Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Bartosz Rogowski, II rok, 303793

7 kwietnia 2020

Metody numeryczne

Sprawozdanie nr 5 z zajęć laboratoryjnych

Wyznaczanie wartości i wektorów własnych macierzy symetrycznych metodami iteracyjnymi

1. Wstęp teoretyczny

Metoda wyznaczania wartości i wektorów własnych zależy od tego, z jaką macierzą mamy do czynienia. Dla macierzy symetrycznych o wyrazach i wartościach własnych rzeczywistych do rozwiązania problemu własnego:

$$(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\vec{x} = 0, \tag{1}$$

stosuje się **metody iteracyjne** – np. **metodę potęgową**, która służy do znajdowania wartości własnej o największym module (właściwie to wartości dominującej), a co za tym idzie – odpowiadającego jej wektora własnego. W kolejnych iteracjach *i* wyznaczana jest nowa, dokładniejsza wartość własna λ, począwszy od wektora startowego składającego się z samych jedynek:

$$\vec{x}_{i+1} = \mathbf{A}\vec{x}_i \tag{2}$$

$$\lambda_i = \frac{(\vec{x}_{i+1})^T \cdot \vec{x}_i}{(\vec{x}_i)^T \cdot \vec{x}_i}. \tag{3}$$

Chcąc zapobiec żmudnym obliczeniom, odpowiednio normuje się wektor, np.

$$\vec{x}_{i+1} = \frac{\vec{x}_{i+1}}{\|\vec{x}_{i+1}\|_2}, \tag{4}$$

gdzie druga norma (też: euklidesowa) wyraża się jako suma geometryczna współrzędnych:

$$\|\vec{x}\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2} = \sqrt{\vec{x}^{\,T} \cdot \vec{x}}. \tag{5}$$

W celu znalezienia pozostałych wartości własnych konieczna jest modyfikacja tego algorytmu. Stosuje się do tego **redukcję Hotellinga**. Polega ona na zmianie macierzy **A** dla kolejnych wartości:

$$\mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{A}_k - \lambda_k \cdot \vec{x}_k^{\,i} \cdot \left(\vec{x}_k^{\,i}\right)^T, \tag{6}$$

rozpoczynając od $\mathbf{A_0}$ = **A**. Wówczas wzór (2) ulegnie modyfikacji:

$$\vec{x}_k^{\,i+1} = \mathbf{A}_k \vec{x}_k^{\,i}. \tag{7}$$

Wzory (3) i (4) pozostaną takie same dla k-tej iteracji (*k* odpowiada za iteracje po kolejnych wartościach własnych – zewnętrzna pętla, natomiast *i* za iteracje metody potęgowej

– wewnętrzna pętla). Jednak otrzymane w ten sposób wartości będą zawierały błędy, ponieważ metoda ta polega na przybliżaniu wartości i każda iteracja ma na celu zwiększenie jej dokładności.

Ciekawostką jest fakt[1], iż **metodę potęgową** stosuje się w algorytmie *PageRank*, którego używa wyszukiwarka Google, aby klasyfikować strony według ich jakości.

2. Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

Naszym zadaniem było stworzenie n-wymiarowej (n = 7) rzeczywistej kwadratowej macierzy symetrycznej o wzorze ogólnym:

$$\mathbf{A}_{i,j} = \sqrt{i+j}, \tag{8}$$

a następnie znalezienia jej wartości własnych za pomocą samodzielnie zaimplementowanej **metody potęgowej z redukcją Hotellinga**. Przeprowadzono 8 iteracji tej metody. Wykorzystaliśmy także metody *tred2* oraz *tqli* z biblioteki *Numerical Recipes*, znane nam z poprzednich zajęć, w celu porównania obu metod.
Tak jak na poprzednim laboratorium, potrzebowaliśmy również dodatkowych wektorów zmiennoprzecinkowych, na których zapisywane były elementy diagonalne oraz poddiagonalne. Ponieważ metoda *tqli* nadpisuje podaną macierz, musieliśmy ją odtworzyć (np. poprzez stworzenie kopii) tak, aby użycie wzoru (6) było poprawne.

2.2 Wyniki

Wartości własne λ macierzy **A** otrzymane z **metody potęgowej z redukcją Hotellinga** zestawione są z tymi, które zostały wyliczone z metody *tqli* (metoda bezpośrednia) w tabeli 1.

	metoda iteracyjna	metoda bezpośrednia	moduł różnicy	błąd względny
λ_1	19.7862	19.7862	0	$0\ \%$
λ_2	-0.71234	-0.712341	$6.55651 \cdot 10^{-7}$	$9 \cdot 10^{-5}\ \%$
λ_3	-0.0133172	-0.0133178	$6.10948 \cdot 10^{-7}$	$0.00459\ \%$
λ_4	-0.000335307	-0.00033598	$6.73579 \cdot 10^{-7}$	$0.20048\ \%$
λ_5	$-6.60271 \cdot 10^{-6}$	$-7.10793 \cdot 10^{-6}$	$5.05218 \cdot 10^{-7}$	$7.10781\ \%$
λ_6	$8.49657 \cdot 10^{-7}$	$4.43579 \cdot 10^{-7}$	$4.06078 \cdot 10^{-7}$	$91.5457\ \%$
λ_7	$-2.38169 \cdot 10^{-7}$	$-4.02198 \cdot 10^{-7}$	$1.64029 \cdot 10^{-7}$	$40.7832\ \%$

Tabela 1. Wartości własne macierzy **A** obliczone różnymi metodami.

Dwie ostatnie kolumny zawierają moduł różnicy wartości obliczonych powyższymi metodami oraz błąd względny, który jest liczony jako:

$$\delta = \frac{|\lambda_b - \lambda_i|}{\lambda_b} \cdot 100\ \%. \tag{9}$$

> Oznaczenia:
> λ_b – wartość własna wyliczona z metody bezpośredniej (metoda *tqli*)
> λ_i – wartość własna obliczona metodą iteracyjną (**metoda potęgowa z redukcją Hotellinga**)

Informacje te posłużą do przeanalizowania jakości metody.

[1] Źródła: http://ilpubs.stanford.edu:8090/422/1/1999-66.pdf oraz https://en.wikipedia.org/wiki/PageRank [data dostępu: 6 kwietnia 2020]

3. Wnioski

- Metoda potęgowa należy do metod iteracyjnych i stosowana jest do znalezienia wartości własnej o największym module macierzy rzeczywistych symetrycznych.
- Metoda potęgowa w połączeniu z redukcją Hotellinga pozwala na znalezienie wszystkich wartości i wektorów własnych macierzy, ponadto jest prosta do zaimplementowania.
- Iteracyjność tej metody polega na kolejnych przybliżeniach wartości własnych, a jej zbieżność zależy od ilorazu wartości własnych.
- Normowanie wektora upraszcza rachunki, ponieważ każda współrzędna jest dzielona przez tą samą liczbę. Jeśli pominie się tę operację, bardzo szybko można wyjść poza zakres z powodu mnożenia przez duże liczby, co w praktyce oznacza uzyskanie NaN (nie-liczby, z ang. not a numer). Już dla $k = 2$ oraz $i = 5$ współrzędne wektora przekraczają[2] rząd 10^{100} (liczbę tę określa się też mianem googol i jest ona większa niż szacunkowa liczba wszystkich atomów we Wszechświecie[3]).
- Analiza otrzymanych wartości z obu metod pozwala stwierdzić, że różnice są rzędu 10^{-7}, jednak dla bardzo małych wartości własnych błąd względny jest bardzo duży (nawet ponad 90 %, dane z tabeli 1). Na podstawie tej obserwacji można wysnuć wniosek, że metody tej nie należy używać, jeśli otrzymane wartości własne są rzędu 10^{-6} lub mniejsze, gdyż znacząco wzrasta dla nich błąd względny, a więc rozwiązania są niedokładne.

[2] Wyniki te zostały uzyskane w programie Matlab.
[3] Źródło: https://www.universetoday.com/36302/atoms-in-the-universe/ [data dostępu: 7 kwietnia 2020]