NI-MPI přednáška 8handout
Problémy, návrhy apod. hlaste v GitLabu.
Verze souboru: 2024-11-11 08:33.

12 Přímé a iterační metody obecně

Přímé metody

Přímá metoda počítá řešení nějakého problému v konečném počtu kroků tak, že v teoretické absolutní přesnosti dává (přesné) řešení.

Příklady z lineární algebry:

- Gaussova eliminační metoda (GEM),
- metoda hledání inverze matice pomocí GEM,
- ...pomocí rozkladů matic (Choleského, LU, QR, ...),
- ...

Obecná myšlenka iteračních metod

Iterační metody hledají přibližná řešení matematických problémů tak, že konstruují posloupnost přibližných „řešení“:

$$x_0,\ x_1,\ x_2, \dots$$

Každé další přibližné „řešení“ je odvozeno z předchozího:

$$x_k = T(x_{k-1}),$$

pro $k > 0$ a zatím blíže neurčené zobrazení T.

Zobrazení T je voleno tak, aby posloupnost $(x_k)_{k=0}^{\infty}$ **měla limitu**[1], **která je skutečným řešením** dané úlohy.

Poznámka: Pokud je T neměnné pro všechny iterace k, metoda se nazývá **stacionární**.

13 Vlastní čísla a vektory: připomenutí

Vlastní čísla a vektory

- Komplexní číslo λ nazýváme vlastním číslem matice $M \in \mathbb{C}^{n,n}$, právě když existuje nenulový vektor $\mathbf{u} \in \mathbb{C}^n$ splňující rovnici

  $$M\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}.$$

  Takovýto vektor $\mathbf{u}$ pak nazýváme vlastním vektorem matice M příslušejícím k vlastnímu číslu λ.

[1] v nějaké normě

- Všechny vlastní vektory matice M příslušející vlastnímu číslu λ spolu s nulovým vektorem tvoří podprostor $\ker(M - \lambda E)$.

- Vlastní čísla matice M jsou právě kořeny charakteristického polynomu matice M, tj. polynomu

$$p_M(\lambda) := \det(M - \lambda E).$$

Každá takováto matice M má proto nejvýše n různých komplexních vlastních čísel.

Vlastní čísla a vektory

- Hledat kořeny charakteristického polynomu „velkého“ stupně není snadné. Postup pro hledání vlastních čísel známý z lineární algebry není použitelný.

- Dokonce platí následující pozorování: umíme-li hledat vlastní čísla matice, pak umíme hledat kořeny polynomů. Skutečně, pro monický polynom

$$q(x) = x^n + c_{n-1}x^{n-1} + \cdots + c_1 x + c_0$$

jsou vlastní čísla matice (tzv. **matice společnice** (*companion matrix*) monického polynomu q)

$$C(q) := \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & -c_0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & -c_1 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & -c_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & -c_{n-1} \end{pmatrix}$$

přesně kořeny polynomu q. Polynom q je totiž (případně až na multiplikativní znaménko) charakteristickým polynomem matice $C(q)$.

Diagonalizovatelnost matice

- Matice $M \in \mathbb{C}^{n,n}$ je diagonalizovatelná, právě když existují diagonální matice $D \in \mathbb{C}^{n,n}$ a regulární matice $P \in \mathbb{C}^{n,n}$ splňující

$$M = PDP^{-1}.$$

- **Připomenutí**: V předchozí přednášce jsme zkoumali mocniny matice M, platí $M^k = PD^kP^{-1}$. Vlastní čísla kontrolují asymptotické chování těchto mocnin pro $k \to +\infty$.

- **Poznámka**: Matice P obsahuje ve sloupcích vlastní vektory matice M (Lze ověřit. Tyto vlastní vektory tvoří bázi $\mathbb{C}^n$. Prvky na diagonále matice D jsou právě vlastní čísla matice M (včetně násobností).

Využití vlastních čísel

Vlastní čísla hrají důležitou roli v řadě aplikací, namátkou

- Klasifikace kuželoseček a kvadrik (geometrie).

- Kvantové počítání, kvantová mechanika, asymptotické chování různých systémů (fyzika).

- Analýza hlavních komponent: PCA neboli *principal component analysis* (big data).

- Rozpoznávání 2D i 3D objektů pomocí spektrálních metod (AI).

- Konkrétnější příklad: **PageRank** měří relativní důležitost WWW stránek zkoumáním odkazů mezi nimi.
  - Jeho výpočet spočívá ve výpočtu vlastního vektoru k dominantnímu číslu modifikované matice sousednosti grafu těchto odkazů.
  - K výpočtu **PageRank**u se používá se tzv. **mocninná metoda** (*power method*), kterou si probereme dále.

14 Norma – připomenutí

Norma – dpřipomenutí

Definice 14.1 — Norma (*norm*). **Norma** na vektorovém prostoru V (nad $\mathbb{R}$ nebo $\mathbb{C}$) je zobrazení $\|\cdot\|$: $V \to \mathbb{R}_0^+$ splňující:

1. $\|x\| = 0 \Rightarrow x = 0$,
2. $\|\alpha x\| = |\alpha| \cdot \|x\|$,
3. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ (trojúhelníková nerovnost),

pro všechna $x, y \in V$ a všechny skaláry α.

Na $\mathbb{R}^n$ ($\mathbb{C}^n$) je nejznámější pravděpodobně **eukleidovská** norma:

$$\|x\|_2 := \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2\right)^{\frac{1}{2}},$$

kde $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ ($\mathbb{C}^n$). (Ověření trojúhelníkové nerovnosti není triviální!)

Norma – další příklady znovu

Dalšími často užívanými normami jsou:

$$\|x\|_\infty := \max\left\{|x_i| \,\middle|\, i \in \{1, \dots, n\}\right\} \qquad \text{(tzv. maximová norma)}$$

$$\|x\|_1 := \sum_{i=1}^{n} |x_i| \qquad \text{(tzv. součtová norma)}$$

Obecně, pro libovolné $p \geq 1$ je

$$\|x\|_p := \sqrt[p]{\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p}$$

normou na $\mathbb{R}^n$ (resp. $\mathbb{C}^n$). (Ověření trojúhelníkové nerovnosti není triviální!)

Ekvivalence norem

Řekneme, že dvě normy $\|\cdot\|_a$ a $\|\cdot\|_b$ na prostoru V jsou *ekvivalentní*, pokud existují konstanty C_1 a C_2 takové, že

$$\forall x \in V, \quad C_1\|x\|_b \leq \|x\|_a \leq C_2\|x\|_b.$$

Věta 14.2 Nechť V je vektorový prostor konečné dimenze nad $\mathbb{R}$ nebo $\mathbb{C}$ a nechť $\|\cdot\|_a$ a $\|\cdot\|_b$ jsou dvě normy na V. Platí, že $\|\cdot\|_a$ a $\|\cdot\|_b$ jsou ekvivalentní.

15 Mocninná metoda

Mocninná metoda: úvod a předpoklady (1/3)

- Ve své základní variantě slouží mocninná metoda k nalezení v absolutní hodnotě největšího vlastního čísla (takovému se říká dominantní vlastní číslo) a příslušného vlastního vektoru.

- Mějme matici $M \in \mathbb{C}^{n,n}$. **Předpokládejme**, že je diagonalizovatelná, tj. existuje regulární matice $P \in \mathbb{C}^{n,n}$ splňující
$$M = PDP^{-1},$$
kde $D = \operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ a dále navíc **předpokládejme**, že můžeme její vlastní čísla označit takto:
$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n|.$$

Poznámky:

- Z výše uvedeného plyne, že dominantní vlastní číslo λ_1 není degenerované (příslušný vlastní podprostor matice M má dimenzi 1).

- Předpoklad diagonalizovatelnosti lze odstranit, v zájmu jednoduchosti výkladu ho ale přijmeme.

Mocninná metoda: úvod a předpoklady (2/3)

Jak moc je předpoklad o vlastních číslech restriktivní?

Splňují jej velké třídy matic: kladné matice a obecněji primitivní matice (tzv. Perronova-Frobeniova věta).

Definice 15.1 Čtvercová matice M je **primitivní**, pokud má nezáporné (reálné) prvky a existuje kladné k takové, že M^k má kladné prvky.

Jak moc je předpoklad o diagonalizovatelnosti restriktivní?

Není, ten máme pouze pro zjednodušení. V obecnější variantě lze opět použít Jordanův normální tvar (bez změny principu).

Mocninná metoda: úvod a předpoklady (3/3)

- Hledáme vlastní vektor přidružený k vlastnímu číslu λ_1, tedy nenulový vektor $\mathbf{u}_1$ splňující

$$M\mathbf{u}_1 = \lambda_1 \mathbf{u}_1.$$

- Mocninná metoda je **iterativní metoda**. Zvolme $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{C}^n$ a sestrojme posloupnost $(\mathbf{x}_k)_{k=0}^{\infty}$ zadanou rekurentně vztahem

$$\mathbf{x}_{k+1} = M\mathbf{x}_k, \quad k \in \mathbb{N}.$$

Ekvivalentně máme explicitní vyjádření

$$\mathbf{x}_k = M^k \mathbf{x}_0, \quad k \in \mathbb{N}.$$

- Tento vzorec je původem vžitého názvu *mocninná* metoda (též *power iteration*).

Mocninná metoda: vlastní vektor (1/3)

- Vektor $\mathbf{x}_0$ lze napsat jako lineární kombinaci vlastních vektorů matice M, tj.

$$\mathbf{x}_0 = P\boldsymbol{\alpha},$$

kde $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_n)^T \in \mathbb{C}^n$ je vektor obsahující koeficienty příslušné linární kombinace. **Předpokládejme**, že $\alpha_1 \neq 0$. (Při náhodné volbě vektoru $\mathbf{x}_0$ je rovnost $\alpha_1 = 0$ nepravděpodobná.)

- Pro naší posloupnost $(\mathbf{x}_k)_{k=0}^{\infty}$ potom platí

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_k &= M^k\mathbf{x}_0 = (PDP^{-1})^k\mathbf{x}_0 = PD^k\boldsymbol{\alpha} = P\,\mathrm{diag}(\lambda_1^k, \ldots, \lambda_n^k)\,\boldsymbol{\alpha} = \\ &= \lambda_1^k P\,\mathrm{diag}\left(1, \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k, \ldots, \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k\right)\boldsymbol{\alpha},\end{aligned}$$

kde $D = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$.

Mocninná metoda: vlastní vektor (2/3)

- Nyní vektor $\mathbf{x}_k$ normalizujme tak, aby jeho první složka byla rovna 1 (vizte poznámku dále), tedy

$$\begin{aligned}\mathbf{y}_k := \frac{\mathbf{x}_k}{(\mathbf{x}_k)_1} &= \frac{P\,\mathrm{diag}\left(1, \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k, \ldots, \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k\right)\boldsymbol{\alpha}}{\left(P\,\mathrm{diag}\left(1, \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k, \ldots, \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k\right)\boldsymbol{\alpha}\right)_1} \longrightarrow \\ &\longrightarrow \frac{P\,\mathrm{diag}(1, 0, \ldots, 0)\boldsymbol{\alpha}}{(P\,\mathrm{diag}(1, 0, \ldots, 0)\boldsymbol{\alpha})_1} =: \mathbf{y}_\infty \in \ker(M - \lambda_1 E),\end{aligned}$$

když $k \to +\infty$. Skutečně, dle našeho předpokladu totiž

$$\lim_{k\to\infty} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k = 0$$

pro každé $i = 2, 3, \ldots, n$ a

$$P\,\mathrm{diag}(1, 0, \ldots, 0)\boldsymbol{\alpha} = \alpha_1 \mathbf{u}_1 \in \ker(M - \lambda_1 E).$$

Mocninná metoda: vlastní vektor (3/3)

Hned na tomto místě je vhodné učinit několik poznámek:

- Při normalizaci můžeme/musíme zvolit i **jinou složku než první**, která je nenulová. Vlastní vektor je nenulový a jedna z jeho složek proto nutně musí být nenulová.

- Kdybychom věděli, že $\lambda_1 > 0$, pak lze vektory $\mathbf{x}_k$ skutečně normalizovat a tím se také zbavit mocnin λ_1^k. Ve výpočtu výše bychom kladli (stručný zápis)
$$\mathbf{y}_k := \frac{\mathbf{x}_k}{\|\mathbf{x}_k\|} = \frac{\lambda_1^k(P\ldots)}{\|\lambda_1^k(P\ldots)\|} = \frac{\lambda_1^k(P\ldots)}{|\lambda_1^k|\,\|(P\ldots)\|} = \frac{\lambda_1^k(P\ldots)}{\lambda_1^k\,\|(P\ldots)\|} = \frac{(P\ldots)}{\|(P\ldots)\|}$$
a posloupnost $(\mathbf{y}_k)_{k=1}^{+\infty}$ by opět byla konvergentní.

- Pro kladné a nezáporné ireducibilní matice platí $\lambda_1 > 0$ a složky $\mathbf{u}_1$ jsou také kladné (opět Perronova-Frobeniova věta).

Mocninná metoda: vlastní číslo

- Vlastní číslo, resp. jeho aproximaci, nyní snadno zjistíme následovně
$$\frac{\langle \mathbf{y}_k, M\mathbf{y}_k\rangle}{\|\mathbf{y}_k\|^2} \longrightarrow \frac{\langle \mathbf{y}_\infty, M\mathbf{y}_\infty\rangle}{\|\mathbf{y}_\infty\|^2} = \frac{\langle \mathbf{y}_\infty, \lambda_1\mathbf{y}_\infty\rangle}{\|\mathbf{y}_\infty\|^2} = \lambda_1,$$
zde $\langle x, y\rangle$ značí standardní skalární součin[2] na $\mathbb{C}^n$ a $\|x\|$ je euklidovská norma.

- Alternativně bychom mohli vzít libovolné (nenulové na $\ker(M - \lambda_1 E)$) lineární zobrazení $\varphi : \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}$ a počítat podíly
$$\frac{\varphi(M\mathbf{y}_k)}{\varphi(\mathbf{y}_k)} \longrightarrow \frac{\varphi(M\mathbf{y}_\infty)}{\varphi(\mathbf{y}_\infty)} = \frac{\varphi(\lambda_1\mathbf{y}_\infty)}{\varphi(\mathbf{y}_\infty)} = \lambda_1.$$
Například $\varphi(\mathbf{v}) = (\mathbf{v})_i$ pro zvolené $i \in \{1, 2, \ldots, n\}$.

Mocninná metoda: konvergence

- **Kritérium zastavení** ($\|\cdot\|$ je jistá norma na $\mathbb{C}^n$): máme-li poslední iteraci aproximace vlastního vektoru $\mathbf{y}_k$ a vlastního čísla $\lambda_1^{(k)}$, pak otestujeme reziduum
$$\|M\mathbf{y}_k - \lambda_1^{(k)}\mathbf{y}_k\| < \varepsilon.$$

- Pro rychlost konvergence posloupnosti platí (odhad explicitně neprovádíme)
$$\|\mathbf{y}_k - \mathbf{y}_\infty\| = \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k\right)$$
a vlastních čísel platí
$$\left\|\lambda_1^{(k)} - \lambda_1\right\| = \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^{2k}\right).$$

- Obecné **pozorování**: Jsou-li vlastní čísla „blízko u sebe“, pak může být výpočet velmi pomalý.

[2] Tedy $\langle x, y\rangle = \sum \overline{x_i} y_i$.

Mocninná metoda: poznámky

- Dejme tomu, že jsme mocninnou metodou nalezli dominantní vlastní číslo λ_1 a jemu příslušející normalizovaný (Euklidovou normou) vlastní vektor $\mathbf{u}_1$. Jak hledat **další** vlastní čísla?

- Předpokládejme, že matice M je normální ($MM^\dagger = M^\dagger M$, dýka označuje transpozici a komplexní sdružení), pak má ortogonální vlastní vektory.

- Můžeme matici upravit následovně (tečka označuje maticové násobení[3]; pruh komplexní sdružení složek)
$$M' := M - \lambda_1 \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{u}_1^\dagger.$$

- Matice M' má nyní vektor $\mathbf{u}_1$ také jako vlastní vektor, ale s vlastním číslem 0! Skutečně,
$$M'\mathbf{u}_1 = M\mathbf{u}_1 - \lambda_1 \mathbf{u}_1 \cdot \|\mathbf{u}_1\|_2^2 = \lambda_1 \mathbf{u}_1 - \lambda_1 \mathbf{u}_1 = 0.$$

- Nyní aplikujeme mocninnou metodu (jsou-li splněny její předpoklady) na M' a získáme **druhé** v absolutní hodnotě největší vlastní číslo matice M.

Mocninná metoda: ukázka (1/2)

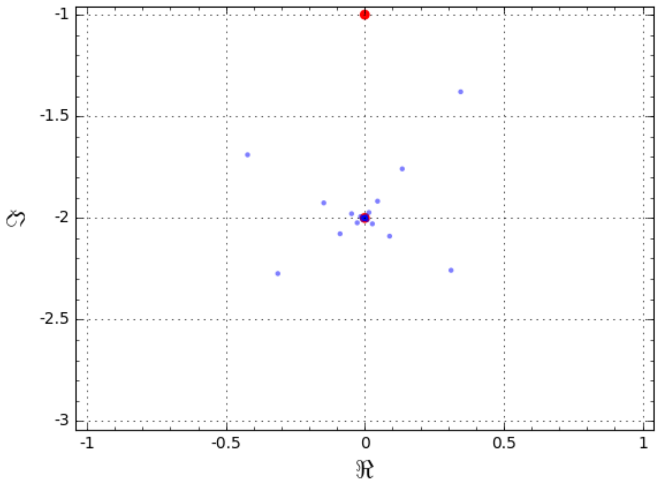
Uvažme matici
$$M = \begin{pmatrix} 36408 + 16769i & -5412 - 2481i & 107256 + 49397i & -492 - 214i \\ -10656 - 5164i & 1584 + 762i & -31392 - 15210i & 144 + 66i \\ -12876 - 5954i & 1914 + 881i & -37932 - 17539i & 174 + 76i \\ 4329 - 262i & -643 + 39i & 12753 - 771i & -58 + 6i \end{pmatrix}$$

Je zkonstruována tak, že její vlastní čísla jsou $-2i$, $-i$, $3i/2$, $3/2$. Požadujeme přesnost (mez pro reziduum) $\varepsilon = 10^{-6}$. Aproximace λ_1 z posledních 7 iterací:

$$\begin{aligned} 0.0000477588150960872 - 1.99991424541241i \\ -0.0000479821875446196 - 1.99998019901599i \\ -0.0000272650944159076 - 2.00002375338328i \\ 0.0000271520045767515 - 2.00002973125038i \\ 0.0000154506695115737 - 1.99997272532314i \\ -0.0000152424622193764 - 1.99993349337182i \end{aligned}$$

Mocninná metoda: ukázka (2/2)

[3] a vektor je stále sloupec



16 QR algoritmus

QR faktorizace a QR algoritmus (1/2)

- Mocninná metoda se nehodí na hledání všech vlastních čísel matice M.
- Navíc maticové násobení je obecně náročně a vyplatí se až pro velké řídké matice.

- Existují další algoritmy založené na sérii podobnostních transformací: cílem je sestrojit posloupnost matic $(M_k)_{k=0}^{\infty}$, $M_0 = M$ tak, že
$$M_k = P_k M_{k-1} P_k^{-1}, \quad k \in \mathbb{N},$$
kde každá P_k je regulární, $M_k \to M_\infty$ a pro limitní matici umíme snadno spočítat vlastní čísla (například je horní trojúhelníková).

QR faktorizace a QR algoritmus (2/2)

- **QR faktorizace** matice spočívá ve vyjádření reálné (resp. komplexní) matice M ve tvaru součinu
$$M = Q \cdot R,$$
kde Q je ortogonální (resp. unitární) a R je horní trojúhelníková.

- Existuje několik algoritmů počítajících tuto faktorizaci (Gram-Schmidt, Hauseholderova transformace, Givensova rotace).

- **QR algoritmus** tuto faktorizaci provádí v každém kroku. Zhruba řečeno, pro M_k spočteme její QR faktorizaci
$$M_k = Q_k R_k$$
a položíme
$$M_{k+1} := R_k Q_k = Q_k^{-1} Q_k R_k Q_k = Q_k^{-1} M_k Q_k$$
Iterace začíná s $M_0 = M$. Všechny matice M_k jsou podobné naší M a mají tedy stejná vlastní čísla. Za jistých předpokladů M_k konverguje k trojúhelníkové matici.

ChangeLog

Verze	Datum	Autor	Log
1.11	13.12.2023	ŠS	Oprava u Perronovy-Frobeniovy věty.
1.1	30.11.2023	ŠS	Přesuny obecných částí kvůli změně pořadí přednášek, doplnění ekvivalence norem.
1.01	14.12.2019	ŠS	Drobná vylepšení.
1.0	5.12.2019	ŠS	Výchozí verze.