4. Simetrični problem lastnih vrednosti Jacobijeva metoda

Bor Plestenjak

NLA

23. marec 2010

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 $A = A_0, A_1, A_2, \ldots$, 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

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

Izračun c in s

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

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

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

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

Algoritem

En korak Jacobijeve metode

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

določi p in q

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

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

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

$s = ct$

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

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

Algoritem

En korak Jacobijeve metode

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

določi p in q

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

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

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

$s = ct$

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

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

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

Algoritem

En korak Jacobijeve metode

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

določi p in q

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

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

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

$s = ct$

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

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

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

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

Algoritem

En korak Jacobijeve metode

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

določi p in q

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

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

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

$s = ct$

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

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

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

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

Konvergenca Jacobijeve metode

Definicija

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

Konvergenca Jacobijeve metode

Definicija

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

Lema

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

$$\mathrm{off}(\widetilde{A})^2 = \mathrm{off}(A)^2 - 2a_{pq}^2.$$

Konvergenca Jacobijeve metode

Definicija

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

Lema

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

$$\mathrm{off}(\widetilde{A})^2 = \mathrm{off}(A)^2 - 2a_{pq}^2.$$

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

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

- 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.

Zgodovina

- 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.