

5. Simetrični problem lastnih vrednosti Jacobijeva metoda

Bor Plestenjak

NLA

22. marec 2011

Jacobijeva metoda

Zgodovinsko gledano gre za eno izmed najstarejših metod za računanje lastnih vrednosti, saj izvira iz sredine 19. stoletja.

Pri tej metodi matrike na začetku **ne reduciramo na tridiagonalno obliko**.

Z izbranimi Givensovimi rotacijami z leve in desne uničujemo izvendiagonalne elemente in matriko transformiramo (v limiti) v diagonalno matriko.

Tvorimo zaporedje ortogonalno podobnih matrik $A = A_0, A_1, A_2, \dots$, kjer je

$$A_{k+1} = R_{pq}^T A_k R_{pq},$$

Givensovo (Jacobijevo) rotacijo R_{pq} pa določimo tako, da uničimo element a_{pq} .

Ustrezni vrednosti c in s določimo iz $c^2 + s^2 = 1$ in zveze

$$\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{pp} & a_{pq} \\ a_{pq} & a_{qq} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{a}_{pp} & 0 \\ 0 & \hat{a}_{qq} \end{bmatrix}.$$

Izračun c in s

Naj bo $c = \cos \varphi$, $s = \sin \varphi$ in

$$\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{pp} & a_{pq} \\ a_{pq} & a_{qq} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{a}_{pp} & 0 \\ 0 & \hat{a}_{qq} \end{bmatrix}.$$

Iz zveze $(a_{qq} - a_{pp})sc + a_{pq}(c^2 - s^2) = 0$ dobimo

$$\tau := \frac{\cos 2\varphi}{\sin 2\varphi} = \frac{c^2 - s^2}{2sc} = \frac{a_{pp} - a_{qq}}{2a_{pq}}.$$

Če definiramo $t := \frac{s}{c} = \tan \varphi$, potem velja (formule za tangens dvojnega kota)

$$t^2 + 2\tau t - 1 = 0.$$

Rešitev je

$$t = \frac{\text{sign}(\tau)}{|\tau| + \sqrt{1 + \tau^2}}, \quad c = \sqrt{\frac{1}{1 + t^2}}, \quad s = ct.$$

En korak Jacobijeve metode

$$[A_{k+1}, Q_{k+1}] = \text{Jacobi}(A_k, Q_k)$$

določi p in q

$$\tau = \frac{a_{pp} - a_{qq}}{2a_{pq}}$$

$$t = \frac{\text{sign}(\tau)}{|\tau| + \sqrt{1 + \tau^2}}$$

$$c = \sqrt{\frac{1}{1 + t^2}}$$

$$s = ct$$

$$A_{k+1} = R_{pq}^T A_k R_{pq}$$

$$Q_{k+1} = Q_k R_{pq} \text{ (če potrebujemo tudi lastne vektorje)}$$

En korak Jacobijeve metode

$$[A_{k+1}, Q_{k+1}] = \text{Jacobi}(A_k, Q_k)$$

določi p in q

$$\tau = \frac{a_{pp} - a_{qq}}{2a_{pq}}$$

$$t = \frac{\text{sign}(\tau)}{|\tau| + \sqrt{1 + \tau^2}}$$

$$c = \sqrt{\frac{1}{1 + t^2}}$$

$$s = ct$$

$$A_{k+1} = R_{pq}^T A_k R_{pq}$$

$$Q_{k+1} = Q_k R_{pq} \text{ (če potrebujemo tudi lastne vektorje)}$$

Pri vsakem množenju se spremenita dve vrstici in dva stolpca matrike (p in q).

En korak Jacobijeve metode

$$[A_{k+1}, Q_{k+1}] = \text{Jacobi}(A_k, Q_k)$$

določi p in q

$$\tau = \frac{a_{pp} - a_{qq}}{2a_{pq}}$$

$$t = \frac{\text{sign}(\tau)}{|\tau| + \sqrt{1 + \tau^2}}$$

$$c = \sqrt{\frac{1}{1 + t^2}}$$

$$s = ct$$

$$A_{k+1} = R_{pq}^T A_k R_{pq}$$

$$Q_{k+1} = Q_k R_{pq} \text{ (če potrebujemo tudi lastne vektorje)}$$

Pri vsakem množenju se spremenita dve vrstici in dva stolpca matrike (p in q).

Časovna zahtevnost enega koraka je $\mathcal{O}(n)$.

En korak Jacobijeve metode

$$[A_{k+1}, Q_{k+1}] = \text{Jacobi}(A_k, Q_k)$$

določi p in q

$$\tau = \frac{a_{pp} - a_{qq}}{2a_{pq}}$$

$$t = \frac{\text{sign}(\tau)}{|\tau| + \sqrt{1 + \tau^2}}$$

$$c = \sqrt{\frac{1}{1 + t^2}}$$

$$s = ct$$

$$A_{k+1} = R_{pq}^T A_k R_{pq}$$

$$Q_{k+1} = Q_k R_{pq} \text{ (če potrebujemo tudi lastne vektorje)}$$

Pri vsakem množenju se spremenita dve vrstici in dva stolpca matrike (p in q).

Časovna zahtevnost enega koraka je $\mathcal{O}(n)$.

Definicija

$$\text{off}(A)^2 = \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^n |a_{jk}|^2.$$

Definicija

$$\text{off}(A)^2 = \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^n |a_{jk}|^2.$$

Lema

Če $\tilde{A} = R_{pq}^T A R_{pq}$ dobimo iz A z Jacobijevo rotacijo R_{pq} , potem je

$$\text{off}(\tilde{A})^2 = \text{off}(A)^2 - 2a_{pq}^2.$$

Konvergenca Jacobijeve metode

Definicija

$$\text{off}(A)^2 = \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^n |a_{jk}|^2.$$

Lema

Če $\tilde{A} = R_{pq}^T A R_{pq}$ dobimo iz A z Jacobijevo rotacijo R_{pq} , potem je

$$\text{off}(\tilde{A})^2 = \text{off}(A)^2 - 2a_{pq}^2.$$

Z vsako Jacobijevo rotacijo se tako zmanjša $\text{off}(A)$. Iteriramo, dokler ni $\text{off}(A^{(k)})$ pod neko mejo.

Izbiranje elementa, ki ga uničimo

Klasična varianta. Izberemo (po abs. vrednosti) največji izvendiagonalni element:

- dodatno delo z iskanjem največjega elementa,
- konvergenca je vsaj linearna, saj velja

$$\text{off}(\tilde{A}) \leq \left(1 - \frac{2}{n(n-1)}\right) \text{off}(A),$$

- v bližini diagonalne matrike je konvergenca v resnici kvadratična.

Izbiranje elementa, ki ga uničimo

Klasična varianta. Izberemo (po abs. vrednosti) največji izvendiagonalni element:

- dodatno delo z iskanjem največjega elementa,
- konvergenca je vsaj linearna, saj velja

$$\text{off}(\tilde{A}) \leq \left(1 - \frac{2}{n(n-1)}\right) \text{off}(A),$$

- v bližini diagonalne matrike je konvergenca v resnici kvadratična.

Ciklična varianta. Po vrsti v enem ciklu izberemo vse izvendiagonalne elemente.

- izognemo se iskanju največjega izvendiagonalnega elementa,
- odvečno delo z uničevanjem elementov, ki so zelo blizu 0.
- konvergenca je še vedno kvadratična (po ciklih).

Izbiranje elementa, ki ga uničimo

Klasična varianta. Izberemo (po abs. vrednosti) največji izvendiagonalni element:

- dodatno delo z iskanjem največjega elementa,
- konvergenca je vsaj linearna, saj velja

$$\text{off}(\tilde{A}) \leq \left(1 - \frac{2}{n(n-1)}\right) \text{off}(A),$$

- v bližini diagonalne matrike je konvergenca v resnici kvadratična.

Ciklična varianta. Po vrsti v enem ciklu izberemo vse izvendiagonalne elemente.

- izognemo se iskanju največjega izvendiagonalnega elementa,
- odvečno delo z uničevanjem elementov, ki so zelo blizu 0.
- konvergenca je še vedno kvadratična (po ciklih).

Pragovna varianta. Gremo po vrsti kot pri ciklični metodi, a uničimo le po abs. vrednosti nadpovprečno velike elemente.

- ni dela z iskanjem elementov,
- ni odvečnih operacij z uničevanjem zelo majhnih elementov.

- Jacobi je metodo objavil leta 1846, res pa je, da je ni uporabljal v povsem enaki obliki.

- Jacobi je metodo objavil leta 1846, res pa je, da je ni uporabljal v povsem enaki obliki.
- Okrog leta 1950 so metodo na novo odkrili in zaradi enostavnosti je postala standardno orodje za računanje lastnih in singularnih vrednosti.

- Jacobi je metodo objavil leta 1846, res pa je, da je ni uporabljal v povsem enaki obliki.
- Okrog leta 1950 so metodo na novo odkrili in zaradi enostavnosti je postala standardno orodje za računanje lastnih in singularnih vrednosti.
- Pri večjih n je metoda počasnejša od QR iteracije, ki so jo razvili okrog leta 1960, zato je počasi šla v pozabo.

- Jacobi je metodo objavil leta 1846, res pa je, da je ni uporabljal v povsem enaki obliki.
- Okrog leta 1950 so metodo na novo odkrili in zaradi enostavnosti je postala standardno orodje za računanje lastnih in singularnih vrednosti.
- Pri večjih n je metoda počasnejša od QR iteracije, ki so jo razvili okrog leta 1960, zato je počasi šla v pozabo.
- Demmel in Veselić sta leta 1992 pokazala, da Jacobijeva metoda za simetrične pozitivno definitne matrike izračuna lastne vrednosti blizu 0 z višjo relativno natančnostjo kot QR .

- Jacobi je metodo objavil leta 1846, res pa je, da je ni uporabljal v povsem enaki obliki.
- Okrog leta 1950 so metodo na novo odkrili in zaradi enostavnosti je postala standardno orodje za računanje lastnih in singularnih vrednosti.
- Pri večjih n je metoda počasnejša od QR iteracije, ki so jo razvili okrog leta 1960, zato je počasi šla v pozabo.
- Demmel in Veselić sta leta 1992 pokazala, da Jacobijeva metoda za simetrične pozitivno definitne matrike izračuna lastne vrednosti blizu 0 z višjo relativno natančnostjo kot QR .
- Po tem rezultatu je postala Jacobijeva metoda spet atraktivna, še posebno različica za računanje singularnih vrednosti.

- Jacobi je metodo objavil leta 1846, res pa je, da je ni uporabljal v povsem enaki obliki.
- Okrog leta 1950 so metodo na novo odkrili in zaradi enostavnosti je postala standardno orodje za računanje lastnih in singularnih vrednosti.
- Pri večjih n je metoda počasnejša od QR iteracije, ki so jo razvili okrog leta 1960, zato je počasi šla v pozabo.
- Demmel in Veselić sta leta 1992 pokazala, da Jacobijeva metoda za simetrične pozitivno definitne matrike izračuna lastne vrednosti blizu 0 z višjo relativno natančnostjo kot QR.
- Po tem rezultatu je postala Jacobijeva metoda spet atraktivna, še posebno različica za računanje singularnih vrednosti.
- Po zadnjih izboljšavah je Jacobijeva metoda za računanje singularnih vrednosti po hitrosti primerljiva s QR in je vključena v zadnjo verzijo paketa LAPACK 3.2 (2008).

- Jacobi je metodo objavil leta 1846, res pa je, da je ni uporabljal v povsem enaki obliki.
- Okrog leta 1950 so metodo na novo odkrili in zaradi enostavnosti je postala standardno orodje za računanje lastnih in singularnih vrednosti.
- Pri večjih n je metoda počasnejša od QR iteracije, ki so jo razvili okrog leta 1960, zato je počasi šla v pozabo.
- Demmel in Veselić sta leta 1992 pokazala, da Jacobijeva metoda za simetrične pozitivno definitne matrike izračuna lastne vrednosti blizu 0 z višjo relativno natančnostjo kot QR .
- Po tem rezultatu je postala Jacobijeva metoda spet atraktivna, še posebno različica za računanje singularnih vrednosti.
- Po zadnjih izboljšavah je Jacobijeva metoda za računanje singularnih vrednosti po hitrosti primerljiva s QR in je vključena v zadnjo verzijo paketa LAPACK 3.2 (2008).
- Obstajajo posplošitve za drugačne oblike matrik, npr. Eberleinova metoda za nesimetrične matrike.

Motivacija: lepo risanje grafov

Eden izmed algoritmov za lepo risanje kubičnih poliedrskih grafov (graf predstavlja oglišča in stranice nekega poliedra, kjer se v vsakem oglišču srečajo tri stranice), je uporaba lastnih vektorjev in lastnih vrednosti.

Če vzamemo matriko sosednosti (matrika $n \times n$, ki ima na (i, j) -tem mestu 1, če sta točki i in j povezani, sicer pa 0), se hitro vidi, da je ena lastna vrednost (ki je ravno največja) ravno 3, lastni vektor pa je enak $[1 \ 1 \ \dots \ 1]^T$. Sedaj vzamemo λ_2 , λ_3 in λ_4 ter normirane lastne vektorje, ki naj bodo po vrsti x , y , z . Če sedaj za koordinate i -te točke vzamemo kar $T_i = (x_i, y_i, z_i)$, dobimo lepo tridimenzionalno sliko grafa.

Motivacija: Gaussove kvadrature formule

Računanje uteži in vozlov za Gaussovo kvadraturno formulo se da prevesti na iskanje lastnih vrednosti in lastnih vektorjev tridiagonalne matrike. Pokazati se da, da ortonormirani polinomi zadoščajo tričlenski rekurzivni formuli

$$xp_k(x) = b_{k-1}p_{k-1}(x) + a_k p_k(x) + b_k p_{k+1}(x).$$

Če poznamo koeficiente a_k in b_k , potem so vozli $x_0, \dots, x_n$ lastne vrednosti tridiagonalne matrike

$$T_n = \begin{bmatrix} a_0 & b_0 & & & \\ b_0 & a_1 & b_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & b_{n-2} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & b_{n-1} & a_n \end{bmatrix},$$

uteži pa dobimo iz prvih komponent ortonormiranih lastnih vektorjev:

$$a_i = x_{1i}^2 \int_a^b \rho(x) dx,$$

kjer je X matrika ortonormiranih lastnih vektorjev matrike T_n .