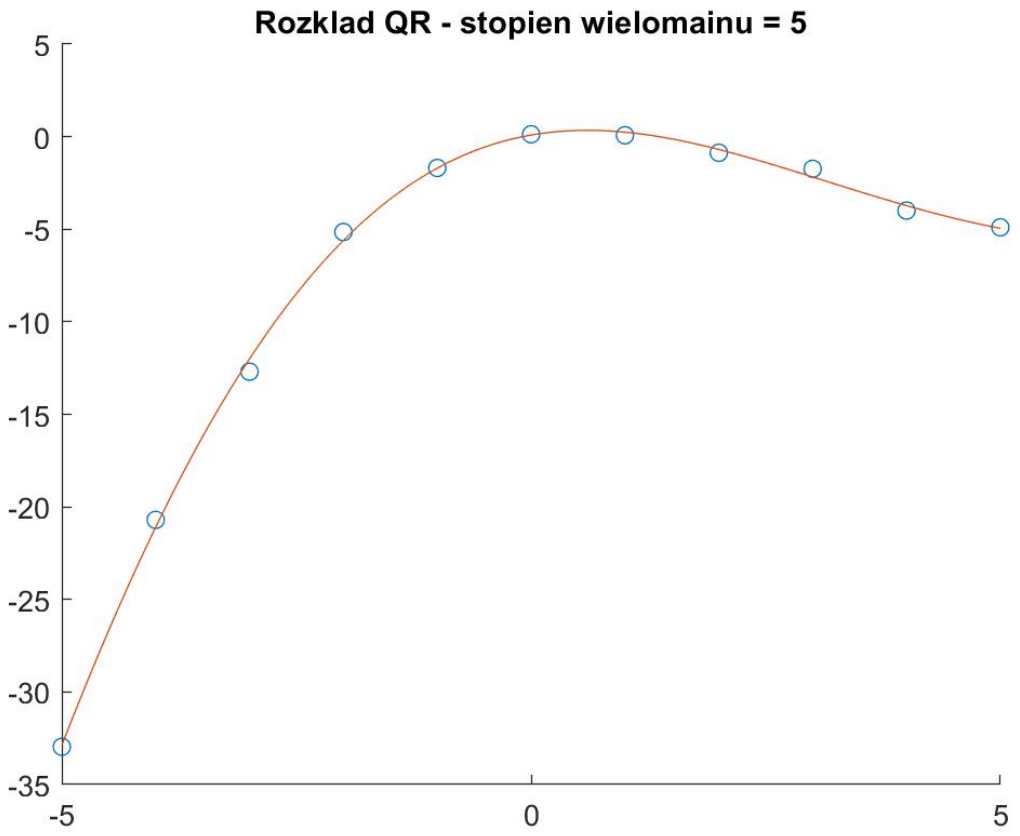

Uklad rownan normalnych - stopien wielomainu = 10
5
0
-5
-10
-15
-20
-25
-30
-35
-5
0
5

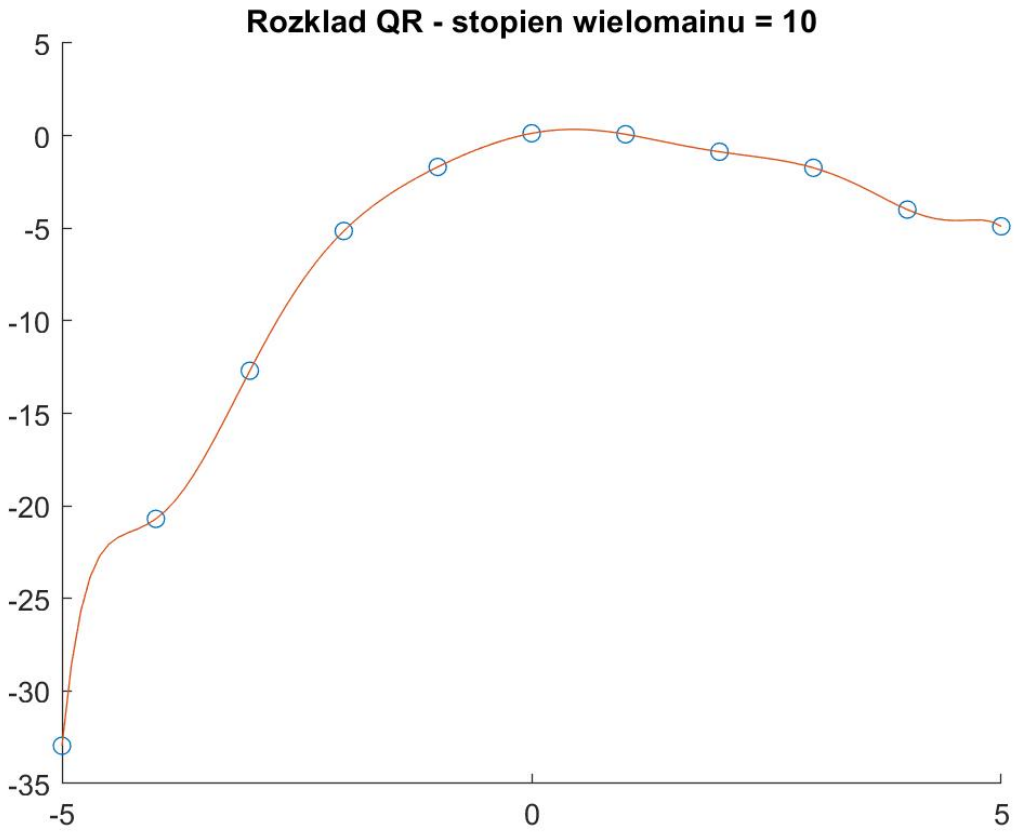

Rozklad QR - stopien wielomainu = 0
5
0
-5
-10
-15
-20
-25
-30
-35
-5
0
5


Rozklad QR - stopien wielomainu = 1
5
0
-5
-10
-15
-20
-25
-30
-35
-5
0
5


Rozklad QR - stopien wielomainu = 2
5
0
-5
-10
-15
-20
-25
-30
-35
-5
0
5


Rozklad QR - stopien wielomainu = 3
5
0
-5
-10
-15
-20
-25
-30
-35
-5
0
5


Rozklad QR - stopien wielomainu = 5
5
0
-5
-10
-15
-20
-25
-30
-35
-5
0
5


Rozklad QR - stopien wielomainu = 10
5
0
-5
-10
-15
-20
-25
-30
-35
-5
0
5

Błędy rozwiązania obliczone jako norma residuum:

Stopień wielomianu	Błąd rozwiązania Układ równań normalnych	Błąd rozwiązania Rozkład QR
0	0	0
1	2.8422e-14	1.0049e-14
2	2.8422e-14	8.7023e-15
3	9.0949e-13	6.2172e-15
5	1.4552e-11	6.2096e-15
10	4.1833e-07	2.5108e-13

Błędy aproksymacji:

Stopień wielomianu	Maksymalny błąd aproksymacji Układ równań normalnych	Maksymalny błąd aproksymacji Rozkład QR
0	25.2773	25.2773
1	13.8985	13.8985
2	2.5216	2.5216
3	0.8845	0.8845
5	0.6992	0.6992
10	7.0487e-11	2.6128e-12

Wnioski:

Jak widać układ równań wynikający z rozkładu QR zachowuje dobre uwarunkowanie dłużej
w przeciwieństwie do układu równań normalnych, który szybko traci dokładność. Mimo tego dla stopni wielomianów stopnia większego bądź równego 10 przebieg funkcji aproksymującej w obu przypadkach zaczyna odbiegać od poprzednich rezultatów. Wynika to z faktu, że w pewnym momencie przestajemy aproksymować funkcję a jedynie dane pomiarowe. Jak widać w obu przypadkach błędy aproksymacji maleją wraz z zwiększaniem stopnia wielomianu.