Sprawozdanie - laboratorium nr 5

Diagonalizacja macierzy metodą potegową

Marek Kiełtyka

28 marca 2019

1 Wstęp

1.1 Metoda potęgowa

Jako jedna z metod iteracyjnych umożliwia numeryczne wyznaczenie pojedynczych wartości i wektorów własnych danej macierzy. Konieczne jest założenie o istnieniu jej n liniowo niezależnych wektorów własnych, które stanowią bazę przestrzeni liniowej postaci $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \ldots \vec{x_N}$. Mając do dyspozycji daną bazę, można zdefiniować poniższe równości dla dowolnego wektora $\vec{v}_0$ i pojedynczych wartości własnych λ_i macierzy wejściowej.

$$\vec{v}_0 = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i x_i$$

$$A\vec{v}_0 = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \lambda_i x_i$$

$$\vec{v} = A^m \vec{v}_0 \implies \vec{v} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \lambda_i^m x_i$$

Jeśli ponadto założy się istnienie słabomalejącego ciągu wartości własnych:

$$|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_N|, \tag{1}$$

to można wystosować granicę z λ_1 jako dominującą wartością własną i na tej podstawie łatwo ją obliczyć.

$$\lim_{m\to\infty} \frac{A^m \vec{v}_0}{\lambda_1^m} = \alpha_1 x_1 \implies \lambda_1 = \lim_{m\to\infty} \frac{\vec{y}^T \vec{v}_{m+1}}{\vec{y}^T \vec{v}_m} \tag{2}$$

Klasyczna metoda potęgowa umożliwia jednak znalezienie tylko nadmienionej wartości własnej i odpowiadającego jej wektora, toteż na laboratorium wykorzystano pomocniczy algorytm opisany poniżej.

1.2 Pseudokod

Algorytm 1 Iteracyjne wyznaczanie wartości i wektorów własnych metodą potęgową

for k = 1 to k <= N **do**
  $x_k^1 = [1, 1, \ldots, 1]$
  for i = 1 to i <= IT_MAX **do**
    $x_k^{i+1} = W_k x_k^i$
    $\lambda_k^i = \frac{(x_k^{i+1})^T x_k^i}{(x_k^i)^T x_k^i}$
    $x_k^i = \frac{x_k^{i+1}}{||x_k^{i+1}||_2}$
  $W_{k+1} = W_k - \lambda_k x_k^i (x_k^i)^T$

- k - numer wyznaczanej wartości własnej,
- i - numer iteracji dla określonego k,
- A - macierz pierwotna,
- W_k - macierz iteracji,
- λ_k^i - przybliżenie k-tej wartości własnej w i-tej iteracji,
- x_i^k- i-te przybliżenie k-tego wektora własnego,
- N - liczba wartości własnych do wyznaczenia,
- $IT\_MAX = 12$ - maksymalna liczba iteracji dla każdego k.

Ciekawostką jest fakt, że podobnego algorytmu używa się w pozycjonowaniu stron internetowych podczas ich wyszukiwania.

2 Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

Do przetestowania metody użyto macierzy symetrycznej A rzędu $N = 7$ danej przepisem

$$a_{i,j} = \frac{1}{\sqrt{2 + |i-j|}} \text{ dla } i, j \in \{1, \ldots, 7\}. \tag{3}$$

Symetryczność macierzy zagwarantowała, że wszystkie wartości własne oraz składowe wektorów własnych były rzeczywiste. Utworzono ponadto macierz iterującą W_0 będącą wstępnie kopią macierzy A. W celu sprawdzenia poprawności obliczeń zdefiniowano macierz D z twierdzenia o ortogonalnym podobieństwie, które opisuje wzór

$$D = X^T A X \tag{4}$$

gdzie X to macierz składająca się z kolumn bedących kolejnymi wektorami własnymi macierzy wejściowej:

$$X = \left[\vec{x}_1, \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_N\right]. \tag{5}$$

Każdy wektor własny $\vec{x}_k$ był inicjalizowany jedynkami w poszczególnych obiegach pętli. Zgodnie z pseudokodem należało je kolejno przybliżać, wykonując zawsze z góry założoną liczbę iteracji równą $IT\_MAX = 12$ dla każdej wartości własnej.

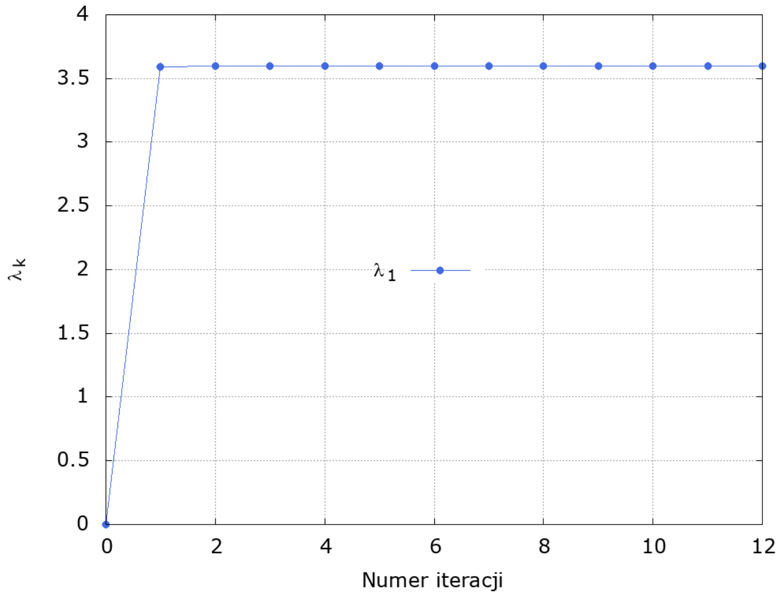
2.2 Wyniki

Rozwiązanie opracowano w oparciu o bibliotekę *Numerical Recipes* oraz samodzielnie opracowaną zwaną *ObjectiveNR*, która bazuje na wcześniej wymienionej. Dzięki temu operacje na macierzach i wektorach były intuicyjne i klarowne. Wartości własne zapisano do pliku w celu sporządzenia wykresów ich przybliżeń za pomocą programu *gnuplot*. Co warte podkreślenia, obliczenia zostały wykonane dla liczb pojedynczej precyzji. Poniżej zaprezentowano otrzymane wyniki.

$$X = \begin{pmatrix}
0.352941 & 0.484573 & -0.475602 & 0.360911 & 0.464092 & -0.0101197 & -0.262004 \\
0.377935 & 0.171643 & -0.445369 & -0.463862 & -0.223418 & -0.271684 & 0.519426 \\
0.392221 & -0.310707 & -0.26868 & -0.14009 & -0.437904 & 0.612246 & -0.399236 \\
0.396889 & -0.540233 & -0.00402304 & 0.518766 & -0.0821773 & -0.506671 & -0.0014201 \\
0.392221 & -0.318923 & 0.263991 & -0.140751 & 0.58574 & 0.29737 & 0.401792 \\
0.377935 & 0.157866 & 0.447823 & -0.46407 & 0.118148 & -0.372767 & -0.521253 \\
0.352941 & 0.469791 & 0.482709 & 0.36147 & -0.423249 & 0.259115 & 0.262712
\end{pmatrix}$$

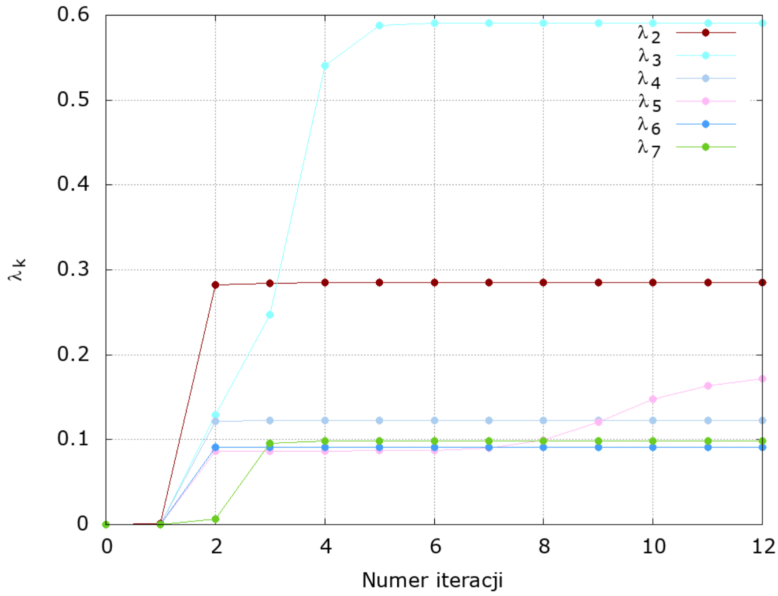
$$D =$$

$$\begin{pmatrix}
\mathbf{3.59586} & 8.9407e-07 & -2.98023e-07 & 9.83477e-07 & -1.2517e-06 & -4.23193e-06 & -6.19888e-06 \\
1.03563e-06 & \mathbf{0.28506} & -0.00698455 & -6.23241e-06 & 3.72529 & 0 & 0 \\
-2.90573e-07 & -0.00698464 & \mathbf{0.590373} & -6.85453e-07 & 1.04308e-07 & 2.23517e-08 & -1.11759e-07 \\
8.90344e-07 & -6.24917e-06 & -6.59376e-07 & \mathbf{0.122786} & -0.000102561 & -0.00029791 & -3.25032e-07 \\
-1.31503e-06 & 2.6077e-08 & 1.04308e-07 & -0.000102531 & \mathbf{0.168944} & -0.0381233 & -3.00277e-05 \\
-4.3558e-06 & -3.72529e-09 & 1.11759e-08 & -0.00029794 & -0.0381233 & \mathbf{0.0942673} & -5.72642e-05 \\
-6.31623e-06 & -2.04891e-08 & -1.41561e-07 & -3.21306e-07 & -3.0024e-05 & -5.72731e-05 & \mathbf{0.0981543}
\end{pmatrix}$$



Wykres 1: Kolejne przybliżenia wartości własnej λ_1 w funkcji numeru iteracji. Wykonano 12 iteracji (bez badania zbieżności).

Dla pozostałych wartości własnych sporządzono wykres (2) w celu zachowania czytelności.



Wykres 2: Kolejne przybliżenia znalezionych wartości własnych λ_k w funkcji numeru iteracji. Wykonano 12 iteracji (bez badania zbieżności).

3 Wnioski

Dowodem na poprawność zaimplementowanej metody jest postać macierzy D, która zawiera na diagonali wartości własne odpowiadające kolejnym wektorom własnym przechowywanym w kolumnach macierzy X. Pozostałe elementy powinny być w idealnym przypadku równe zeru, lecz przez wgląd na pojedynczą precyzję i niedokładność są tylko zbliżone do niego, jeśli spojrzy się na rząd tych liczb.

Wartości własne nie zostały znalezione w porządku ciągu malejącego. Szeregując je w ten sposób otrzymuje się ciąg

$$|\lambda_1| \geq |\lambda_3| \geq |\lambda_2| \geq |\lambda_5| \geq |\lambda_4| \geq |\lambda_7| \geq |\lambda_6|. \tag{6}$$

Oprócz dominującej wartości, kolejne sąsiednie pojawiły się na wyjściu w odwrotnej kolejności. Ich cechą wspólną jest stosunkowo szybkie osiągnięcie teoretycznej zbieżności, która jednak nie zawsze musi wystąpić (patrząc choćby na λ_5). Stąd w celu uzyskania bardziej przybliżonych rezultatów powinno się znacząco zwiększyć liczbę iteracji ponad aktualne 12 powtórzeń.