Cvičení 8 - zadání a řešení úloh

Základy numerické matematiky - NMNM201 Verze z 20. listopadu 2024

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 $k \leq n$, 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 $1 \leq j < n$, případně $Ae_n = e_n + e_1$. Máme tedy

$$\mathcal{K}_k(A, e_j) = \begin{cases} \operatorname{span}\{e_j, e_{j+1}, \ldots, e_{j+k-1}\} & j + k - 1 \leq n, \\ \operatorname{span}\{e_j, e_{j+1}, \ldots, e_n, e_1, \ldots, e_{j+k-1-n}\} & j + k - 1 > n \text{ a } k \leq n. \end{cases}$$

Pro $w = (w_1, w_2, \ldots, w_n)^\top$ označme w^k ortogonální projekci w na $\mathcal{K}_k(A, e_j)$. Pro w^k zřejmě platí

$$w^k = \begin{cases} (0, \ldots, 0, w_j, \ldots, w_{j+k-1}, 0, \ldots, 0)^\top & j + k - 1 \leq n, \\ (w_1, \ldots, w_{j+k-1-n}, 0, \ldots, 0, w_j, \ldots, w_n)^\top & j + k - 1 > n \text{ a } k \leq n \end{cases}$$

a tedy

$$\left\|w - w^k\right\|^2 = \begin{cases} \sum_{i=1}^{j-1} |w_i|^2 + \sum_{i=j+k}^{n} |w_i|^2 & j + k - 1 \leq n, \\ \sum_{i=j+k-n}^{j-1} |w_i|^2 & j + k - 1 > n \text{ a } k \leq n. \end{cases}$$

Vidíme tedy, že $\|w - w^k\|$ klesá monotónně s rostoucím k a $\|w - w^n\| = 0$. □

1.2 Arnoldiho metoda

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

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

Matice splňují následující rovnici:

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

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:

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

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

Úloha 2. *Doplňte a 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`*?*

Řešení. Matice, která má jako sloupce 10 vektorů Krylovovy posloupnosti je numericky singulární. Má jedno dominantní sing. číslo, pak je velký propad. MATLAB určuje hodnost zhruba 5.

Pro tuto matici nefunguje žádný QR rozklad, problémem není ztráta ortogonality, ale prostě to, že ta posloupnost je k ničemu a nedaří se zachovat vztah $A = QR$.

Jediné řešení je použití Arnoldiho algoritmu; pak už není mezi `Arnoldicgs` a `Arnoldimgs` zásadní rozdíl. □

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 $\|I - V_k^\top V_k\|$ pro $k = 1, 2, \ldots, n$ v logaritmickém měřítku (příkaz* `semilogy`*). Jak se bude vyvíjet ztráta ortogonality, když použijeme* `Arnoldimgs.m`*?*

1.3 Lanczosova metoda

Jedná se o Arnoldiho metodu aplikovanou na hermitovské matice A. Protože $H_k = V_k^* A V_k$, je H_k také hermitovská. 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:

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

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:

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

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

Řešení. Prvky nad první superdiagonálou by měly být nulové, ale nejsou. Jejich hodnoty jsou sice poměrně malé, ale pokud odpovídající ortogonalizaci zanedbáme, což je myšlenka Lanczosova algoritmu, tak dochází k často výrazné ztrátě ortogonality. □

Úloha 5 (Navíc)**.** *Pro symetrickou matici z předchozí úlohy spusťte Lanczosův algoritmus (implementovaný v* `lanc.m`*) a sledujte ztrátu ortogonality, podobně jako v Úloze 3.*

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

Řešení. Nechť $\lambda \in \mathbb{R}$, $v = (v_1, v_2, \dots, v_k)^\top \neq 0$ 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 7. *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

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

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

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

□

Úloha 8. *Ukažte pomocí rekurence* (1)*, že dvě po sobě jdoucí Jacobiho matice nemohou mít stejná vlastní čísla.*

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