AGH

AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA
IM. STANISŁAWA STASZICA
W KRAKOWIE

Sprawozdanie - laboratorium nr 5

Metoda potęgowa z ortogonalizacją Grama-Schmidta

Klaudia Fil, 31.03.2019 r.

1. Wstęp teoretyczny

Jedną z metod wyznaczania wartości i wektorów własnych jest prosta metoda iteracyjna – potęgowa. Zakłada ona istnienie *n* liniowo niezależnych wektorów własnych macierzy *A*, które stanowią bazę przestrzeni liniowej:

$$x_1, x_2, \ldots, x_n \quad , \tag{1}$$

wówczas dla dowolnego wektora v_0 :

$$v_0 = \sum_{i=1}^{n} a_i x_i \quad . \tag{2}$$

Oraz jeśli λ_i stanowią wartości własne macierzy *A*, to:

$$\begin{gathered} A v_0 = \sum_{i=1}^{n} a_i \lambda_i x_i \\ v_m = A^m v_0 = \sum_{i=1}^{n} a_i \lambda_i^m x_i \end{gathered} \quad , \tag{3}$$

zakładamy, że wartości własne tworzą ciąg:

$$|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \ldots \geq |\lambda_n| \quad . \tag{4}$$

Jeżeli λ_1 jest dominującą wartością własną, oraz wektor v_0 ma składową w kierunku x_i to zachodzi:

$$\lim_{m \to \infty} \frac{A^m v_0}{\lambda_1^m} = a_1 x_1 \quad , \tag{5}$$

z czego można wysunąć wniosek, że wartość własną można obliczyć następująco:

$$\lambda_1 = \lim_{m \to \infty} \frac{y^T v_{m+1}}{y^T v_m} \quad . \tag{6}$$

Dla dowolnego wektora $\vec{y}$, który nie jest ortogonalny $\vec{x}_1$.

Metoda ta umożliwia jednak znalezienie jedynie dominującej wartości własnej oraz odpowiadającego jej wektora, aby uzyskać pozostałe należy skorzystać z metody pomocniczej, jaką jest ortogonalizacją Grama-Schmidta.

Możliwe jest wyznaczenie zbieżności ze wzoru:

$$\vec{v}_m = \lambda_1^m [\alpha_1 \vec{x}_1 + \sum_{i=2}^{n} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^m \alpha_i \vec{x}_i] \quad , \tag{7}$$

wynika z niego, ze jest zależna od $\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^m$ oraz współczynników α_1 , czyli wyboru $\vec{v}_0$, dlatego dla pierwszego elementu zbieżność jest niemożliwa. Jeżeli wartość własna o największym module jest zespolona, to ciąg nie będzie zbieżny.

W związku z błędami zaokrągleń wektory rozpinające podprzestrzeń Kryłowa przestają być czasami ortogonalne, konieczne staje się przeprowadzenie ortogonalizacji, jaką jest w naszym przypadku metoda Grama-Schmidta.

Jest to przekształcenie układu liniowo niezależnych wektorów w układ ortogonalny, są nimi gdy ich iloczyn skalarny jest zerowy. Pozwala nam to na stwierdzenie, że takie przestrzenie liniowe rozpinane przez ten układ zarówno przed jak i po ortogonalizacji są tożsame. Operator rzutowania ortogonalnego wektora $\vec{v}$ na wektor $\vec{u}$ definiujemy:

$$proj_{\vec{u}} \vec{v} = \frac{\langle \vec{v}, \vec{u} \rangle}{\langle \vec{u}, \vec{u} \rangle} \cdot \vec{u} \quad . \tag{8}$$

Proces przebiega następująco dla *k*-wektorów:

$$\begin{aligned} \vec{u}_1 &= \vec{v}_1 \\ \vec{u}_2 &= \vec{v}_2 - proj_{\vec{u}_1} \vec{v}_2 \\ &\vdots \\ \vec{u}_k &= \vec{v}_k - \sum_{j=1}^{k-1} proj_{\vec{u}_j} \vec{v}_k \end{aligned} \quad , \tag{9}$$

a otrzymany zbiór wektorów $\{\vec{u}_1, \vec{u}_2 \ldots, \vec{u}_k\}$, jest zbiorem ortogonalnym.

2. Zadanie do wykonania

2.1. Opis problemu

Problemem jest wyznaczenie wartości własnych macierzy *A*:

$$A_{i,j} = \frac{1}{\sqrt{2 + |i-j|}} \quad \text{, dla } i,j = 0,1,\ldots,n-1, \tag{10}$$

metodą iteracyjną, przy użyciu metody potęgowej, zgodnie z poniższym algorytmem opierającym się na metodzie Grama-Schmidta, zawierającym wzór (9):

$$\begin{aligned}
&for\left(k=0;k<K_{val};k+1\right)\\
&x_k^0=[1,1,\ldots,1]\\
&for\left(i=0;i\leq IT_{MAX};i+1\right)\\
&x_k^{i+1}=A\cdot x_k^i\\
&for\left(j=0;j<k;j+1\right)\\
&x_k^{i+1}=x_k^{i+1}-[\left(x_k^{i+1}\right)^T x_j]x_j\\
&\lambda_k^{i+1}=\frac{\left(x_k^{i+1}\right)^T x_k^i}{\left(x_k^i\right)^T x_k^i}\\
&x_k^i=\frac{x_k^{i+1}}{\left\|x_k^{i+1}\right\|_2}
\end{aligned}\quad , \tag{11}$$

gdzie

- k - numer wyznaczanej wartości własnej,
- i - numer iteracji dla określonego k,
- A - macierz,
- λ_k^i - przybliżenie k-tej wartości własnej w i-tej iteracji,
- x_k^i - i-te przybliżenie k-tego wektora własnego,
- K_{val} = n - liczba wartości własnych do wyznaczenia,
- IT_{MAX} = 12 - maksymalna liczba iteracji dla każdego k.

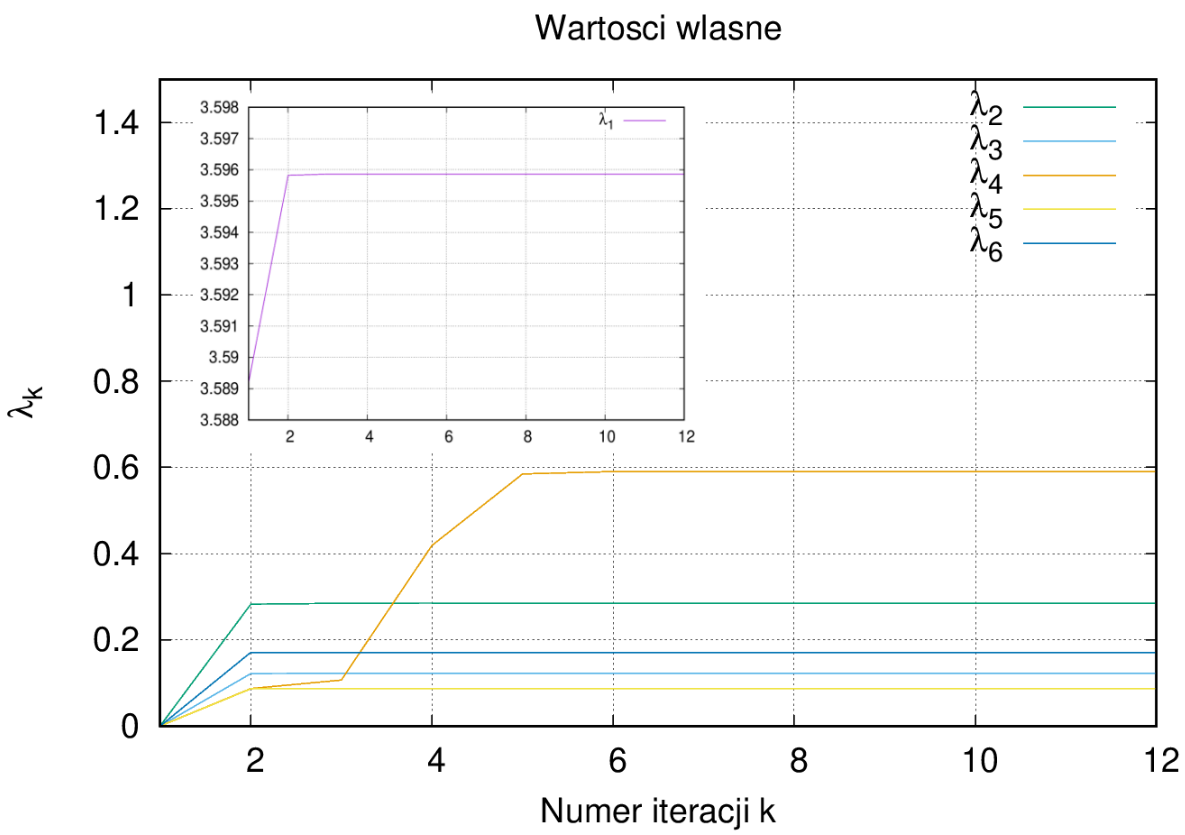
Dla każdej kolejnej iteracji zapisano kolejne przybliżenia wartości własnych λ_k^i , dzięki którym możliwe było wygenerowanie ich wykresu.

Wyznaczono następnie postać macierzy D zdefiniowanej jako iloczyn:

$$D=X^T A X \quad . \tag{12}$$

2.2. Wyniki

Dzięki programowi w języku C stworzono odpowiednią funkcję iteracyjną, która wykorzystując skrypt Gnuplota wygenerowała wykres:



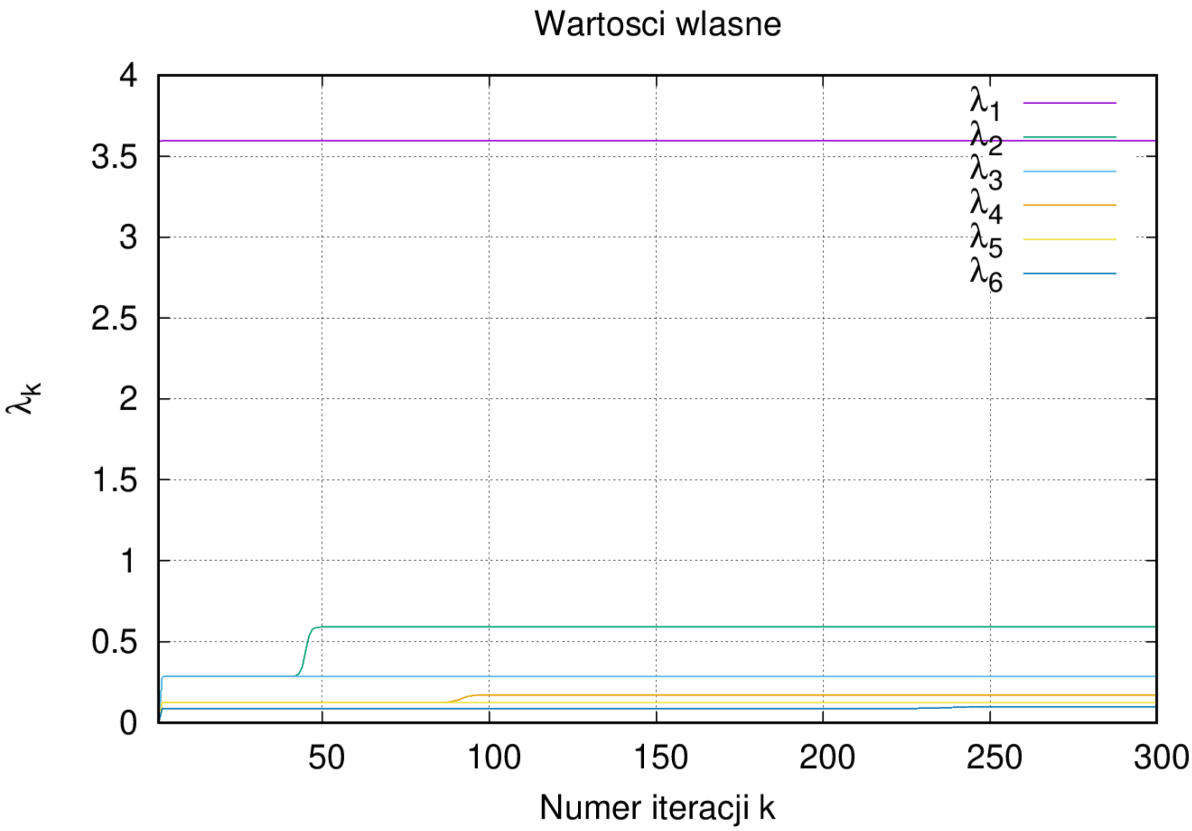
Rysunek 1: Kolejne przybliżenia znalezionych wartości własnych λ_k w funkcji numeru iteracji. Wykonano 12 iteracji (bez badania zbieżności)

przy czym macierz D wygląda następująco:

$$D=\begin{bmatrix} 3.59586 & -8.99281\cdot10^{-15} & -1.66533\cdot10^{-16} & -5.55112\cdot10^{-16} & -3.33067\cdot10^{-16} & 1.11022\cdot10^{-16} & -2.77556\cdot10^{-16} \\ -8.89566\cdot10^{-15} & 0.284988 & -1.88273\cdot10^{-06} & -9.6575\cdot10^{-09} & -1.57912\cdot10^{-09} & 3.46945\cdot10^{-17} & -6.93889\cdot10^{-18} \\ -2.28983\cdot10^{-16} & -1.88273\cdot10^{-06} & 0.122798 & -0.00240002 & -0.000136113 & -2.50361\cdot10^{-12} & -2.94903\cdot10^{-17} \\ -6.93889\cdot10^{-17} & -9.6575\cdot10^{-09} & -0.00240002 & 0.590378 & -1.13699\cdot10^{-08} & 2.77556\cdot10^{-17} & -5.55112\cdot10^{-17} \\ -2.71484\cdot10^{-16} & -1.57912\cdot10^{-09} & -0.000136113 & -1.13699\text{e-}08 & 0.0865952 & -1.60842\cdot10^{-09} & -7.29798\cdot10^{-15} \\ 2.70617\cdot10^{-16} & -4.85723\cdot10^{-17} & -2.50361\cdot10^{-12} & -1.38778\cdot10^{-17} & -1.60842\cdot10^{-09} & 0.170974 & -4.06949\cdot10^{-09} \\ -5.55112\cdot10^{-17} & -8.67362\cdot10^{-18} & -7.45931\cdot10^{-17} & -9.19403\cdot10^{-17} & -7.26112\cdot10^{-15} & -4.06949\cdot10^{-09} & 0.0981544 \end{bmatrix}$$

3. Wnioski

Analizując rysunek 1. można zauważyć, że wartości własne zbiegają się już po kilku iteracjach, jednak ponieważ nie badano zbieżności – wzór (7), możemy założyć stabilizację. Jednak zadana przez nas ilość IT_{MAX} może być za mała, podjęto próbę ponownego wyznaczenia wartości własnych dla zwiększonej liczby – 300, co przedstawiono na poniższym rysunku:



Rysunek 2: Kolejne przybliżenia znalezionych wartości własnych λ_k w funkcji numeru iteracji (wykonano 300 iteracji)

Warto zauważyć, że następuje skok w niektórych przybliżeniach, między innymi λ_2 i λ_3 przez początkowe 50 iteracji utrzymywały się w podobnym przybliżeniu, następnie prawdopodobnie przez błędy numeryczne, zmienia się wkład poszczególnych wektorów odpowiadających wartościom własnym.

Macierz D w idealnym przypadku powinna się składać z wartości własnych leżących na diagonali oraz zer, co świadczyłoby o wysokiej dokładności wyznaczonych wartości własnych. W większości elementów wartości są bliskie zeru, jednak zdarzają się gorzej oszacowane z wyższym błędem, jednak jest ich stosunkowo mało.

Metoda potęgowa okazała się szybkim i zwracającym relatywnie poprawne wyniki sposobem iteracyjnym wyznaczenia wartości własnych. Niezależnie od wybranej ilości iteracji osiągnięta została stabilizacja, dla większej z nich błędy numeryczne były zauważalne, jednak zwiększały nakład obliczeń. Przede wszystkim warto zauważyć, że w przypadku tej metody możliwy jest brak zbieżności do oczekiwanych przez nas wartości.