Metody numeryczne

Wykład nr 4

dr hab. Piotr Fronczak

Obliczanie wartości własnych i wektorów własnych

Niech $\boldsymbol{M}$ będzie kwadratową macierzą n x n. Wówczas $\boldsymbol{M}$ wyznacza przekształcenie liniowe przestrzeni R^n w siebie.
Niech $\boldsymbol{v} \in R^n$ będzie pewnym niezerowym wektorem oraz niech L będzie prostą wyznaczoną przez ten wektor.

Definicja. Jeżeli przekształcenie $\boldsymbol{M}$ przekształca prostą L w siebie, to mówimy, ze $\boldsymbol{v}$ jest wektorem własnym przekształcenia $\boldsymbol{M}$. Oznacza to, że

$$\boldsymbol{M} \cdot \boldsymbol{v} = \lambda \cdot \boldsymbol{v}$$

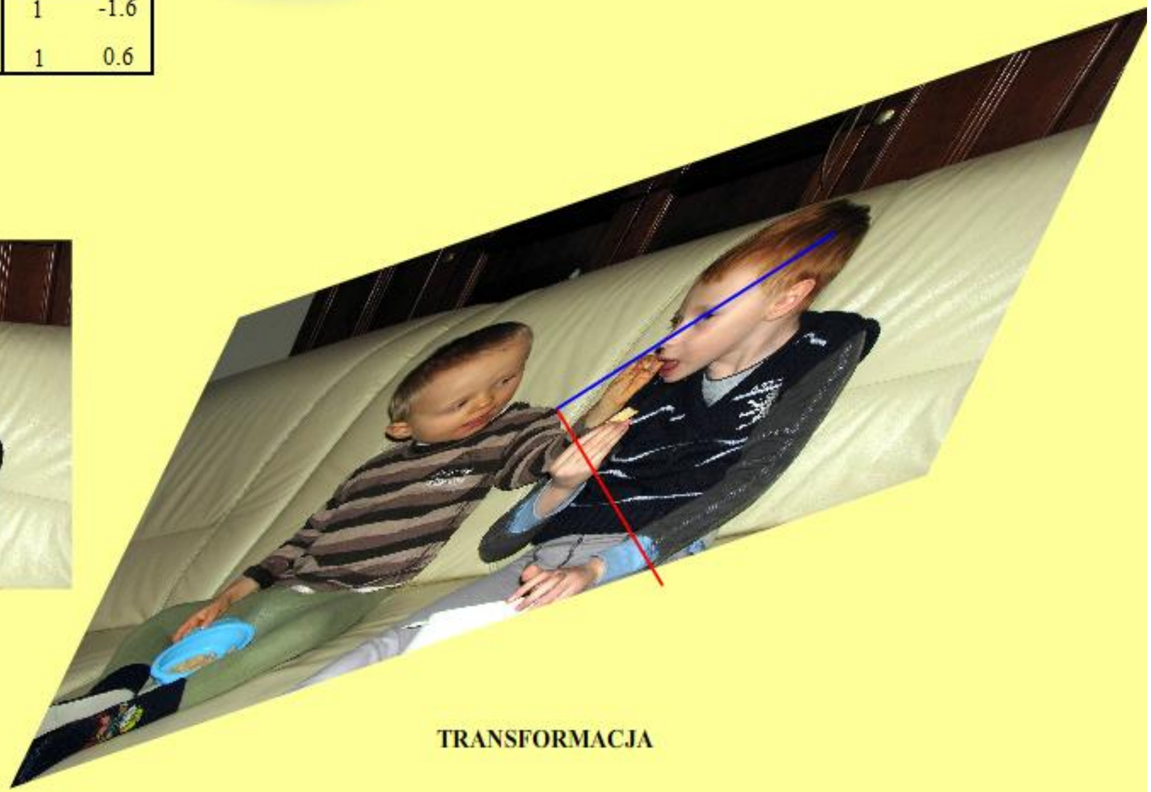
dla pewnej liczby rzeczywistej λ, zwanej wartością własną związaną z wektorem własnym $\boldsymbol{v}$.

$$M = \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

λ	v_x	v_y
1.38	1	-1.6
3.62	1	0.6

Oblicz

ORYGINAŁ



TRANSFORMACJA

Obliczanie wartości własnych i wektorów własnych

Chcąc znaleźć wartości i wektory własne musimy rozwiązać równanie:

$$M\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

M – macierz, λ - skalar

$$M\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Przekształcając…

$$M\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} - (\lambda I)\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

By móc wyciągnąć wektor przed nawias, musimy zamienić skalar na macierz mnożąc go przez macierz jednostkową.

$$(M - \lambda I)\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Wyciągamy wektor…

Obliczanie wartości własnych i wektorów własnych

$$(M - \lambda I)\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$M = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

Zapisując M jako macierz dwuwymiarową:

$$(M - \lambda I) = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{bmatrix}$$

Możemy teraz napisać jawnie układ równań:

$$(M - \lambda I) = \begin{bmatrix} a - \lambda & b \\ c & d - \lambda \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} a - \lambda & b \\ c & d - \lambda \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Obliczanie wartości własnych i wektorów własnych

$$\begin{bmatrix} a-\lambda & b \\ c & d-\lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Jeśli wyznacznik macierzy (M- λI) nie jest równy zero, to możemy pomnożyć obustronnie to równanie przez macierz odwrotną:

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a-\lambda & b \\ c & d-\lambda \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Oznacza to, że nasz wektor to wektor zerowy, nie wyznacza on żadnej prostej.

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Zatem, wyznacznik macierzy (M- λI) musi być równy zero. Czyli jest to macierz osobliwa.

Obliczanie wartości własnych i wektorów własnych

$$\begin{vmatrix} a-\lambda & b \\ c & d-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

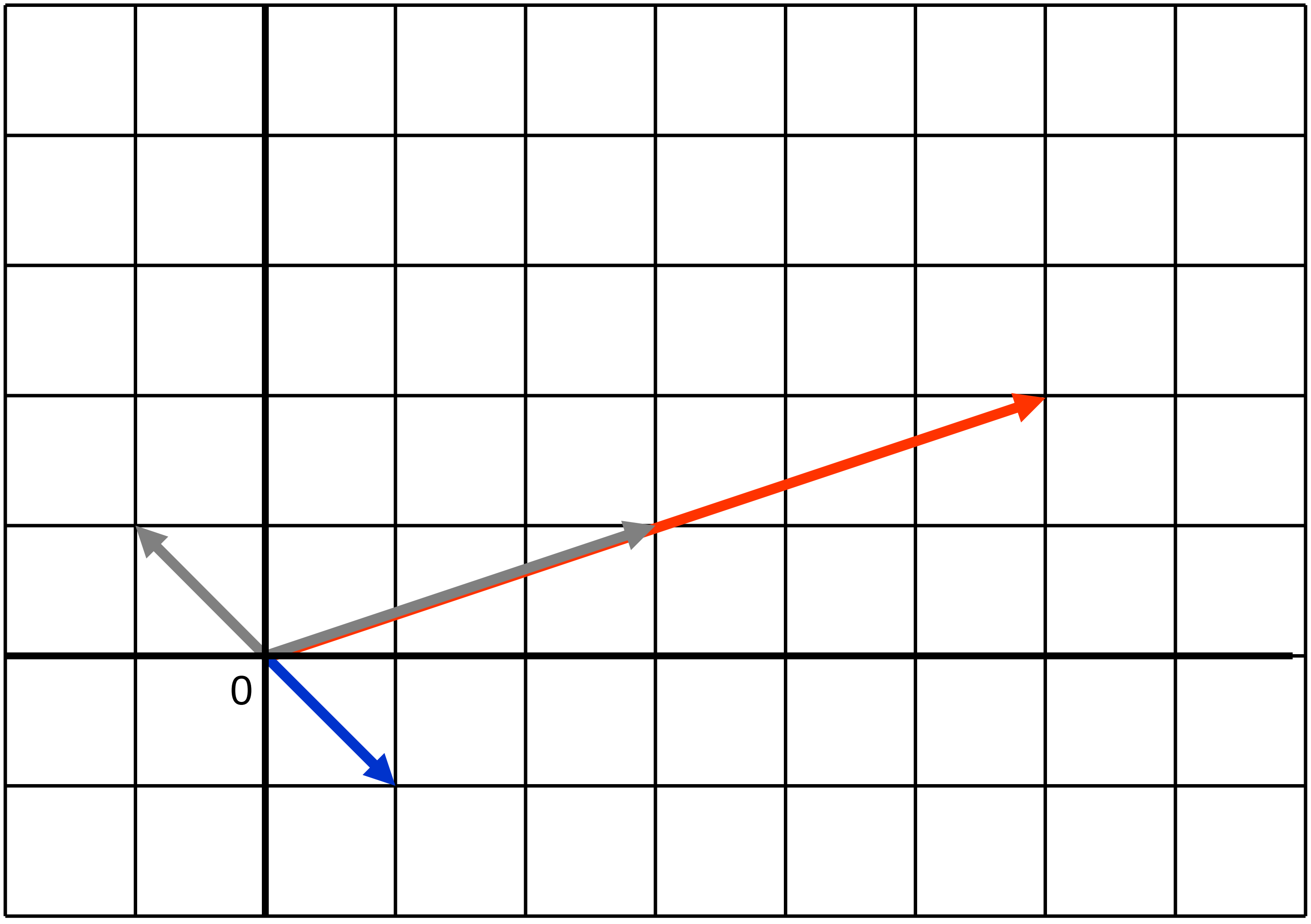
Ważne równanie –
tak szukamy wartości własnych.

$$(a-\lambda)(d-\lambda)-bc=0$$

$$\lambda^2-(a+d)\lambda+(ad-bc)=0$$

Równanie charakterystyczne.

Wartości własne określają wielkość przeskalowania położenia punktu (wektora wodzącego) w przestrzeni. Możemy mieć jedną, dwie, lub brak rzeczywistych wartości własnych w macierzy 2x2.



Jaka jest wartość własna czerwonego wektora?

A niebieskiego?

Obliczanie wartości własnych i wektorów własnych

Gdy znajdziemy już **wartości własne**, możemy podstawić je do naszego pierwotnego równania by znaleźć **wektory własne.**

$$M \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

To jest wektor własny. Uwaga: nie jest on jednoznaczny. Wyznacza kierunek. Wiele innych wektorów też wyznacza ten sam kierunek.

By rozwiązać to równanie, trzeba przyjąć dodatkowy warunek (np. długość wektora, wartość jednej składowej, itp.)

Znajdź wartości własne i odpowiadające im wektory własne macierzy A:

$$A=\begin{bmatrix}1 & 4\\ 2 & 3\end{bmatrix}$$

$$|A-\lambda I|=0$$

$$\begin{vmatrix}1-\lambda & 4\\ 2 & 3-\lambda\end{vmatrix}=0$$

$$(1-\lambda)(3-\lambda)-8=0$$

$$\lambda^2-4\lambda-5=0$$

$$(\lambda-5)(\lambda+1)=0$$

$$\lambda_1=5,\lambda_2=-1$$

Odpowiada
wartości własnej 5

$$\lambda_1=5\rightarrow\begin{bmatrix}1-5 & 4\\ 2 & 3-5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}-4 & 4\\ 2 & -2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix}$$

$$-4x+4y=0$$

$$2x-2y=0$$

$$\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}$$

$$\lambda_1=-1\rightarrow\begin{bmatrix}1--1 & 4\\ 2 & 3--1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}2 & 4\\ 2 & 4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix}$$

$$2x+4y=0$$

$$2x+4y=0$$

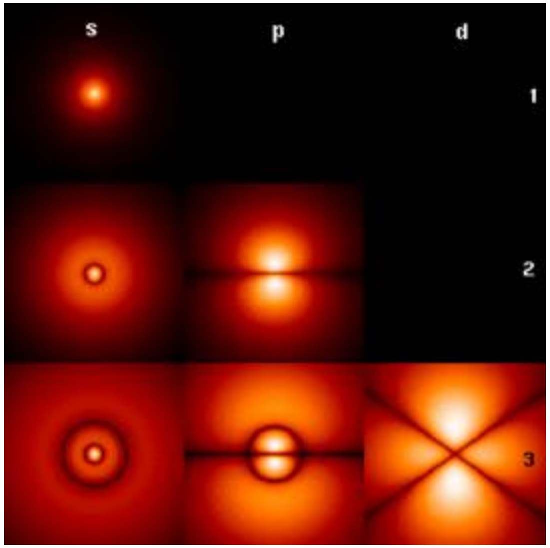
$$\begin{bmatrix}2\\ -1\end{bmatrix}$$

Odpowiada
wartości własnej -1

Zastosowania

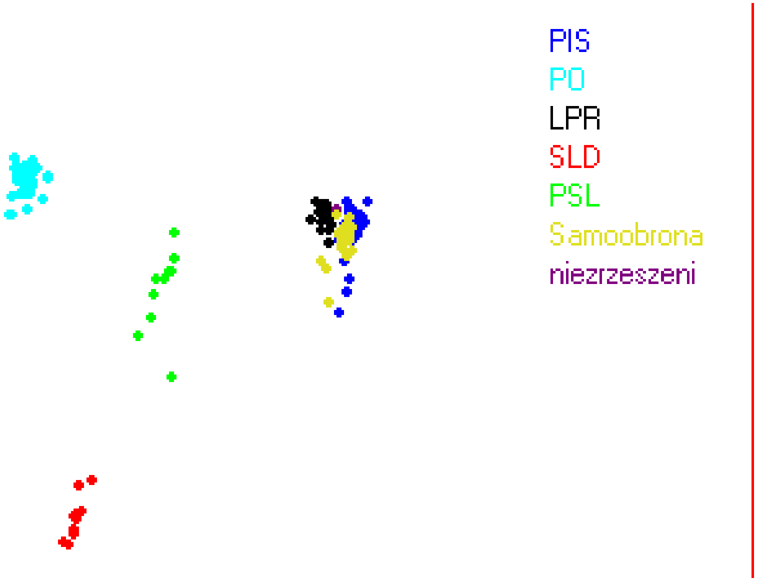
Równanie Schroedingera:

Funkcje falowe elektronów w atomie wodoru mogą być postrzegane jako wektory własne operatora energii i momentu pędu. Wartości własne reprezentują wartość energii (n = 1,2,3,...) i momentu pędu (s, p, d,...).



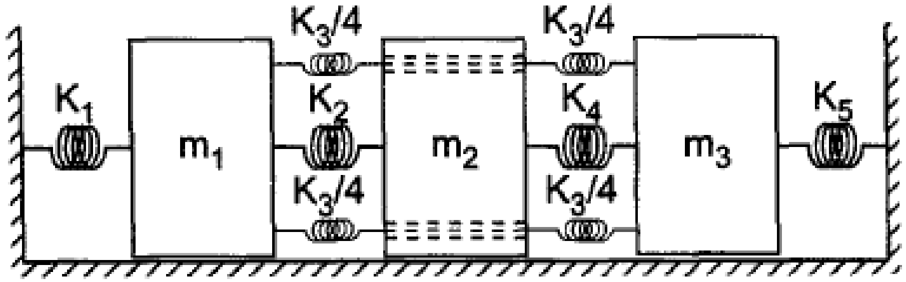
Analiza składowych głównych

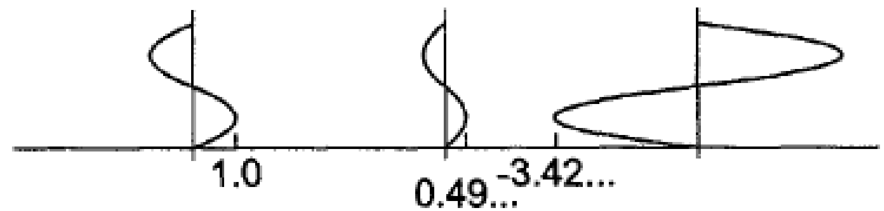
Metoda statystyczna umożliwiająca zrzutowanie wysokowymiarowego zbioru danych na dwa lub trzy wymiary. Umożliwia ona wybrać te kierunki wersorów, które charakteryzują się największą wariancją danych.



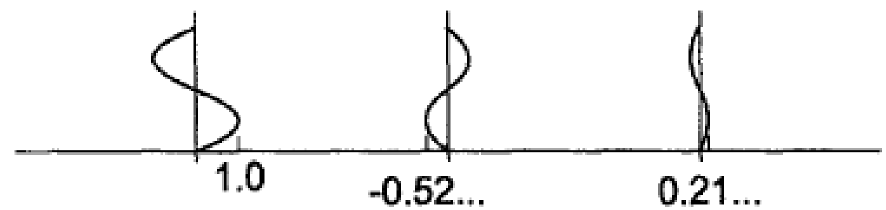
Mechanika drgań

Wartości własne reprezentują naturalne częstości drgań układu złożonego z kilku elementów. Wektory określają mody tych drgań.

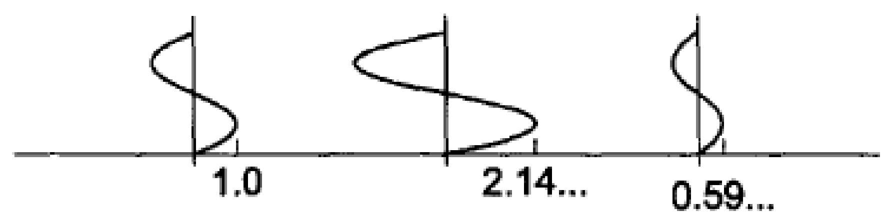




(a) $f_1 = 16.656$ Hz.



(b) $f_2 = 13.130$ Hz.



(c) $f_3 = 7.084$ Hz.

Dynamika ruchu obrotowego:

Moment bezwładności trójwymiarowego obiektu bez żadnych osi symetrii jest dany macierzą 3x3. Wektory własne – kierunki osi przechodzące przez środek masy, wokół których obiekt może się obracać bez precesji. Wartości własne – wartości momentu pędu dla danego kierunku.

Metoda potęgowa (iteracji wektorów)

Można ją stosować dla znajdowania wartości własnej o największym module i odpowiadającego jej wektora własnego.

Rozważmy macierz $[\mathbf{A}]$, która ma n różnych rzeczywistych wartości własnych $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ i n związanych z nimi wektorów własnych $[u]_1, [u]_2, \ldots, [u]_n$.

Ponumerujmy wartości własne od największej do najmniejszej:

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \ldots > |\lambda_n|$$

Wspomniane wektory stanowią **bazę** w tym sensie, iż każdy inny wektor może być przedstawiony jednoznacznie jako ich **kombinacja liniowa**.

$$[x]_1 = c_1[u]_1 + c_2[u]_2 + \ldots + c_n[u]_n$$

gdzie c_i – stałe skalarne $\neq 0$.

$$[x]_1 = c_1[u]_1 + c_2[u]_2 + \ldots + c_n[u]_n$$

Pomnożywszy przez $[\mathbf{A}]$:

$$[\mathbf{A}][x]_1 = c_1[\mathbf{A}][u]_1 + c_2[\mathbf{A}][u]_2 + \ldots + c_n[\mathbf{A}][u]_n =$$

$$c_1\lambda_1[u]_1 + c_2\lambda_2[u]_2 + \ldots + c_n\lambda_n[u]_n =$$

$$c_1\lambda_1\left([u]_1 + \frac{c_2\lambda_2}{c_1\lambda_1}[u]_2 + \ldots + \frac{c_n\lambda_n}{c_1\lambda_1}[u]_n\right) =$$

$$c_1\lambda_1[x]_2$$

$$[x]_2 = [u]_1 + \frac{c_2\lambda_2}{c_1\lambda_1}[u]_2 + \ldots + \frac{c_n\lambda_n}{c_1\lambda_1}[u]_n$$

$$[x]_2 = [u]_1 + \frac{c_2\lambda_2}{c_1\lambda_1}[u]_2 + \ldots + \frac{c_n\lambda_n}{c_1\lambda_1}[u]_n$$

Pomnożywszy przez $[\mathbf{A}]$:

$$[\mathbf{A}][x]_2 = [\mathbf{A}][u]_1 + \frac{c_2\lambda_2}{c_1\lambda_1}[\mathbf{A}][u]_2 + \ldots + \frac{c_n\lambda_n}{c_1\lambda_1}[\mathbf{A}][u]_n$$

$$[\mathbf{A}][x]_2 = \lambda_1[u]_1 + \frac{c_2\lambda_2}{c_1\lambda_1}\lambda_2[u]_2 + \ldots + \frac{c_n\lambda_n}{c_1\lambda_1}\lambda_n[u]_n$$

$$= \lambda_1[u]_1 + \frac{c_2\lambda_2^2}{c_1\lambda_1}[u]_2 + \ldots + \frac{c_n\lambda_n^2}{c_1\lambda_1}[u]_n$$

$$= \lambda_1\left\{[u]_1 + \frac{c_2\lambda_2^2}{c_1\lambda_1^2}[u]_2 + \ldots + \frac{c_n\lambda_n^2}{c_1\lambda_1^2}[u]_n\right\}$$

$$= \lambda_1[x]_3$$

$$[x]_3 = [u]_1 + \frac{c_2\lambda_2^2}{c_1\lambda_1^2}[u]_2 + \ldots + \frac{c_n\lambda_n^2}{c_1\lambda_1^2}[u]_n$$

Pomnożywszy przez $[\mathbf{A}]$:

$$[\mathbf{A}][x]_3 = [\mathbf{A}][u]_1 + \frac{c_2\lambda_2^2}{c_1\lambda_1^2}[\mathbf{A}][u]_2 + \ldots + \frac{c_n\lambda_n^2}{c_1\lambda_1^2}[\mathbf{A}][u]_n$$

$$[\mathbf{A}][x]_3 = \lambda_1[u]_1 + \frac{c_2\lambda_2^2}{c_1\lambda_1^2}\lambda_2[u]_2 + \ldots + \frac{c_n\lambda_n^2}{c_1\lambda_1^2}\lambda_n[u]_n$$

$$= \lambda_1[u]_1 + \frac{c_2\lambda_2^3}{c_1\lambda_1^2}[u]_2 + \ldots + \frac{c_n\lambda_n^3}{c_1\lambda_1^2}[u]_n$$

$$= \lambda_1\left\{[u]_1 + \frac{c_2\lambda_2^3}{c_1\lambda_1^3}[u]_2 + \ldots + \frac{c_n\lambda_n^3}{c_1\lambda_1^3}[u]_n\right\}$$

$$= \lambda_1[x]_4$$

Widać zatem, że kolejne iteracje dadzą:

$$[x]_2 = [u]_1 + \frac{c_2\lambda_2}{c_1\lambda_1}[u]_2 + \ldots + \frac{c_n\lambda_n}{c_1\lambda_1}[u]_n$$

$$[x]_3 = [u]_1 + \frac{c_2\lambda_2^2}{c_1\lambda_1^2}[u]_2 + \ldots + \frac{c_n\lambda_n^2}{c_1\lambda_1^2}[u]_n$$

$$[x]_4 = [u]_1 + \frac{c_2\lambda_2^3}{c_1\lambda_1^3}[u]_2 + \ldots + \frac{c_n\lambda_n^3}{c_1\lambda_1^3}[u]_n$$

. . .

$$[x]_{k+1} = [u]_1 + \frac{c_2\lambda_2^k}{c_1\lambda_1^k}[u]_2 + \ldots + \frac{c_n\lambda_n^k}{c_1\lambda_1^k}[u]_n$$

Pamiętajmy, że $\frac{\lambda_i}{\lambda_1} < 1 \quad \texttt{dla} \; i > 1$

Zatem $[x]_{k+1} = [u]_1 \quad \texttt{dla} \quad k \to \infty$

$$[\mathbf{A}][x]_1 = \lambda_1 c_1 [x]_2$$

$$[\mathbf{A}][x]_2 = \lambda_1 [x]_3 \quad \Rightarrow \quad [\mathbf{A}][\mathbf{A}][\mathbf{A}][x]_1 = \lambda_1 \lambda_1 \lambda_1 c_1 [x]_4$$

$$[\mathbf{A}][x]_3 = \lambda_1 [x]_4$$

$$\Downarrow$$

$$[\mathbf{A}]^k [x]_1 = \lambda_1^k c_1 [x]_{k+1} = \lambda_1^k c_1 [u]_1$$

Przypomnienie: jeśli $[u]$ jest wektorem własnym, to $k[u]$ też jest wektorem własnym. Tylko kierunek wektora własnego ma znaczenie. Jego długość możemy przyjąć dowolnie.

My przyjmiemy jego długość równą 1 (znormalizowany wektor własny). Dzięki temu prawa strona ostatniego równania nie urośnie lub nie zmaleje poza zakres liczb zmiennoprzecinkowych.

Algorytm:

1. Wybierz wektor początkowy $[x_0]$ i znormalizuj go.

$$[y_0] = \frac{[x_0]}{\|[x_0]\|}$$

2. Pomnóż $[y_0]$ przez $[\mathbf{A}]$. Otrzymany wektor znormalizuj.

$$[\mathbf{A}][y_0] = [x_1], \quad [y_1] = \frac{[x_1]}{\|[x_1]\|}$$

3. Pomnóż $[y_1]$ przez $[\mathbf{A}]$. Otrzymany wektor znormalizuj.

$$[\mathbf{A}][y_1] = [x_2], \quad [y_2] = \frac{[x_2]}{\|[x_2]\|}$$

Powtórz ostatnią operację *m* razy. Gdy *m* jest duże, to $[y_m] \approx [y_{m-1}]$. Wtedy również $[y_m] \approx [u_1]$ (wektor własny znormalizowany). Zatem z zależności:

$$[\mathbf{A}][y_m] = \lambda [y_m]$$

Znajdziemy wartość własną.

Przykład:

$$[\mathbf{A}] = \begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad x_0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

1. $$\begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ -3 \\ -1 \end{bmatrix} = 5 \begin{bmatrix} 1 \\ -0.6 \\ -0.2 \end{bmatrix}$$

2. $$\begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -0.6 \\ -0.2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4.6 \\ 1 \\ 0.2 \end{bmatrix} = 4.6 \begin{bmatrix} 1 \\ 0.217 \\ 0.0435 \end{bmatrix}$$

3. $$\begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0.217 \\ 0.0435 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4.2174 \\ 0.4783 \\ -0.0435 \end{bmatrix} = 4.2174 \begin{bmatrix} 1 \\ 0.1134 \\ -0.0183 \end{bmatrix}$$

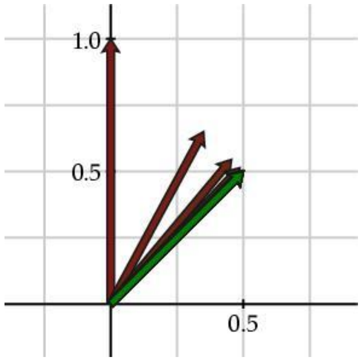
4. $$\begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0.1134 \\ -0.0183 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4.1134 \\ 0.2165 \\ 0.0103 \end{bmatrix} = 4.1134 \begin{bmatrix} 1 \\ 0.0526 \\ 0.0025 \end{bmatrix}$$

Krok	**[u_1]**	**λ**
1	[1 -0.6 -0.2]	5
2	[1 0.217 0.0435]	4.6
3	[1 0.1134 -0.0183]	4.2174
4	[1 0.0526 0.0025]	4.1134
...	....	....
k	[1 0 0]	4

Zbieżność metody potęgowej

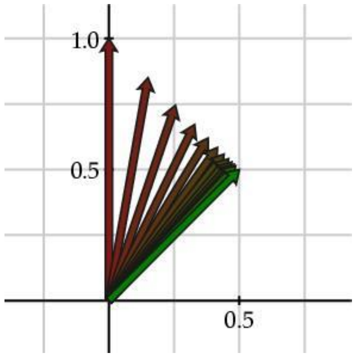
$$H = \begin{bmatrix} 0.65 & 0.35 \\ 0.35 & 0.65 \end{bmatrix}$$

$\lambda_1 = 1, \quad \lambda_2 = 0.3$



$$H = \begin{bmatrix} 0.85 & 0.15 \\ 0.15 & 0.85 \end{bmatrix}$$

$\lambda_1 = 1, \quad \lambda_2 = 0.7$



Zbieżność metody zależy od $\frac{\lambda_1}{\lambda_2}$.

$$[x]_{k+1} = [u]_1 + \frac{c_2 \lambda_2^k}{c_1 \lambda_1^k}[u]_2 + \ldots + \frac{c_n \lambda_n^k}{c_1 \lambda_1^k}[u]_n$$

Przypadek, gdy $[x]_1$ nie ma składowej w kierunku $[u]_1$ ($c_1 = 0$).

Przykład: Google PageRank

Każdej stronie P w sieci przypiszemy liczbę – miarę jej ważności $I(P)$.

Załóżmy, że strona P_j ma l_j odnośników. Jeśli jeden z tych odnośników prowadzi do strony P_i, to P_j wniesie wkład do ważności P_i w wysokości $I(P_j)/l_j$. Zatem ważność P_i będzie sumą wszystkich wkładów stron, których odnośniki prowadzą do tej strony.

$$I(P_i) = \sum_{P_j \in S(P_i)} \frac{I(P_j)}{l_j}$$

Klasyczny przykład problemu o jajku i kurze.

Stwórzmy macierz odnośników:

$$H_{ij} = \begin{cases} 1/l_j & \texttt{dla } P_j \in S(P_i) \\ 0 & \texttt{dla } P_j \notin S(P_i) \end{cases}$$

Suma elementów w każdej kolumnie wynosi 1 (chyba, że strona odpowiadająca tej kolumnie nie ma żadnych odnośników do innych stron.

oraz wektor:

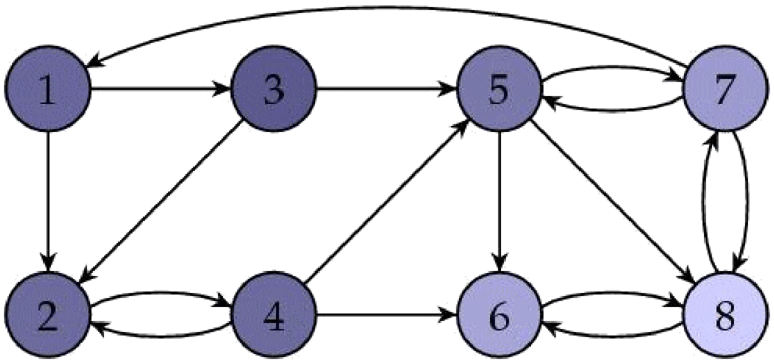
$$I = [I(P_i)]$$

Wektor ważności stron.

Zatem:

$$I = HI$$

I jest wektorem własnym macierzy H o wartości własnej równej 1.



$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 1/3 & 0 & 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1 & 1/3 & 0 \end{bmatrix}$$

Zastosujmy metodę potęgową $I^{k+1} = H\, I^{k}$

I^0	I^1	I^2	I^3	I^4	...	I^{60}	I^{61}
1	0	0	0	0.0278	...	0.06	0.06
0	0.5	0.25	0.1667	0.0833	...	0.0675	0.0675
0	0.5	0	0	0	...	0.03	0.03
0	0	0.5	0.25	0.1667	...	0.0675	0.0675
0	0	0.25	0.1667	0.1111	...	0.0975	0.0975
0	0	0	0.25	0.1806	...	0.2025	0.2025
0	0	0	0.0833	0.0972	...	0.18	0.18
0	0	0	0.0833	0.3333	...	0.295	0.295

Odpowiedzmy na trzy pytania:

- Czy ciąg I^k jest zawsze zbieżny? **NIE!**
- Czy wektor końcowy nie zależy od wyboru wektora początkowego? **NIE!**
- Czy wynik zawiera informację, o którą nam chodziło? **NIE!**

Konieczne modyfikacje.

Modyfikacja nr 1

Rozważmy przykład:

$$H = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

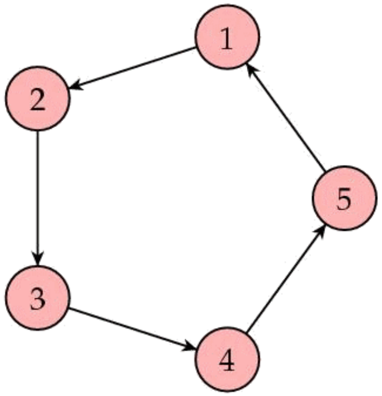
Węzeł bez wyjścia

I^0	I^1	I^2	$I^3 = I$
1	0	0	0
0	1	0	0

Rozwiązanie: całą kolumnę odpowiadającą takiemu węzłowi wypełniamy liczbami *1/n*. (Prawdopodobieństwo przejścia do dowolnej innej strony jest takie samo).

$$H = \begin{bmatrix} 0 & \tfrac{1}{2} \\ 1 & \tfrac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad I = \begin{bmatrix} \tfrac{1}{3} \\ \tfrac{2}{3} \end{bmatrix}$$

Modyfikacja nr 2



$$H = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

I^0	I^1	I^2	I^3	I^4	I^5
1	0	0	0	0	1
0	1	0	0	0	0
0	0	1	0	0	0
0	0	0	1	0	0
0	0	0	0	1	0

Co do licha???

$\lambda_1 = 1, \quad \lambda_2 = 1$

Zbieżność metody zależy od $\dfrac{\lambda_1}{\lambda_2}$.

Twierdzenie Frobeniusa-Perrona.

Jeżeli macierz $n \times n$ jest macierzą pierwotną, to jedna z jej wartości własnych jest dodatnia i większa co do modułu od pozostałych wartości własnych.

Macierz A jest macierzą pierwotną, jeśli istnieje takie k, że każdy element macierzy A^k jest dodatni.

Zmodyfikujmy naszą macierz H:

Macierz, w której wszystkie elementy równe są 1.

$$\mathbf{G} = \alpha \cdot \mathbf{H} + \underbrace{(1-\alpha)}\frac{1}{n}\mathbf{1}$$

Macierz Google

Prawdopodobieństwo, z jakim poruszamy się po sieci zgodnie z macierzą H

Prawdopodobieństwo, z jakim wybieramy następny węzeł losowo.

Im większe α, tym większą wagę przykładamy do macierzy rzeczywistych połączeń H.

Dla macierzy Google udowodniono, że $|\lambda_2| = \alpha$. Zatem α powinno być jak najmniejsze.

Jako kompromis, twórcy tej metody wybrali $\alpha = 0.85$.

Liczba iteracji konieczna do uzyskania zbieżności – $50 \div 100$

Rozmiar macierzy $25 * 10^9$ stron.

Obliczanie wektora I trwa około 24 h.

Odwrotna metoda potęgowa

Służy do określenia najmniejszej wartości własnej.

$$[\mathbf{A}][x] = \lambda[x]$$

$$[\mathbf{A}]^{-1}[\mathbf{A}][x] = \lambda[\mathbf{A}]^{-1}[x]$$

$$[x] = \lambda[\mathbf{A}]^{-1}[x]$$

$$[\mathbf{A}]^{-1}[x] = \frac{[x]}{\lambda}$$

$\dfrac{1}{\lambda}$ jest wartością własną macierzy odwrotnej $[\mathbf{A}]^{-1}$.

Zatem równanie iterowane ma postać:

$$[x]_{k+1} = [\mathbf{A}]^{-1}[x]_k$$

Liczenie macierzy odwrotnej jest nieefektywne obliczeniowo. Lepsza postać tego równania:

$$[\mathbf{A}][x]_{k+1} = [x]_k$$

A to już rozwiązujemy np. metodą LU.

Dekompozycja QR

Idea:

1. Macierze podobne mają te same wartości własne.
2. Wartości własne macierzy trójkątnej górnej to elementy leżące na przekątnej głównej.

Zatem spróbujmy przekształcić naszą macierz, na macierz podobną, która jest macierzą trójkątną górną.

Definicja: Dwie macierze kwadratowe A i B nazywamy ***macierzami podobnymi***, jeśli istnieje taka macierz nieosobliwa P, że zachodzi związek:

$$B = P^{-1}AP$$

Definicja: Macierz Q jest ***ortogonalna***, jeśli wektory q_i utworzone z jej kolumn mają długość 1 i są wzajemnie prostopadłe. Czyli, $Q = [q_1, \ldots, q_n]$, dla każdego j mamy $|q_j| = 1$ oraz $q_i * q_j = 0$ dla $i \neq j$.

$$Q^T Q = I$$

$$QQ^T = I$$

$$Q^T = Q^{-1}$$

Transformacje ortogonalne nie zniekształcają obrazów (odpowiadają za rotacje i odbicia).

Podstawowa idea dekompozycji QR polega na utworzeniu iterowanej sekwencji macierzy $\{[A_i]\}$ podobnych do pierwotnej macierzy $[A]$, które zbiegają do takiej postaci, której wartości własne są dostępne.

Twierdzenie: Niech $[A] \in R^{nxn}$ i niech $|\lambda_1| > \ldots > |\lambda_n| > 0$. Wtedy sekwencja $\{[A_i]\}$ dana poniższym algorytmem zbiega do macierzy trójkątnej górnej.

Algorytm

$$
\boxed{
\begin{array}{l}
[A]_1 = [A] \\
\text{for } k = 1..\text{kmax} \\
\qquad [A]_k \rightarrow [Q]_k[R]_k \\
\qquad [A]_{k+1} \leftarrow [R]_k[Q]_k
\end{array}
}
$$

Zwróćmy uwagę, że

$$[A]_k = [Q]_k[R]_k$$

$$[Q]_k^T[A]_k = [Q]_k^T [Q]_k[R]_k$$

$$[R]_k = [Q]_k^T[A]_k$$

$$[A]_{k+1} = [R]_k[Q]_k$$

$$[A]_{k+1} = [Q]_k^T[A]_k[Q]_k$$

Czyli $[A]_{k+1}$ i $[A]_k$ to macierze podobne.

Macierz Householdera

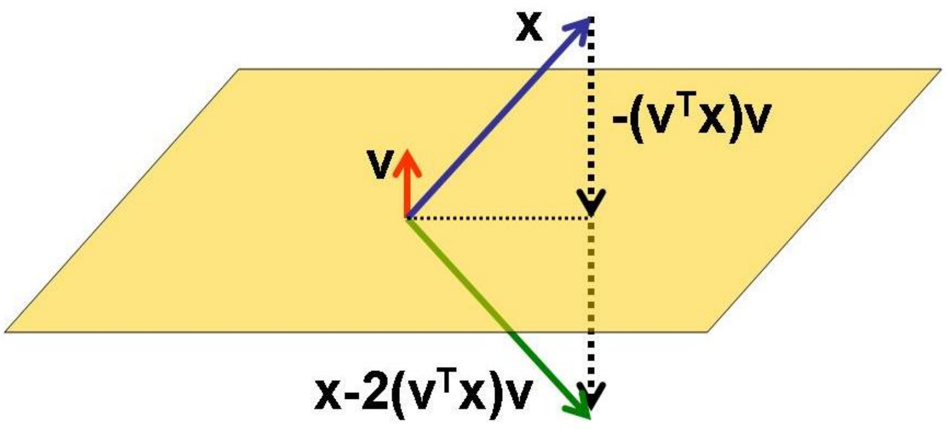
Macierz Householdera H zwana również refleksją (odbiciem) symetryczna i ortogonalna macierz przekształcenia wektora, które odbija go względem pewnej płaszczyzny.

Metoda Householdera jest najczęściej używaną metodą dekompozycji QR.

$$[H] = [I] - \frac{2}{[v]^T [v]} [v][v]^T$$

$$[H][x] = [x]'$$

$[v]$ – wektor określający płaszczyznę odbicia



Schemat dekompozycji przy pomocy macierzy Householdera

Wektor odbicia $[v]$ musi zapewnić następujący ciąg przekształceń macierzy $[A]$:

1. Weźmy pierwszą kolumnę i znajdźmy wektor $[v]$ taki, aby pierwszy wektor (kolumna) macierzy $[H]^1[A]$ miał tylko jedną składową.

$$\underset{[A]}{\begin{bmatrix} \boxed{\begin{matrix} x \\ x \\ x \\ x \end{matrix}} & \begin{matrix} x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \end{matrix} \end{bmatrix}} \Rightarrow \underset{[H]^1[A]}{\begin{bmatrix} \boxed{\begin{matrix} \alpha \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{matrix}} & \begin{matrix} x' & x' & x' \\ x' & x' & x' \\ x' & x' & x' \\ x' & x' & x' \end{matrix} \end{bmatrix}}$$

2. Kolejny wektor $[v]$ powinien zmienić drugą kolumnę macierzy $[H]^1[A]$ (tak, by kolumna ta w nowej macierzy $[H]^2[H]^1[A]$ miała tylko dwie składowe) i jednocześnie zachować postać pierwszej kolumny $[H]^1[A]$,

$$\underset{[H]^1[A]}{\begin{bmatrix} \begin{matrix} \alpha \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{matrix} & \boxed{\begin{matrix} x' \\ x' \\ x' \\ x' \end{matrix}} & \begin{matrix} x' & x' \\ x' & x' \\ x' & x' \\ x' & x' \end{matrix} \end{bmatrix}} \Rightarrow \underset{[H]^2[H]^1[A]}{\begin{bmatrix} \begin{matrix} \alpha \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{matrix} & \boxed{\begin{matrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ 0 \\ 0 \end{matrix}} & \begin{matrix} x'' & x'' \\ x'' & x'' \\ x'' & x'' \\ x'' & x'' \end{matrix} \end{bmatrix}}$$

3. I tak dalej…

Taką transformację zapewnia wektor:

$$[v] = [a_i] + \|a_i\| [e]$$

gdzie

- wektor $[a_i]$ – jest i-tą kolumną aktualnie przekształcanej macierzy z zerami w wierszach < i

- $||a_i||$ - jest długością (normą) wektora $[a_i]$
- wektor $[e]$ – wektor zerowy, którego i-ty element jest równy 1.

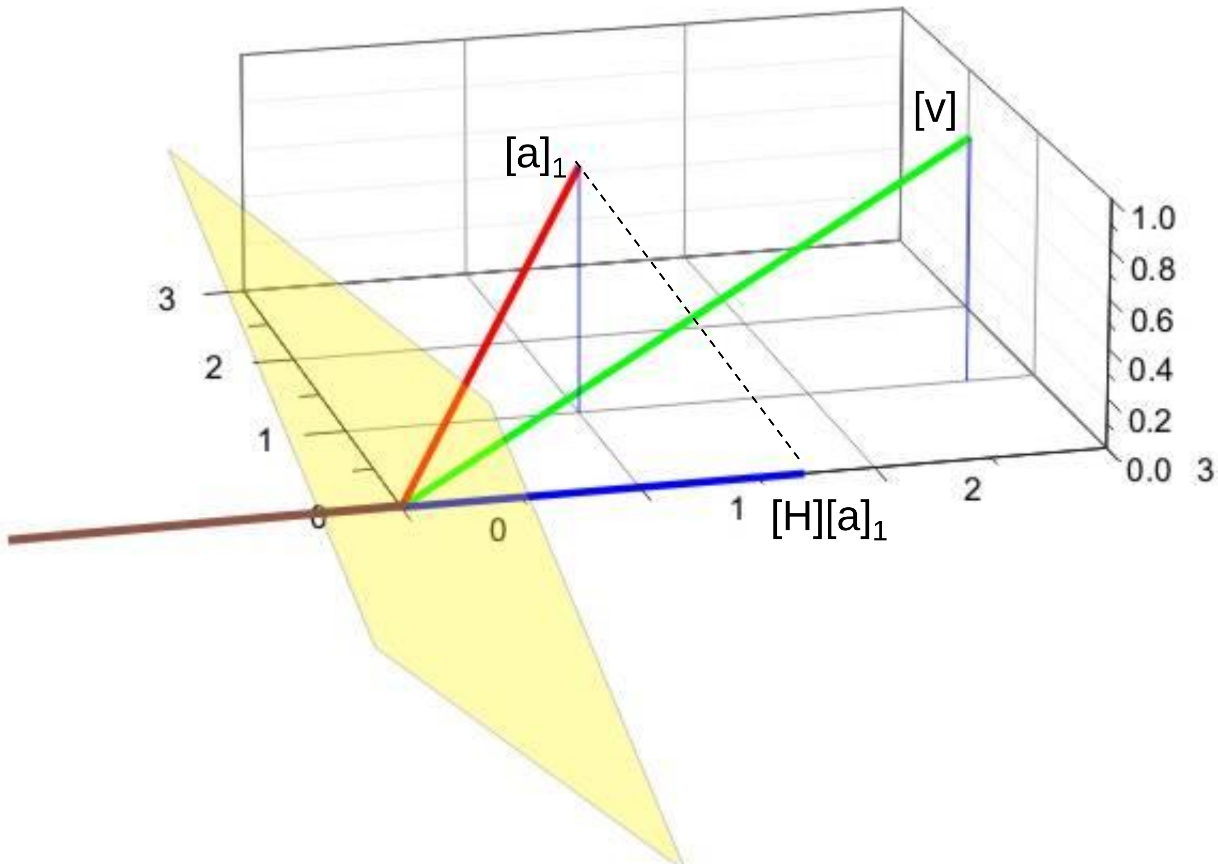
Przykład

$$[A] = \begin{bmatrix} \boxed{\begin{matrix}1\\1\\1\end{matrix}} & \begin{matrix}2\\4\\4\end{matrix} & \begin{matrix}-1\\5\\1\end{matrix} \end{bmatrix} \qquad [v] = \begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix} + \sqrt{3}\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}2.73\\1\\1\end{bmatrix}$$

$$[v]^T[v] = [2.73 \quad 1 \quad 1]\begin{bmatrix}2.73\\1\\1\end{bmatrix} = 9.46 \qquad [v][v]^T = \begin{bmatrix}2.73\\1\\1\end{bmatrix}[2.73 \quad 1 \quad 1] = \begin{bmatrix}7.46 & 2.73 & 2.73\\2.73 & 1 & 1\\2.73 & 1 & 1\end{bmatrix}$$

$$[H] = [I] - \frac{2}{[v]^T[v]}[v][v]^T = \begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\\0 & 0 & 1\end{bmatrix} - \frac{2}{9.46}\begin{bmatrix}7.46 & 2.73 & 2.73\\2.73 & 1 & 1\\2.73 & 1 & 1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}-0.58 & -0.58 & -0.58\\-0.58 & 0.79 & -0.21\\-0.58 & -0.21 & 0.79\end{bmatrix}$$

$$[H][A] = \begin{bmatrix}-0.58 & -0.58 & -0.58\\-0.58 & 0.79 & -0.21\\-0.58 & -0.21 & 0.79\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 2 & -1\\1 & 4 & 5\\1 & 4 & 1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1.73 & -5.77 & -2.89\\0 & 1.15 & 4.31\\0 & 1.15 & 0.31\end{bmatrix}$$



[v]
[a]$_1$
[H][a]$_1$
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
3
2
1
0
0
1
2
3

$$[H][A] = \begin{bmatrix} 1.73 & -5.77 & -2.89 \\ 0 & 1.15 & 4.31 \\ 0 & 1.15 & 0.31 \end{bmatrix}$$

$$[v] = \begin{bmatrix} 0 \\ 1.15 \\ 1.15 \end{bmatrix} + \sqrt{2.64}\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 2.79 \\ 1.15 \end{bmatrix}$$

$$[v]^T[v] = [0 \quad 2.79 \quad 1.15]\begin{bmatrix} 0 \\ 2.79 \\ 1.15 \end{bmatrix} = 9.10$$

$$[v][v]^T = \begin{bmatrix} 0 \\ 2.79 \\ 1.15 \end{bmatrix}[0 \quad 2.79 \quad 1.15] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 7.77 & 3.22 \\ 0 & 3.22 & 1.33 \end{bmatrix}$$

$$[H] = [I] - \frac{2}{[v]^T[v]}[v][v]^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{2}{9.10}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 7.77 & 3.22 \\ 0 & 3.22 & 1.33 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.71 & -0.71 \\ 0 & -0.71 & 0.71 \end{bmatrix}$$

$$[H]_2[H]_1[A] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.71 & -0.71 \\ 0 & -0.71 & 0.71 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1.73 & -5.77 & -2.89 \\ 0 & 1.15 & 4.31 \\ 0 & 1.15 & 0.31 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1.73 & -5.77 & -2.89 \\ 0 & -1.63 & -3.26 \\ 0 & 0 & -2.83 \end{bmatrix}$$

$$H_n \cdots H_2 H_1 A = R$$

$$H_1 H_2 \cdots \boxed{H_n H_n} \cdots H_2 H_1 A = \underbrace{H_1 H_2 \cdots H_n}_{Q} R$$

H jest symetryczna zatem

$$H_n = H_n^T$$

H jest ortogonalna zatem

$$H_n^T = H_n^{-1}$$

czyli $H_n H_n = I$

Ostatecznie: $A = QR$

Zatem rozłożyliśmy macierz A na macierz ortogonalną i macierz trójkątną.

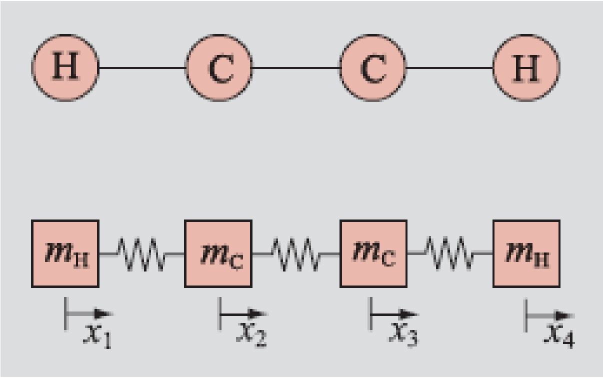
```
[A]_1 = [A]
for k = 1..kmax
        [A]_k = [Q]_k[R]_k
        [A]_{k+1} = [R]_k[Q]_k
```

Zatem to właśnie zrobiliśmy.

$$
\begin{array}{ccccc}
A & & R & & Q \\
\begin{pmatrix} 6.000 & 2.120 & 2.040 \\ 2.830 & 2.000 & -1.150 \\ 1.630 & 1.150 & -2.000 \end{pmatrix} & = & \begin{pmatrix} -1.730 & -5.770 & -2.890 \\ 0.000 & -1.630 & -3.270 \\ 0.000 & 0.000 & -2.830 \end{pmatrix} & * & \begin{pmatrix} -0.577 & -0.577 & -0.577 \\ 0.816 & -0.408 & -0.408 \\ 0.000 & -0.707 & 0.707 \end{pmatrix} \\
\begin{pmatrix} 7.430 & -0.642 & 0.759 \\ -0.233 & -0.429 & 2.870 \\ 0.276 & 0.507 & -1.000 \end{pmatrix} & = & \begin{pmatrix} -6.830 & -2.970 & -0.837 \\ 0.000 & -1.010 & 2.730 \\ 0.000 & 0.000 & -1.150 \end{pmatrix} & * & \begin{pmatrix} -0.878 & -0.414 & -0.239 \\ 0.478 & -0.761 & -0.439 \\ 0.000 & -0.500 & 0.866 \end{pmatrix} \\
\begin{pmatrix} 7.470 & -0.512 & 0.057 \\ 0.120 & -2.470 & -1.180 \\ -0.057 & 1.180 & 1.000 \end{pmatrix} & = & \begin{pmatrix} -7.440 & 0.609 & -0.631 \\ 0.000 & 0.694 & -2.650 \\ 0.000 & 0.000 & 1.550 \end{pmatrix} & * & \begin{pmatrix} -0.999 & 0.031 & -0.037 \\ -0.049 & -0.645 & 0.763 \\ 0.000 & 0.764 & 0.645 \end{pmatrix} \\
\begin{pmatrix} 7.460 & -0.653 & 0.214 \\ -0.032 & -1.820 & 2.530 \\ 0.003 & 0.169 & 0.354 \end{pmatrix} & = & \begin{pmatrix} -7.470 & 0.561 & -0.031 \\ 0.000 & 2.730 & 1.500 \\ 0.000 & 0.000 & 0.392 \end{pmatrix} & * & \begin{pmatrix} -1.000 & -0.016 & 0.008 \\ 0.018 & -0.902 & 0.431 \\ 0.000 & 0.431 & 0.902 \end{pmatrix} \\
\begin{pmatrix} \boxed{7.460} & -0.628 & -0.143 \\ 0.009 & \boxed{-2.050} & -2.310 \\ -0.000 & 0.054 & \boxed{0.584} \end{pmatrix} & = & \begin{pmatrix} -7.460 & 0.645 & -0.203 \\ 0.000 & 1.830 & -2.490 \\ 0.000 & 0.000 & 0.587 \end{pmatrix} & * & \begin{pmatrix} -1.000 & 0.004 & -0.000 \\ -0.004 & -0.996 & 0.093 \\ 0.000 & 0.093 & 0.996 \end{pmatrix}
\end{array}
$$

Rzeczywiste wartości własne: 7.464 ; -2 ; 0.535

Przykład: widmo wibracyjne acetylenu



$$m_H \frac{d^2 x_1}{dt^2} = -k_{CH} x_1 + k_{CH} x_2$$

$$m_C \frac{d^2 x_2}{dt^2} = k_{CH} x_1 - (k_{CH} + k_{CC}) x_2 + k_{CC} x_3$$

$$m_C \frac{d^2 x_3}{dt^2} = k_{CC} x_2 - (k_{CH} + k_{CC}) x_3 + k_{CH} x_4$$

$$m_H \frac{d^2 x_4}{dt^2} = k_{CH} x_3 - k_{CH} x_4$$

$k_{CH} = 5.92 \cdot 10^2 kg/s^2$

$k_{CC} = 15.8 \cdot 10^2 kg/s^2$

$m_H = 1amu$

$m_C = 12amu$

$amu = 1.6605 \cdot 10^{-27} kg$

$$x_j = A_j e^{i\omega t} \Rightarrow$$

$$\begin{bmatrix} \frac{k_{CH}}{m_H} - \omega^2 & -\frac{k_{CH}}{m_H} & 0 & 0 \\ -\frac{k_{CH}}{m_C} & \frac{(k_{CH}+k_{CC})}{m_C} - \omega^2 & -\frac{k_{CC}}{m_C} & 0 \\ 0 & -\frac{k_{CC}}{m_C} & \frac{(k_{CH}+k_{CC})}{m_C} - \omega^2 & -\frac{k_{CH}}{m_C} \\ 0 & 0 & -\frac{k_{CH}}{m_H} & \frac{k_{CH}}{m_H} - \omega^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Wartości własne :

$$\omega_1^2 = 4.05 \cdot 10^{29}$$
$$\omega_2^2 = 3.86 \cdot 10^{29}$$
$$\omega_3^2 = 1.39 \cdot 10^{29}$$
$$\omega_4^2 = -1.2 \cdot 10^{13}$$

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}$$

$$\lambda_1 = 5.05 \mu m$$
$$\lambda_2 = 2.96 \mu m$$
$$\lambda_3 = 3.03 \mu m$$

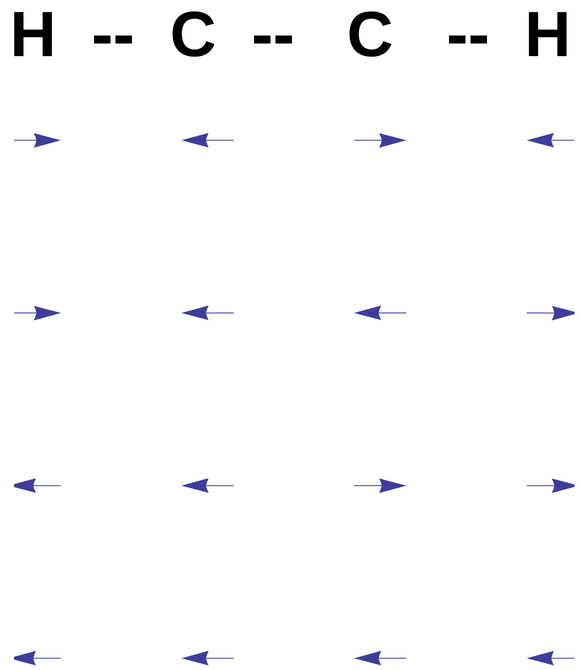
Wektory własne :

$$v_1 = \begin{bmatrix} 0.7 & -0.09 & 0.09 & -0.7 \end{bmatrix}$$

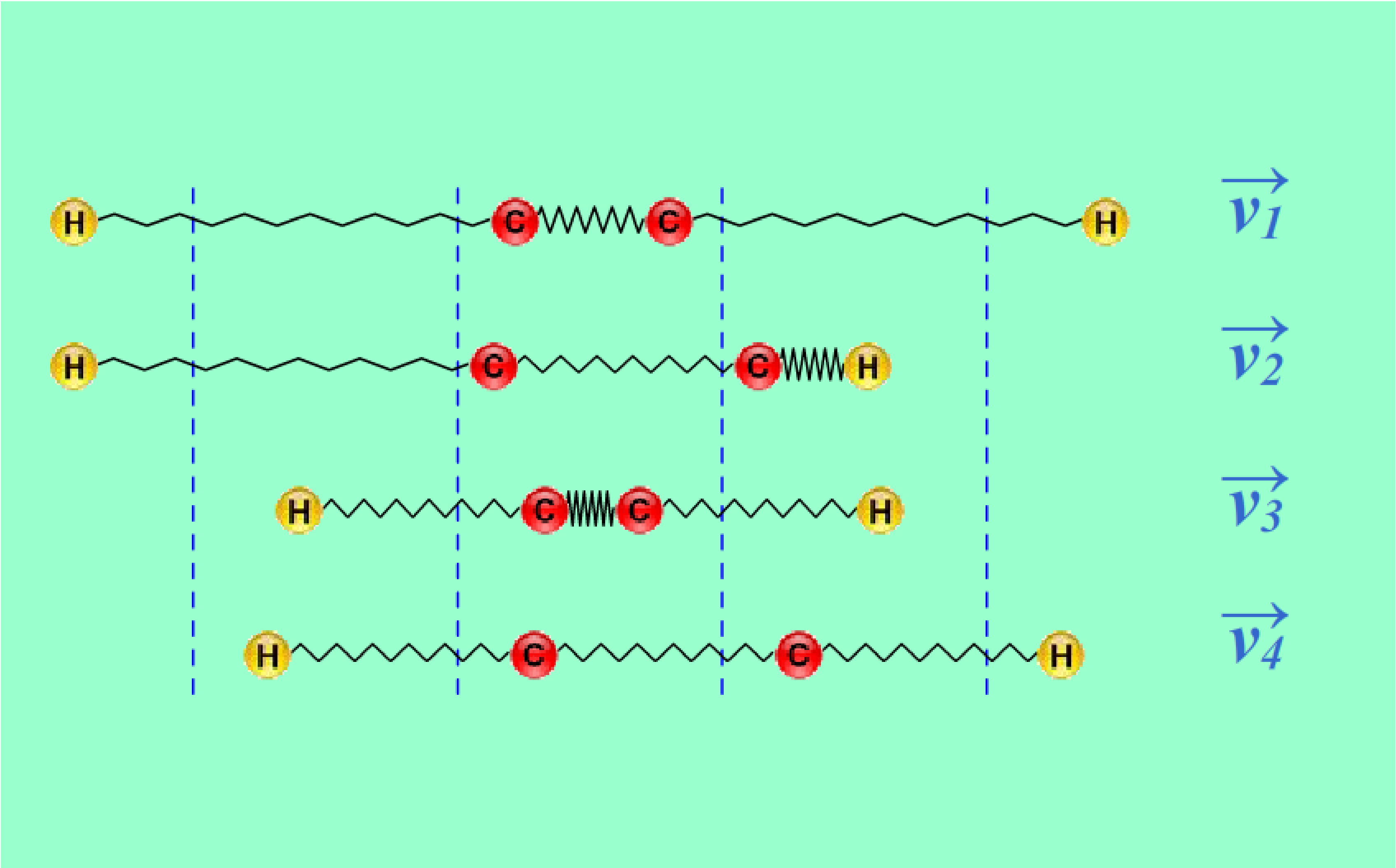
$$v_2 = \begin{bmatrix} 0.7 & -0.06 & -0.06 & 0.7 \end{bmatrix}$$

$$v_3 = \begin{bmatrix} -0.6 & -0.37 & 0.37 & 0.6 \end{bmatrix}$$

$$v_4 = \begin{bmatrix} -0.5 & -0.5 & -0.5 & -0.5 \end{bmatrix}$$



$$v_1 = \begin{bmatrix} 0.7 & -0.09 & 0.09 & -0.7 \end{bmatrix}$$
$$v_2 = \begin{bmatrix} 0.7 & -0.06 & -0.06 & 0.7 \end{bmatrix}$$
$$v_3 = \begin{bmatrix} -0.6 & -0.37 & 0.37 & 0.6 \end{bmatrix}$$
$$v_4 = \begin{bmatrix} -0.5 & -0.5 & -0.5 & -0.5 \end{bmatrix}$$



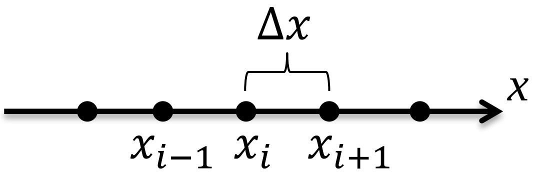
Przykład: równanie Schrödingera

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\hbar = 1, m = 1 \qquad -\frac{d^2\psi}{2dx^2} + V\psi = E\psi$$

wykład nr 6

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} \approx \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{\Delta x^2}$$



$$\psi_0 = \psi_N = 0$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{(\Delta x)^2} + V_1 & -\frac{1}{2(\Delta x)^2} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -\frac{1}{2(\Delta x)^2} & \frac{1}{(\Delta x)^2} + V_2 & -\frac{1}{2(\Delta x)^2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2(\Delta x)^2} & \frac{1}{(\Delta x)^2} + V_3 & -\frac{1}{2(\Delta x)^2} & \cdots & 0 \\ & & & \ddots & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{(\Delta x)^2} + V_{N-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix}$$