SPRAWOZDANIE - LABORATORIUM NR 5

Wyznaczanie wartości i wektorów własnych macierzy symetrycznej
metodą potęgową z redukcją Hotellinga

Tomasz Gajda
03.04.2020

1 Wstęp teoretyczny

W tym laboratorium zajmowaliśmy się wyznaczaniem wartości i wektorów własnych macierzy symetrycznej, korzystając z metody potęgowej z redukcją Hotellinga. Metoda potęgowa (inaczej iteracji wektorów) jest stosowana między innymi do znajdowania wartości własnej o największym module i odpowiadającego jej wektora własnego.

Metoda potęgowa polega na tym, że wykonujemy ciąg mnożeń przyjętego wektora startowego przez macierz, której dominującej wartości własnej i odpowiadającego wektora własnego poszukujemy. Ta procedura jest równoznaczna pomnożeniu wektora startowego przez macierz wyjściową podniesioną do potęgi równej liczbie iteracji.

Zakładamy, że wartości własne macierzy A spełniają warunek:

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geqslant ... \geqslant |\lambda_N|, \tag{1}$$

Zakładamy także, że istnieje baza złożona z wektorów własnych q_1, ..., q_N tej macierzy.

$$x = \alpha_1 q_1 + ... + \alpha_N q_N, \tag{2}$$

dlatego teraz:

$$Ax = (\sum_i \alpha_i q_i) = \sum_i \alpha_i A q_i = \sum_i \alpha_i \lambda_i q_i \tag{3}$$

i w konsekwencji

$$A^k x = \sum_i \alpha_i \lambda_i^k q_i = \lambda_1^k (\alpha_1 q_1 + \alpha_2 (\frac{\lambda_2}{\lambda_1})^k q_2 + ... + \alpha_N (\frac{\lambda_N}{\lambda_1})^k q_N \tag{4}$$

Z założenia że mamy tylko jedną dominującą wartość własną, $\left|\frac{\lambda_N}{\lambda_1}\right| < 1$, wynika, że zawarte w nawiasie wyrażenie dąży do $\alpha_1 q_1$ i dlatego wektory x$_k = A^k x$ dążą (gdy k$\rightarrow \infty$)do kierunku wektora własnego q$_1$, czyli wektora który odpowiada dominującej wartości własnej A.

By dokonać redukcji macierzy metodą Hotellinga musimy posłużyć się wzorem:

$$W_{k+1} = W_k - \lambda_k x_k x_k^T \tag{5}$$

2 Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

Zadanie z którym spotkaliśmy się na laboratorium dotyczyło wyznaczania wartości i wektorów własnych macierzy symetrycznej, korzystając z metody potęgowej Hotellinga.

Na początku mieliśmy wyznaczyć wartości i wektory własne znaną już metodą - korzystając z funkcji biblioteki Numerical Recipes. Rozpoczęliśmy od defniowania macierzy symetrycznej A o wymiarach 7x7, której elementy opisane były przepisem:

$$A_{ij} = \sqrt{(i+j)} \tag{6}$$

gdzie $i, j = 1, 2, ..., n$.

Następnie musieliśmy zredukować macierz do postaci trójdiagonalnej, korzystając z procedury z biblioteki Numerical Recipes:

$$tred2(A, n, d, e); \tag{7}$$

gdzie: A - macierz którą diagonalizujemy, d i e to wektory, w których zapisane są składowe diagonali i poddiagonali macierzy wynikowej.

W tym momencie naszą macierz A przekształciliśmy w postać iloczynu:

$$T = P^{-1}AP \tag{8}$$

Teraz korzystamy z procedury:

$$tqli(float^{*}d, float^{*}e, intn, float^{**}Z) \tag{9}$$

gdzie: d i e to wektory otrzymane w procedurze *tred2*, w których zapisane są składowe diagonali i poddiagonali macierzy wynikowej. Z macierzy **Z** możemy teraz otrzymać informacje na temat wektorów i wartości własnych macierzy T (które są takie jak macierzy A). Teraz chcemy powtórzyć to zadanie, lecz korzystając z innego sposobu - dokładniej metody redukcji Hotellinga.

Najpierw ustalamy dokładny numer poszukiwanej wartości własne $k = 1, 2, ..., n$. Dla danego k, deklarujemy wektor startowy $x_0 = [1, 1, 1, 1, 1, 1, 1]$ i w każdej iteracji obliczamy:

$$x_{i+1} = W_k x_i \tag{10}$$

$$\lambda_i = \frac{x_{i+1}^T x_i}{x_i^T x_i} \tag{11}$$

$$x_{i+1} = \frac{x_{i+1}}{||x_{i+1}||_2} \tag{12}$$

$$x_i = x_{i+1} \tag{13}$$

Wykonujemy 8 iteracji tych operacji. Gdy przejdziemy przez wszystkie iteracje, przeprowadzamy redukcję macierzy:

$$W_{k+1} = W_k - \lambda_k x_k x_k^T \tag{14}$$

Korzystamy z macierzy W_{k+1} do znalezienia kolejnej wartości własnej: λ_{k+1}, przy założeniu, że

$$W_1 = A \tag{15}$$

2.2 Wyniki

Wyniki programu prezentują się w następujący sposób. Jest to 7 wartości własnych macierzy A, uzyskanych za pomocą funkcji zawartych w bibliotece Numerical Recipes oraz 7 wartości własnych macierzy A, uzyskanych za pomocą metody potęgowej z redukcją Hotellinga.

Najpierw zobaczmy wartości własne otrzymane dzięki bibliotece NR:

$$
\begin{aligned}
&\lambda_1 = -4.02198e-07,\\
&\lambda_2 = 4.43579e-07,\\
&\lambda_3 = -7.10793e-06,\\
&\lambda_4 = -0.00033598,\\
&\lambda_5 = -0.0133178,\\
&\lambda_6 = -0.712341,\\
&\lambda_7 = 19.7862
\end{aligned}
$$

Teraz dla porównania zobaczmy wartości własne otrzymane za pomocą metody potęgowej z redukcją Hotellinga:

$$
\begin{aligned}
&\lambda_1 = 19.7862,\\
&\lambda_2 = -0.71234,\\
&\lambda_3 = -0.0133172,\\
&\lambda_4 = -0.00033581,\\
&\lambda_5 = -6.55765e-006,\\
&\lambda_6 = 8.71798e-007,\\
&\lambda_7 = -5.77264e-008
\end{aligned}
$$

Pierwsze trzy wyniki odbiegają od wartości, których oczekiwaliśmy - spowodowane jest to różnicą w kolejności operacji matematycznych. Różne podejścia odpowiadają innym zaokrągleniom zmiennoprzecinkowym. Dlatego też najmniejsze wartości własne są wartościami najmniej wiarygodnymi przez to że błąd zapisu liczb zmiennoprzecinkowych ma na nie bardzo wielki wpływ. Wartości, które otrzymaliśmy są zbliżone do wartości, które otrzymaliśmy korzystając z biblioteki Numerical Recipes.

3 Wnioski

Istnieje wiele sposobów na otrzymanie wartości własnych macierzy. Wyniki uzyskane dzięki metodzie potęgowej są podobne do sprawdzonych już wyników otrzymanych za pomocą metod tred2 i tqli - oprócz trzech pierwszych wartości. Jako że metoda potęgowa to metoda, której dokładność wzrasta wraz z ilością iteracji, można pomyśleć że to właśnie ich mała ilość jest problemem - niestety jednak tak nie jest. Mimo zmiany ilości iteracji na większą, ostatnie trzy wartości pozostają odległe do poprawnych wartości. I nie jest to mała odlegość, ponieważ pierwsza wartość różni się między metodami o cały rząd wielkości! Może to być spowodowane wcześniej wspomnianymi błędami zapisu liczb zmiennoprzecinkowych.

Jeśli zaprzestaniemy normowania wektora w każdej iteracji, program już w obliczaniu drugiej wartości własnej wychodzi poza zakres zmiennej float, zwracając NaN. Normalizacja ma więc na celu upewnienie się, że nie wyjdziemy poza zakres zmiennej.