Cvičení 6 - zadání a řešení úloh

Základy numerické matematiky - NMNM201 Verze z 10. listopadu 2023

1 Rayleighův podíl (Rayleigh quotient)

Pro hermitovskou matici $M \in \mathbb{C}^{n\times n}$ a nenulový vektor $x \in \mathbb{C}^n$ definujeme Rayleighův podíl

$$R(M, x) = \frac{x^* M x}{x^* x}.$$

Úloha 1. *Nechť $M \in \mathbb{C}^{n\times n}$ je hermitovská. Ukažte následující vlastnosti:*

(i) $R(\alpha M, \beta x) = \alpha R(M, x)$ *pro každé* α, $\beta \in \mathbb{C}$, $\beta \neq 0$.

(ii) $R(M - \alpha I, x) = R(M, x) - \alpha$ *pro každé* $\alpha \in \mathbb{C}$.

(iii) Nechť $Mv = \lambda v$ *pro nějaký nenulový* $v \in \mathbb{C}^n$. *Potom* $R(M, v) = \lambda$.

(iv) Nechť $\lambda_{\min}$ *a* $\lambda_{\max}$ *jsou nejmenší, respektive největší vlastní číslo matice* M. *Ukažte, že*

$$R(M, x) \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}] \qquad \forall x \in \mathbb{C}^n.$$

Proč požadujeme, aby matice M byla hermitovská (a nestačí například diagonalizovatelná)?

(v) (navíc) Nechť jsou vlastní čísla M seřazena sestupně a největší je jednonásobné, tedy

$$\lambda_1 > \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n.$$

Nechť v_1 je vlastní vektor příslušný λ_1. Ukažte, že

$$R(M, x) \in [\lambda_n, \lambda_2] \qquad \forall x \in v_1^{\perp}.$$

(vi) (navíc) $R(M, x) = \underset{\mu\in\mathbb{R}}{\arg\min} \|(M - \mu I)x\|^2$.

2 Mocninná metoda

Ne vždy je potřeba (a někdy to není ani technicky možné) nalézt celé spektrum dané matice. Cílem mocninné metody je nalezení jednoho vlastního páru (vlastního čísla a vlastního vektoru) matice.

Nechť $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ je diagonalizovatelná matice (tj. má n lineárně nezávislých vlastních vektorů, které tvoří bázi prostoru $\mathbb{C}^n$),

$$A = S\Lambda S^{-1},$$

kde pro $\Lambda = \operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$ jsou vlastní čísla seřazena sestupně, tj.

$$|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \ldots \geq |\lambda_n|,$$

a matice $S = [s_1, \ldots, s_n]$ je tvořena příslušnými normalizovanými vlastními vektory.

Pro jednoduchost předpokládejme, že $|\lambda_1|$ je dominantní vlastní číslo, tj. $|\lambda_1| > |\lambda_2|$.

Nechť v je nenulový startovací vektor. Mocninnou metodu pak můžeme zapsat následujícím algoritmem:

Algoritmus 1 Mocninná metoda

Input: A, v

$v_0 = v/\|v\|$

for $k = 1, \ldots$ **do**

$w = Av_{k-1}$

$v_k = w/\|w\|$

$\mu_k = v_k^* A v_k$

end for

Úloha 2. *Naprogramujte mocninnou metodu na základě Algoritmu 1 do předpřipraveného skriptu* `power_method.m`*. Poté spusťte* `power_method_test.m` *pro různé vstupní matice a počáteční vektory (připravené v komentáři ve skriptu, nebo vlastní). K čemu a jak rychle mocninná metoda konverguje? Všímejte si konvergence aproximace vlastního čísla i vektoru.*

Návodné otázky:

- *Dostali jsme vlastní číslo a vlastní vektor který jsme měli?*
- *Jak je rychlost konvergence ovlivněna volbou vlastních čísel?*
- *Jak je rychlost konvergence ovlivněna volbou počátečního vektoru? Co znamená a co se stane, když je v počátečním vektoru 0?*
- *Co se děje, je-li nějaké vlastní číslo záporné? Konverguje metoda i pro záporné dominantní vlastní číslo?*
- *Co se děje, je-li více čísel dominantních, tj. např.* $|\lambda_1| = |\lambda_2|$*?*

Řešení. Pro porozumění, co se děje s odhadem λ je klíčové si uvědomit, že je-li $x = \sum \alpha_i v_i$, kde v_i jsou vlastní vektory odpovídající λ_i, pak

$$x^T A x = \frac{\sum \lambda_i \alpha_i^2}{\sum \alpha_i^2}, \tag{1}$$

tj. Rayleighův podíl x odpovídá váženému průměru vlastních čísel, kde váhy jsou čtverce složek při rozkladu x do báze vlastních vektorů.

K jednotlivým bodům:

- Čím blíže jsou dominantní a druhé největší číslo k sobě, tím pomalejší je konvergence.
- Když je složka vektoru odpovídající dominantnímu vl. číslu relativně malá, zpožďuje to konvergenci. Když je nějaká složka nulová, metoda příslušné vlastní číslo ignoruje.
- Složky vektoru odpovídající záporným vlastním číslům vždy oscilují. To ovšem neznamená, že by úloha nekonvergovala. Je-li dominantní číslo záporné, konverguje vektor k vlastnímu směru, jenom se mění jeho směr (což ničemu nevadí).
- Zde je nutno rozlišit případy, kdy 1) $\lambda_1 = \lambda_2$ a 2) $\lambda_1 = -\lambda_2$.

  1) λ konverguje k λ_1, vlastní vektory příslušné λ_1 tvoří dvoudimenzionální prostor. Vektor x konverguje k vlastnímu vektoru danému počátečním poměrem mezi příslušnými složkami vektoru.

  2) λ se blíží k číslu danému vzorcem (1), tedy k něčemu mezi λ_1 a λ_2. Vektor nekonverguje k vlastnímu vektoru (pokud předpokládáme nenulové složky počátečního vektoru).

□

Úloha 3. *Dovedete nastavit vstupy tak, aby metoda nejdříve směrovala k* (λ_2, q_2)*, a až po delší době zkonvergovala k* (λ_1, q_1)*? Dovedete ukázat bizarnější nebo zajímavější příklad průběhu konvergence?*

Řešení. Stačí dát složku příslušnou dominantnímu číslu řádově menší než složku příslušnou subdominantnímu. Jde vytvořit i celý řetěz takových zdánlivých konvergencí (pěkně je to vidět na grafu vývoje λ). □

Úloha 4. *Změní se odpověď na některou z otázek v Úloze 2, když budeme uvažovat skutečný praktický výpočet v konečné aritmetice (tj. když nebudeme vše počítat vzhledem k bázi vlastních vektorů a matice* `A` *nebude diagonální)?*

Řešení. Pro matice, jejichž některé vlastní vektory jsou skoro rovnoběžné, mohou nastat problémy se zaokrouhlovacími chybami. Pro normální matice ale chování bude odpovídat našemu experimentu, s výjimkou případu, kdy dáváme 0 do složky startovacího vektoru odpovídající dominantnímu vlastnímu číslu. Tady nám zaokrouhlovací chyby pravděpodobně pomohou k tomu, aby metoda nakonec konvergovala správně. □

Úloha 5. *Co se změní, když matice Λ není diagonální? (Když původní matice A není diagonalizovatelná.) Všímejte si konvergence aproximace vektoru i vlastního čísla.*

Řešení. Mj. lze pozorovat: V rámci podprostoru odpovídajícímu Jordanovu bloku pro kladné vlastní číslo se aproximace vektoru postupně přesouvá od zobecněných vlastních vektorů k vlastnímu vektoru (pro záporné vlastní číslo je chování složitější). Tedy máme-li místo dominantního vektoru celý Jordanův blok, budeme konvergovat k nezobecněnému vlastnímu vektoru, a aproximace vlastního čísla se bude nadhodnocovat (pro kladné číslo). Jordanův blok příslušný subdominantnímu vlastnímu číslu může dočasně "přebít"dominantní vlastní číslo s násobností 1 (anebo alespoň zpomaluje konvergenci). □

3 Inverzní iterace

Úloha 6. *Nechť A je matice s vlastními čísly λ_j a odpovídajícími vlastními vektory v_j.*

1. *Nechť $\mu \in \mathbb{C}$ a $(A - \mu I)$ je regulární. Ukažte, že vlastní čísla a vlastní vektory matice $(A - \mu I)^{-1}$ jsou rovny $(\lambda_j - \mu)^{-1}$ a v_j.*
2. *Odvoďte takzvanou inverzní iteraci (*inverse iteration*) jako mocninnou metodu aplikovanou na matici $(A - \mu I)^{-1}$. K jakému číslu bude v obecném případě metoda konvergovat.*
3. *Naprogramujte inverse iteration v MATLABu (doplňte* `inverse_iteration.m`*) pro aproximaci vlastních čísel matice A a ověřte odpověď na předchozí otázku numericky s využitím skriptu* `run_inverse_iteration.m`*.*

Poznámka: Opakovaný výpočet $(A-\mu I)^{-1}v_k$ v MATLABu buď řešte jako `(A-mu*eye(n))\v`*, nebo jedním LU-rozkladem matice a řešením trojúhelníkových soustav.*

Řešení.

```
function [lambda, v, history] = inverse_iteration(A,v,mu,niter)
matrix = A - mu*eye(size(A));
history = zeros(1,niter);
for k = 1:niter
    v = matrix\v;
    v = v/norm(v);
    history(k) = v'*(A*v);
end
lambda = history(end);
```
□