Cvičení 7 - zadání a řešení úloh

Základy numerické matematiky - NMNM201 Verze z 24. listopadu 2023

1 Metody Krylovových podprostorů

1.1 Vlastnosti Krylovových podprostorů

Definice 1 (Krylovův podprostor)**.** *Nechť* $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ *a* $v \in \mathbb{C}^n$*. Posloupnost* $v, Av, A^2v, \ldots$ *nazýváme Krylovova posloupnost, a podprostor*

$$\mathcal{K}_k(A, v) \coloneqq \operatorname{span}\{v,\ Av,\ \ldots,\ A^{k-1}v\},$$

kde $k \le n$*,* k*-tý Krylovův podprostor.*

Úloha 1. *Nechť máme matici*

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & & 1 \\ 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

a uvažujme jako počáteční vektor v *nějaký kanonický vektor* $v = e_j$*,* $j \in 1, 2, \ldots, n$*. Ukažte, jak vypadá Krylovův podprostor* $\mathcal{K}_k(A, v)$*. Pokud bychom na* $\mathcal{K}_k(A, v)$ *aproximovali nějaký vektor* w *jeho ortogonální projekcí, jak bude vypadat? Jaká bude chyba a jak se bude vyvíjet pro rostoucí* k*?*

Řešení. Zřejmě $Ae_j = e_j + e_{j+1}$ pro $1 \le j < n$, případně $Ae_n = e_n + e_1$. Předpokládáme-li pro jednoduchost značení, že $j + k \le n$, pak

$$\mathcal{K}_k(A, e_j) = \operatorname{span}\{e_j, e_{j+1}, \ldots e_{j+k-1}\}.$$

Pro $w = (w_1, w_2, \ldots, w_n)^T$, je

$$w|_{\mathcal{K}_k(A,e_j)} = (0, \ldots, 0, w_j, \ldots, w_{j+k-1}, 0, \ldots, 0)^T$$

a

$$\left\| w - w|_{\mathcal{K}_k(A,e_j)} \right\|^2 = \sum_{i=1}^{j-1} w_i^2 + \sum_{i=j+k}^{n} w_i^2.$$

□

1.2 Arnoldiho metoda

Arnoldiho algoritmus počítá ortogonální bázi Krylovova prostoru. Výsledkem této ortogonalizace jsou matice:

$$V_k = [v_1, \ldots, v_k], \qquad H_k = \begin{bmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & \cdots & h_{1,k} \\ h_{2,1} & h_{2,2} & \cdots & h_{2,k} \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & h_{k,k-1} & h_{k,k} \end{bmatrix}.$$

Matce splňují následující rovnici:

$$AV_k = V_k H_k + h_{k+1,k} v_{k+1} e_k^T$$

Matici H_k nazýváme *horní Hessenbergovou* maticí. Její vlastní čísla nazýváme *Ritzova čísla* a vektory $V_k y$, kde y jsou vlastní vektory H_k, nazýváme *Ritzovy vektory*. Ritzova čísla jsou aproximací vlastních čísel matice A (ne všech, stále se jedná o metodu částečného problému vlastních čísel) a Ritzovy vektory jsou aproximací vlastních vektorů matice A.

Co je tedy *Arnodiho metoda*? Jedná se o metodu využívající Arnoldiho algoritmus k výpočtu matice V_k, H_k a vlastních čísel a vlastních vektorů matice H_k. Ritzova čísla a vektory jsou pak aproximací vlastních čísel a vektorů matice A.

Pro obecnou nesymetrickou matici je problém říci cokoliv o blízkosti spočtené aproximace μ k nejbližšímu vlastnímu číslu matice A. Víme jen, že platí vztah:

$$\|Ax - \mu x\| = h_{k+1,k} \left| e_k^T y \right|,$$

kde y je vlastní vektor matice H_k příslušný k vlastnímu číslu μ a $x = V_k y$.

Úloha 2. *Spusťte skript* `baze_krylovova_prostoru.m` *a spočtete bázi Krylovova prostoru pomocí Gram-Schmidtova procesu. Pozorujte ztrátu ortogonality i přesnost rozkladu použitím CGS, MGS a ICGS. Jak se změní ztráta ortogonality a přesnost výpočtu použijeme-li Arnoldiho metodu* `Arnoldicgs.m` *nebo* `Arnoldimgs.m`*?*

Úloha 3. *Zvolme náhodnou matici větších rozměru a náhodný vektor odpovídajícího rozměru. Doplňte skript* `Arnoldi_pro_vetsi_matici.m`*, kde spočteme bázi Krylovova prostoru pomocí Arnoldiho metody* `Arnoldicgs.m`*. Vykreslete ztrátu ortogonality $\|I - V_k^T V_k\|$ pro $k = 1, 2, \ldots, n$ v logaritmickém měřítku. Jak se bude vyvíjet ztráta ortogonality, když použijeme* `Arnoldimgs.m`*?*

1.3 Lanczosova metoda

Jedná se o Arnoldiho metodu aplikovanou na hermitovské matice A. Z Arnoldiho algoritmu aplikovaného na A dostaneme

$$H_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_k \\ & & & \beta_k & \alpha_k \end{bmatrix}.$$

Horní Hessenbergova matice je tedy *tridiagonální* maticí a značíme ji T_k. Dále platí vztah:

$$AV_k = V_k T_k + \beta_{k+1} v_{k+1} e_k^T.$$

Ortogonální bázi Krylovova prostoru lze tak počítat tříčlennou rekurencí. Výhodou je i to, že díky symetrii lze odhadnout vzdálenost vlastního čísla μ matice T_k od nejbližšího vlastního čísla matice A vztahem:

$$\min_{\lambda \in \rho(A)} |\lambda - \mu| \leq \beta_{k+1} \frac{\left| e_k^T y \right|}{\|x\|},$$

kde y je vlastní vektor matice T_k příslušný k vlastnímu číslu μ a $x = V_k y$.

Úloha 4. *Ve skriptu* `baze_pro_symetrickou_matici` *proveďte Arnoldiho algoritmus pro symetrickou matici a sledujte velikost prvků v pravém horním rohu matice H_k, které by měly být nulové.*

2 Vlastnosti Jacobiho matic

Reálnou symetrickou tridiagonální matici s kladnými prvky na vedlejších diagonálách

$$J_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & \\ & \beta_3 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_k \\ & & & \beta_k & \alpha_k \end{bmatrix}, \qquad \beta_i > 0, \quad i = 2, \dots, k,$$

nazveme Jacobiho maticí.

Úloha 5. *Ukažte, že vlastní vektory Jacobiho matic mají nenulovou první a poslední složku.*

Řešení. Nechť (λ, v), $v = (v_1, v_2, \dots, v_k)^T \neq 0$ jsou vlastní číslo a vlastní vektor matice J_k. Rozepíšeme-li si vztah $(J_k - \lambda I)v = 0$, dostáváme z první rovnice

$$(\alpha_1 - \lambda)v_1 + \beta_2 v_2 = 0.$$

Nechť $v_1 = 0$, pak tedy i $v_2 = 0$ (protože $\beta_2 > 0$). Dosazením do druhé rovnice

$$0 = \beta_2 v_1 + (\alpha_2 - \lambda)v_2 + \beta_3 v_3 = 0 + 0 + \beta_3 v_3,$$

a tedy i $v_3 = 0$. Podobně ukážeme, že $v_i = 0$ pro $i = 4, 5, \dots, k$, což je spor s $v \neq 0$.
Důkaz tvrzení o nenulové poslední složce se provede analogicky, s tím, že začneme s poslední rovnicí a postupujeme k první. □

Úloha 6. *Uvažujme charakteristické polynomy Jacobiho matice J_k,*

$$\chi_0(\lambda) \equiv 1, \quad \chi_k(\lambda) = \det(\lambda I - J_k), \quad k = 1, 2, \dots$$

Ukažte, že platí rekurence

$$\chi_0 = 1, \quad \chi_1(\lambda) = \lambda - \alpha_1, \quad \chi_k(\lambda) = (\lambda - \alpha_k)\chi_{k-1}(\lambda) - \beta_k^2\, \chi_{k-2}(\lambda), \quad k = 2, 3, \dots \tag{1}$$

Řešení. Pro charakteristické polynomy χ_1 matice J_1 a χ_2 matice J_2 postupně dostaneme

$$\begin{aligned} \chi_1(\lambda) &= \lambda - \alpha_1 = (\lambda - \alpha_1)\chi_0(\lambda) \\ \chi_2(\lambda) &= (\lambda - \alpha_1)(\lambda - \alpha_2) - \beta_2^2 = (\lambda - \alpha_2)\chi_1(\lambda) - \beta_2^2\, \chi_0(\lambda). \end{aligned}$$

Rozvojem determinantu $\lambda I - J_k$ podle posledního sloupce $k \geq 3$ dostaneme

$$\begin{aligned} \chi_k(\lambda) &= \det \begin{bmatrix} \lambda I - J_{k-2} & -\beta_{k-1} & 0 \\ -\beta_{k-1} & \lambda - \alpha_{k-1} & -\beta_k \\ 0 & -\beta_k & \lambda - \alpha_k \end{bmatrix} \\ &= (\lambda - \alpha_k) \det(\lambda I - J_{k-1}) + \beta_k \det \begin{bmatrix} \lambda I - J_{k-2} & -\beta_{k-1} \\ 0 & -\beta_k \end{bmatrix} \\ &= (\lambda - \alpha_k)\chi_{k-1}(\lambda) + \beta_k(-\beta_k)\, \det(\lambda I - J_{k-2}) \\ &= (\lambda - \alpha_k)\chi_{k-1}(\lambda) - \beta_k^2\, \chi_{k-2}(\lambda). \end{aligned}$$

□

Úloha 7. *Ukažte pomocí rekurence* (1)*, že dvě po sobě jdoucí Jacobiho matice nemohou mít stejná vlastni čísla.*

Řešení. Je-li λ kořenem polynomu χ_k a χ_{k-1}, je i kořenem $\chi_{k-2}, \dots, \chi_0$, což je ve sporu s $\chi_0 = 1$. □