Cvičení 7 - zadání pro studenty

Základy numerické matematiky - NMNM201 Verze z 13. listopadu 2024

1 Rayleighův podíl (Rayleigh quotient)

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

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

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

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

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

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

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

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

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

(v) Nechť jsou vlastní čísla A 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*

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

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

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 $\mathbb{C}^n$),

$$A = SDS^{-1},$$

kde pro $D = \operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$ 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 λ_1 je dominantní vlastní číslo, tj. $|\lambda_1| > |\lambda_2|$ a v je nenulový "startovací" (počáteční) vektor. Mocninnou metodu pak můžeme zapsat jako Algoritmus 1.

Když chceme měřit rychlost konvergence, lze se dívat buď na *chybu aproximace vlastního vektoru* $\|s_1 - v_k\|$ nebo na *chybu aproximace vlastního čísla* $\|\lambda_1 - \mu_k\|$ nebo na *reziduum aproximace* $\|Av_k - \mu_k v_k\|$. V praxi ale nelze měřit ani jednu z chyb (nemáme k dispozici vlastní pár (λ_1, s_1), o tom to celé je), takže se musíme spokojit s reziduem. Ale pro naše zjednodušené a ilustrativní příklady se můžeme dívat jak na chybu tak na reziduum.

Algoritmus 1 Mocninná metoda

Vstup: 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` *a poté spusťte* `power_method_test.m` *pro vstupní data*

$$A = \begin{bmatrix} 4 & & & \\ & 3 & & \\ & & 2 & \\ & & & 1 \end{bmatrix} \quad \text{a} \quad v = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{1}$$

K čemu a jak rychle mocninná metoda konverguje? Odhadněte předpokládanou velikost chyby approximace vlastního vektoru $\|s_1 - v_k\|$ po 70 iteracích na základě analýzy konergence mocninné metody z přednášky a porovnejte s výsledky v MATLABu.

Úloha 3. *V Úloze 2 naše aproximace v_k dominantního vlastního vektoru s_1 dosáhla chyby $\approx 1.8 \times 10^{-9}$ během prvních 70 iterací. Změňte matici A tak, aby byla chyba $\|s_1 - v_k\|$ na stejné úrovni již po 35 iteracích (se stejným počátečním vektorem $v_0 = [1, 1, 1, 1]^T$). [Hint]: Zkuste nejprve změnit jen druhý diagonální prvek A z (1). Pro pomocný výpočet se může hodit MATLAB funkce* `nthroot(x,n)`.

Úloha 4. *Mějme pět diagonálních matic*

$$A_1 = \begin{bmatrix} 4 & & & \\ & 4 & & \\ & & 2 & \\ & & & 1 \end{bmatrix}, \; A_2 = \begin{bmatrix} 4 & & & \\ & 3.9 & & \\ & & 3.8 & \\ & & & 3.7 \end{bmatrix}, \; A_3 = \begin{bmatrix} -4 & & & \\ & 3 & & \\ & & 2 & \\ & & & 1 \end{bmatrix},$$

$$A_4 = \begin{bmatrix} 4 & & & \\ & -3 & & \\ & & 2 & \\ & & & 1 \end{bmatrix}, \; A_5 = \begin{bmatrix} 4 & & & \\ & 3.9 & & \\ & & 2 & \\ & & & 1 \end{bmatrix},$$

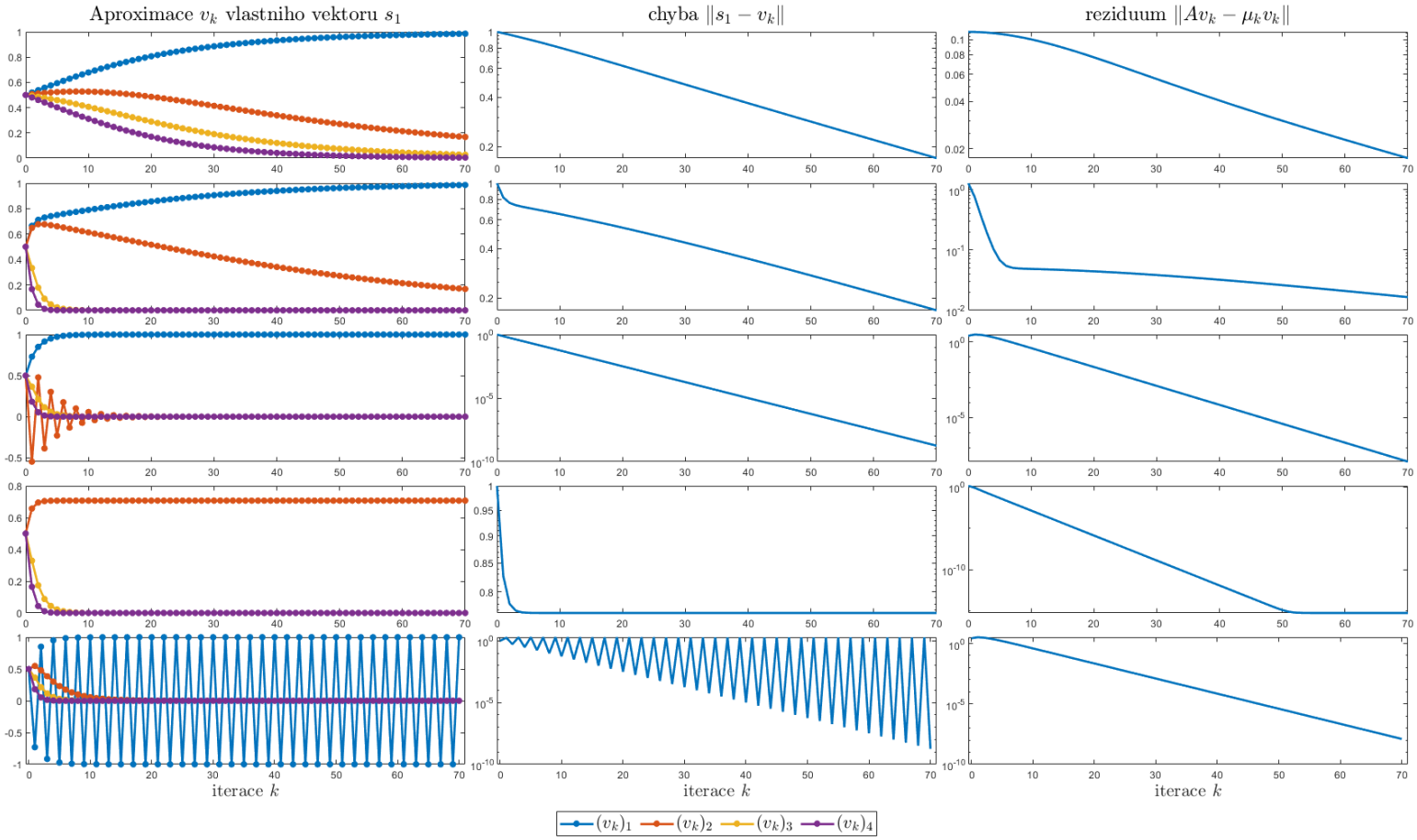
na které použijeme mocninou metodu (Algoritmus 1) s počátečním vektorem $v_0 = [1, 1, 1, 1]^T$. Rozmyslete si jak budou vypadat grafy konvergence mocninné metody pro složky vektoru $v_k \to s_1$ a chyba $\|s_1 - v_k\|$. Na základě těchto úvah přiřaďte matice $A_1, \ldots, A_5$ k jednotlivým řádkům Obrázku 1.

Úloha 5.

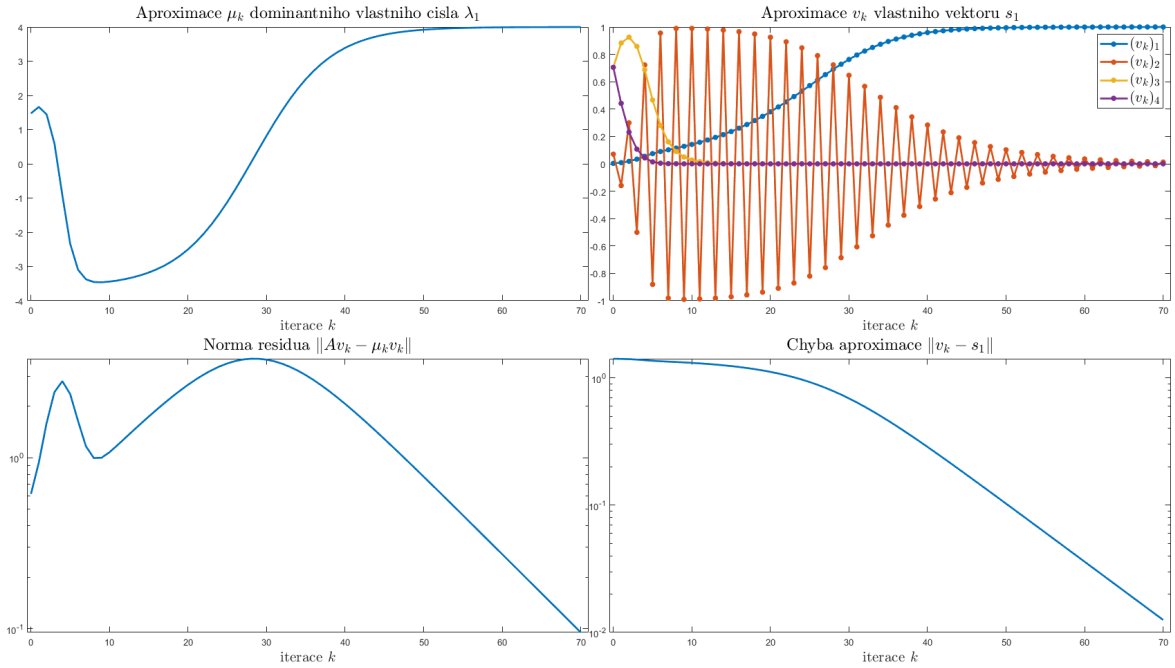
1. *Zkontrolujte si řešení Úlohy 3 pomocí scriptu* `power_method_test.m`.
2. *[Navíc]: Na druhém řádku Obrázku 1 chyba i reziduum konvergují ve dvou různých ale stálých režimech - nejprve rychleji (prvních cca pět iterací) a posléze výrazně pomaleji (od desáté iterace dále). Dokážete vysvětlit proč tomu tak je pro chybu $\|s_1 - v_k\|$? Zkonstruujte příklady, kde je tento rozdíl ještě více extrémní (tj. rozdíl mezi rychlostí konvergence je větší).*

Úloha 6.

1. *Pro matici A v (1) najděte nový počáteční vektor $\tilde{v}_0$ tak aby mocninná metoda konvergovala až k druhému dominantnímu vlastnímu páru, tj. $v_k \to s_2$.*



Obrázek 1: Aproximace dominantního vlastního vektoru s_1 pomocí mocninné metody pro pět různých diagonálních matic $A_1, \ldots, A_5$ s použitím počátečního vektoru $v_0 = [1, 1, 1, 1]^T$. Ve čtvrtém řádku v prvním sloupci jsou složky $(v_k)_1$ a $(v_k)_2$ prakticky totožné, takže se na grafu překrývají a jsou vidět pouze $(v_k)_2$.



Obrázek 2: Aproximace dominantního vlastního vektoru s_1 pomocí mocninné metody.

2. *Na základě v_0 a $\tilde{v}_0$ najděte třetí počáteční vektor $\hat{v}_0$, pro který mocninná metoda nejprve zdánlivě konverguje k s_2 (prvních deset iterací) ale nakonec zkonverguje k s_1 (po sedmdesáti iteracích).*

   [Hint]: Víme-li jak najít počáteční vektor tak aby $v_k \to s_1$ nebo naopak $v_k \to s_2$, naším cílem se stává skloubit tyto dva jevy dohromady a tudíž je rozumné hledat $\hat{v}_0$ jako nějakou vhodnou kombinaci v_0 a $\tilde{v}_0$. Zkombinujme tento nápad s analýzou mocninné metody z přednášky.

3. *[Navíc]: Najděte matici a počáteční vektor, pro které mocninná metoda konverguje kvalitativně podobně jako na Obrázku 2.*

3 Inverzní iterace

Úloha 7. *Nechť A je matice s vlastními čísly λ_j a odpovídajícími vlastními vektory s_j.*

1. *Nechť $\alpha \in \mathbb{C}$ a $(A - \alpha I)$ je regulární. Ukažte, že vlastní čísla a vlastní vektory matice $(A - \alpha I)^{-1}$ jsou rovny $(\lambda_j - \alpha)^{-1}$ a s_j.*

2. *Zvolme $\alpha = 1.1$ a matici A jako v (1). K jakému vlastnímu páru bude konvergovat mocninná metoda pro matici $(A - \alpha I)^{-1}$ a počáteční vektor $v_0 = [1, 1, 1, 1]^T$? Zobecněte pro libovolnou matici A a skalár $\alpha \in \mathbb{C}$, který nepatří do jejího spektra.*

Úloha 8. *[Navíc]: Pro danou matici A, skalár α a počáteční vektor v_0 naprogramujte v MATLABu funkci, která na základě Úlohy 7 iterativně aproximuje vlastní vektor s matice A odpovídající vlastnímu číslu λ matice A, které "je nejblíže α", tj. pro které je $|\lambda - \alpha|$ minimální.*

Tato metoda se jmenuje Inverzní iterace (inverse iteration).

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