Hleb Shypula
286720
5 kwietnia 2020

Sprawozdanie 5

Diagonalizacja macierzy symetrycznej metodą potegową z redukcją Hotellinga

1. Wstęp teoretyczny

Zadaniem na laboratorium było rozwiązanie macierzowego problemu własnego

$$A\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}, \qquad \{\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n\}, \quad \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_n\}$$

przy użyciu metody iteracyjnej. W ogólnym przypadku (macierz niesymetryczna) iteracyjne wyznaczanie wartości i wektorów wsłanych wymaga zastosowania monumentalnych metod np. metody Arnoldiego zaimplementowanej w pakiecie ARPACK. Jeśli jednak macierz jest symetryczna, używamy prostej **metody potęgowej**. W wersji podstawowej metoda pozwala iteracyjnie wyznaczać pojedynczą wartość i odpowiedni wektor własny, ale po modyfikacji **redukcji Hotellinga** umożliwia wyznaczanie kolejnych par (λ_i, $\boldsymbol{x}_i$).

Redukcja macierzy ma pod sobą następujące twierdzenie – jeśli λ_1 jest wartością własną macierzy A i $\boldsymbol{x}_1$ jest odpowiadającym jej wektorem własnym oraz dla dowolnego wektora $\boldsymbol{v}$ o własności

$$\boldsymbol{v}^T\boldsymbol{x}_1 = 1$$

macierz zredukowana ma taką postać:

$$W_1 = A - \lambda_1\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{v}^T$$

Macierz ta ma te same wartości co macierz A oprócz λ_1, która jest zerem.

Za szczególny przypadek redukcji macierzy możemy przyjąć **redukcję Hotellinga**. Ta metoda polega na tym, że za wektor $\boldsymbol{v}$ przyjmujemy lewy wektor własny przynależny do wartości własnej λ_1. Z powodu, że nie znamy lewych wektorów, ta metoda jest skuteczna tylko w przypadku macierzy symetrycznych. W takich macierzach lewe wektory są identyczne z prawymi

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{x}_1$$
$$W_1 = A - \lambda_1\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_1^T$$

lub rekurencyjnie:

$$W_0 = A$$
$$W_i = W_{i-1} - \lambda_{i-1}\mathbf{x}_{i-1}\mathbf{x}_{i-1}^T$$
$$i = 1, 2, \ldots, n-1$$

Algorytm, za pomocą którego mieliśmy zaimplementować wyznaczenie wartości własnych przy użyciu metody potęgowej z redukcją Hotellinga wygląda następująco:

1 Utwórz macierze: A, W, X
2 Utwórz wektory: $\boldsymbol{x}_{old}$, $\boldsymbol{x}_{new}$
3 $W = A$ (inicjalizacja macierzy iterującej W – będziemy modyfikować)
4   for (k=0; $k < K_{val}$; k++){
5     $\boldsymbol{x}_{old} = [1, 1, \ldots, 1]$ (inicjalizacja wektora startowego)
6     $\boldsymbol{x}_{old} = \frac{\boldsymbol{x}_{old}}{\|\boldsymbol{x}_{old}\|_2}$ (normalizacja wektora)
7   for (m=1; $m <= IT\_MAX$; m++){
8       $\boldsymbol{x}_{new} = W\boldsymbol{x}_{old}$
9       $\lambda_k = (\boldsymbol{x}_{new})^T \boldsymbol{x}_{old}$
10       $\boldsymbol{x}_{old} = \frac{\boldsymbol{x}_{new}}{\|\boldsymbol{x}_{new}\|_2}$ (normalizacja wektora)
11   }
12     $W = W - \lambda_k \boldsymbol{x}_{old}(\boldsymbol{x}_{old})^T$ (iloczyn zewnętrzny/tensorowy)
13     $X_{*,k} = \boldsymbol{x}_{old}$ (zachowujemy wektor własny $\boldsymbol{x}_{old}$ w k−tej kolumnie macierzy X)
14   }

gdzie:

- k - numer wyznaczanej wartości własnej
- i - numer iteracji dla określonego k
- A - macierz pierwotna o wymiarze *n*, wypełniona następująco:

$$A_{ij} = \frac{1 + |i + j|}{1 + |i - j|}$$

przy $i, j = 0, 1, \ldots, n-1$.

- W - macierz iteracji (podlega modyfikacji)
- λ_k - przybliżenie k-tej wartości własnej w m-tej iteracji
- $\boldsymbol{x}_{new}$ - m-te przybliżenie k-tego wektora własnego
- $K_{val} = n$ - liczba wartości własnych do wyznaczenia
- $IT\_MAX = 12$ - maksymalna liczba iteracji dla każdego k

Ten algorytm działa następująco:

W czwartej linijce rozpoczyna się zewnętrzna pętla, w której wyznaczamy kolejne k-te wartości oraz wektory własne. W linii 7 zaczyna się właściwa pętla iterująca, w której edytujemy aktualne przybliżenia. Pętla się kończy po *IT_MAX* iteracjach, ale moblibyśmy ją zakończyć w momencie, gdy dwa kolejne przybliżenia λ_k niewiele się różnią. Po zakończeniu wewnętrznej pętli w linii 13 zachowujemy wektor i wartość własne. Trzeba zauważyć, że gdybyśmy skasowali linię 12, po wykonaniu kolejnej iteracji k otrzymalibyśmy te same wartości, bo powtórzylibyśmy obliczenia. Aby temu zapobiec, z macierzy iteracji W mamy wyeliminować informację o kierunku wektora $\mathbf{x}_{k-1}$. W tym celu od macierzy W odejmujemy wyraz $\boldsymbol{x}_k\boldsymbol{x}_k^T$ przemnożony przez λ_k. Wyraz $\boldsymbol{x}_k\boldsymbol{x}_k^T$ jest iloczynem zewnętrznym.

Iloczyn zewnętrzny wektorów kolumnowego ***v*** i wierszowego ***w*** ma taką postać:

$$v \otimes w = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_v \otimes \begin{bmatrix} 1, 0 \end{bmatrix}_w = \begin{bmatrix} 1 \cdot \begin{bmatrix} 1, 0 \end{bmatrix}_w \\ 0 \cdot \begin{bmatrix} 1, 0 \end{bmatrix}_w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1, 0 \\ 0, 0 \end{bmatrix}$$

gdzie w wyniku dostajemy macierz o wymiarze nxn.

2. Problem

Jako zadanie mieliśmy rozwiązać macierzowy problem własny. Kod źródłowy ma 2 niezbędne etapy:

1) Dla kżdego k wyliczyć i zapisać do pliku kolejne m przybliżeń wartości własnych λ_k oraz sporządzić odpowiedni rysunek. W kolumnach macierzy X zachować wyznaczone wektory własne:

$$X = [\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_{n-1}]$$

2) Wyznaczyć postać macierzy D i zapisać ję do pliku. Macierz ta jest zdefiniowana jako iloczyn:

$$D = X^T AX$$

3. Wyniki

Do pliku została zapisana macierz D, która ma następującą postać:

$$\begin{bmatrix}
24.5585 & -7.84263e-05 & -5.55944e-08 & -4.79673e-10 & -6.58698e-12 & -1.77636e-14 & -1.12688e-14 \\
-7.84263e-05 & 8.85168 & -0.042035 & -0.000362672 & -4.97635e-06 & -1.18577e-08 & -1.80828e-14 \\
-5.55944e-08 & -0.042035 & 5.86619 & -0.0672484 & -0.000896966 & -2.13685e-06 & -2.77844e-12 \\
-4.79673e-10 & -0.000362672 & -0.0672484 & 4.29449 & -0.054224 & -0.000122061 & -1.58562e-10 \\
-6.58708e-12 & -4.97635e-06 & -0.000896966 & -0.054224 & 3.05855 & -0.00709218 & -8.86873e-09 \\
-1.71252e-14 & -1.18577e-08 & -2.13685e-06 & -0.000122061 & -0.00709218 & 1.81862 & -4.19876e-06 \\
-1.1522e-14 & -1.8101e-14 & -2.77851e-12 & -1.58561e-10 & -8.86873e-09 & -4.19876e-06 & 0.552968
\end{bmatrix}$$

Możemy zauważyć, że otrzymaliśmy macierz przybliżoną do diagonalnej – elementy na diagonali są wartościami własnymi, elementy pozadiagonalne są bliskie zeru.
Proszę zauważyć, że przy zwiększeniu liczby iteracji *IT_MAX* do 30, dokładność się wzrasta. W wyniku otrzymujemy macierz jeszcze bardziej przybliżoną do diagonalnej.
Natomiast warunkiem STOP'u mogłoby się stać otrzymanie elementów zerowych poza diagonalą.

Poniżej są przedstawione przybliżenia znalezionych wartości własnych (kolejno w kolumnach: nr wartości, nr iteracji, przybliżenie wartości):

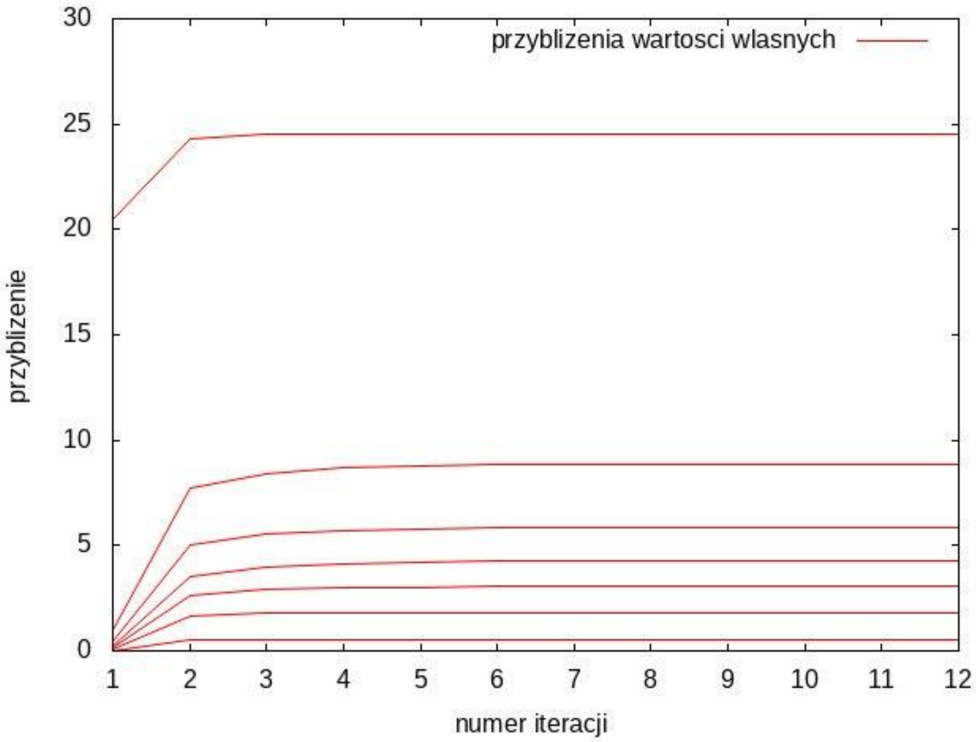
0	1	20.485714	1	1	0.975911	2	1	0.438848
0	2	24.327365	1	2	7.732824	2	2	5.031550
0	3	24.534951	1	3	8.435153	2	3	5.520899
0	4	24.555684	1	4	8.682327	2	4	5.703915
0	5	24.558121	1	5	8.780323	2	5	5.785217
0	6	24.558425	1	6	8.821095	2	6	5.824554
0	7	24.558464	1	7	8.838471	2	7	5.844503
0	8	24.558469	1	8	8.845972	2	8	5.854887
0	9	24.558469	1	9	8.849235	2	9	5.860369
0	10	24.558469	1	10	8.850661	2	10	5.863283
0	11	24.558469	1	11	8.851285	2	11	5.864839
0	12	24.558469	1	12	8.851559	2	12	5.865671

3	1	0.222284	4	1	0.134634	5	1	0.068237
3	2	3.523016	4	2	2.605128	5	2	1.661381
3	3	3.941041	4	3	2.893636	5	3	1.802233
3	4	4.117695	4	4	2.996143	5	4	1.817084
3	5	4.203957	4	5	3.035652	5	5	1.818475
3	6	4.248019	4	6	3.050214	5	6	1.818604
3	7	4.270757	4	7	3.055445	5	7	1.818616
3	8	4.282456	4	8	3.057306	5	8	1.818617
3	9	4.288444	4	9	3.057965	5	9	1.818617
3	10	4.291496	4	10	3.058198	5	10	1.818617
3	11	4.293049	4	11	3.058280	5	11	1.818617
3	12	4.293837	4	12	3.058310	5	12	1.818617

6	1	0.021721
6	2	0.552968
6	3	0.552968
6	4	0.552968
6	5	0.552968
6	6	0.552968
6	7	0.552968
6	8	0.552968
6	9	0.552968
6	10	0.552968
6	11	0.552968
6	12	0.552968

Dla nr wartości 0 stabilizacja z dokładnością trzy miejsca po przecinku następuje po 6 iteracji,
dla nr wartości 1 – po 10 iteracji,
dla nr wartości 2 – po 12 iteracji,
dla nr wartości 3 – po 10 iteracji,
dla nr wartości 4 – po 9 iteracji,
dla nr wartości 5 – po 4 iteracji,
dla nr wartości 6 – po 1 iteracji.

Poniżej jest przedstawiony odpowiedni wykres:



Wykres 1: Kolejne przybliżenia znalezionych wartości własnych

4. Wnioski

Za pomocą metody potęgowej z redukcją Hotellinga iteracyjnie wyznaczono wartości oraz wektory własne i rozwiązano macierzowy problem własny. Metoda z redukcją Hotellinga pozwala na wyznaczenie wartości oraz wektorów własnych tylko dla macierzy symetrycznych. Jak już omówione wcześniej, dokładność obliczeń zależy od liczby iteracji – im większa liczba, tym dokładniejsze są wyniki. Liczba iteracji po której przybliżenie wartości się stabilizuje oczekiwanie waha.