Iterativne metode podprostorov 2010/2011
Domače naloge

Naloge so razdeljene v 6 skupin. Za pozitivno oceno morate rešiti toliko nalog, da bo končna vsota za pozitivno oceno vsaj 8 točk oz. vsaj 10 točk za oceno 10. Za to, katere naloge boste reševali, se lahko odločite sami, veljati mora le, da iz vsake izmed naslednjih skupin (A,B,C,D,X,Y) izberete vsaj eno nalogo. Naloge iz skupin X in Y so vredne dve točki, ostale pa po eno.

Rešitve nalog skupaj z opisom reševanja in računalniškimi programi oddajte po elektronski pošti. Ko boste oddali naloge, se lahko domenite še za ustni zagovor rešitev. Končna ocena bo odvisna od kvalitete opravljenih domačih nalog in ustnega zagovora.

V nalogah, kjer je potrebno implementirati algoritem v Matlabu lahko uporabljate programe Matlab, Octave ali Scilab. Če Matlab ni eksplicitno naveden, lahko uporabljate tudi Mathematico, za ostalo pa je potreben predhoden dogovor.

Na Spletni učilnici najdete še datoteke z matrikami in povezave na gradivo, povezano z nalogami.

Popravki:

- (16.3.2011): pri nalogi D.1 je v točki c) popravljena definicija δ_k.
- (17.3.2011): pri nalogi Y.2 sta pravilni datoteki z matrikama 294 in 297.
- (13.4.2011): pri nalogi D.1 je točka d) podrobneje definirana, pri nalogi A.3 je popravljena definicija v_j in dodana predpostavka $v_0 = 0$.

(A.1) Dokažite, da metoda GMRES(j) (GMRES s ponovnim zagonom po j korakih) za reševanje sistema $Ax = b$ konvergira za poljuben začetni vektor natanko takrat, ko posplošena zaloga vrednosti matrike A, ki je definirana kot

$$F_j(A) = \left\{ \begin{bmatrix} y^H A y \\ y^H A^2 y \\ \vdots \\ y^H A^j y \end{bmatrix} : y \in \mathbb{C}^n, \|y\| = 1 \right\},$$

ne vsebuje ničelnega vektorja.

(A.2) Naj bo A taka normalna matrika, da za vse njene lastne vrednosti λ velja

$$|\mathrm{Re}(\lambda)| \geq |\mathrm{Im}(\lambda)|.$$

Pokažite, da za tako matriko metoda GMRES(2) (GMRES s ponovnim zagonom po dveh korakih) za reševanje sistema $Ax = b$ konvergira za poljuben začetni vektor.

(A.3) Denimo, da tako kot pri Lanczosevi metodi, začnemo z normiranim vektorjem v_1, preostale pa izračunamo po tričlenski rekurzivni formuli (kjer privzamemo $\beta_0 = 0$ in $v_0 = 0$)

$$\begin{aligned} \widetilde{v}_{j+1} &= A v_j - \alpha_j v_j - \beta_{j-1} v_{j-1}, \\ v_{j+1} &= \widetilde{v}_{j+1}/\gamma_j, \quad \text{kjer je } \gamma_j = \|\widetilde{v}_{j+1}\|. \end{aligned}$$

Skalarji γ_j so izbrani tako, da so vektorji v_j normirani, medtem ko so skalarji α_j in β_j poljubni.

Denimo, da to rekurzijo izvajamo do največ $(n+2)/2$ korakov. Pokažite, da potem obstaja tak neničelni vektor w_1, da velja

$$\langle v_j, (A^H)^k w_1 \rangle = 0$$

za vse $k < j-1$, kjer je $j = 2, \ldots, \left[\frac{n+2}{2}\right]$.

(B.1) Iz zbirke [5] naložite naslednje matrike (na voljo so tudi v spletni učilnici): 933, 1220 in 1422. Za vsako izmed matrik poskusite rešite linearni sistem $Ax = b$ z iterativnimi metodami, ki so na voljo v Matlabu: `gmres`, `minres`, `pcg`, `bicg`, `qmr`, `symmlq`, `bicgstab`. Če desna stran ni podana zraven problema, potem vzemite vektor $b = Ae$, kjer je e vektor samih enic, za začetni približek pa $x_0 = 0$.

- Ugotovite, katere metode so primernejše za katero matriko in to obrazložite.
- Pri metodah, kjer je možno uporabiti ponoven zagon (kot npr. GMRES), ugotovite optimalno izbiro maksimalne velikosti podprostorov in raziščite vpliv izbire velikosti na konvergenco.
- Poskusite poiskati ustrezno predpogojevanje, ki izboljša konvergenco.

(B.2) Iz zbirke [5] naložite naslednje matrike (na voljo so tudi v spletni učilnici): 1224, 1311 in 1877. Za vsako izmed matrik poskusite rešite linearni sistem $Ax = b$ z iterativnimi metodami, ki so na voljo v Matlabu: `gmres`, `minres`, `pcg`, `bicg`, `qmr`, `symmlq`, `bicgstab`. Če desna stran ni podana zraven problema, potem vzemite vektor $b = Ae$, kjer je e vektor samih enic, za začetni približek pa $x_0 = 0$.

- Ugotovite, katere metode so primernejše za katero matriko in to obrazložite.
- Pri metodah, kjer je možno uporabiti ponoven zagon (kot npr. GMRES), ugotovite optimalno izbiro maksimalne velikosti podprostorov in raziščite vpliv izbire velikosti na konvergenco.
- Poskusite poiskati ustrezno predpogojevanje, ki izboljša konvergenco.

(B.3) Na strani 19 v [1] lahko najdete opis modela Brusselator za reševanje sistema parcialnih diferencialnih enačb iz kemije. V Matlabu sestavite program, ki bo generiral matriko A, ki jo dobimo z diskretizacijo in je odvina od parametra L.

Sistem je stabilen, če za vse lastne vrednosti λ dobljene matrike velja, da je $\mathrm{Re}(\lambda) < 0$. Izkaže se, da je sistem pri $L = 0.5$ stabilen, pri $L = 1$ pa nestabilen. Potrebno je določiti vrednost parametra L, pri katerem pride do prehoda iz stabilnega v nestabilen sistem.

Za preverjanje pravilne konstrukcije lahko matrike primerjate z matrikami, ki so objavljene v zbirki [5], ki je na voljo tudi v spletni učilnici. Tako je pod število 1630 matrika velikosti 200×200 pri $L = 0.5$, pod število 1631 pa matrika pri $L = 1$.

Pri vašem računanju uporabite na koncu matrike velikosti vsaj 10000×10000. Opišite postopek in katere numerične metode so najbolj primerne.

(O.1) Zapišite metodo podobno CG za reševanje linearnega sistema $Ax = b$ z matriko oblike $A = I - B$, kjer je matrika B poševno hermitska, torej $B = -B^H$. Metoda naj na vsakem koraku minimizira 2-normo ostanka $b - Ax_j$.

Metodo implementirajte v Matlabu in preizkusite na večjem testnem primeru.

(O.2) V Matlabu implementirajte metodo CG brez in s predpogojevanjem. Preizkusite jo na testnih matrikah 37, 757 in 813 iz zbirke [5]. Če desna stran ni podana zraven problema, potem vzemite vektor $b = Ae$, kjer je e vektor samih enic. Kaj bi lahko izbrali za predpogojevanje?

(O.3) V Matlabu implementirajte metodo GMRES(j) brez in s predpogojevanjem. Preizkusite jo na testnih matrikah 214, 738 in 2335 [5]. Če desna stran ni podana zraven problema, potem vzemite vektor $b = Ae$, kjer je e vektor samih enic. Kaj bi lahko izbral za predpogojevanje?

(O.4) Za brezdimenzijski geometrijski faktor F za pokončno prizmo, katere presek je območje $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ z robom $\partial\Omega$, velja, da je

$$F = \frac{4\pi}{S^2} \int_\Omega \psi dS,$$

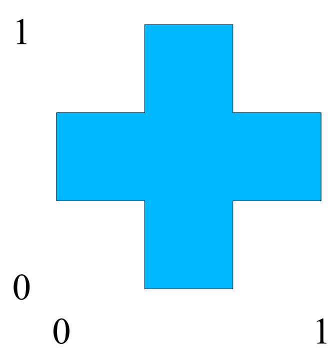
kjer je ψ torzijska funkcija preseka, kar pomeni, da je ψ rešitev paricalne diferencialne enačbe

$$-\Delta\psi = 2$$

prirobnem pogoju

$$\psi|_{\partial\Omega} = 0.$$

Na 6 decimalk oziroma čim bolj natančno izračunajte F za prizmo s presekom, ki ga dobite, če enotski kvadrat razdelite na 3×3 enake dele in odstranite vse vogalne dele.



Diferencialno enačbo aproksimirajte s pettočkovno shemo in s primerno iterativno metodo rešite dobljeni razpršeni sistem. Dobljene točke iz mreže vstavite v izbrano kvadraturno pravilo. Kako velik sistem potrebujete, da pridete to 6 točnih decimalk? Sestavite program v Matlabu, ki reši nalogo.

(D.1) Naj bo A simetrična matrika. Če izvedemo k korakov Lanczoseve metode, dobimo $AV_k = V_{k+1}T_{k+1,k} = V_kT_k + \beta_k v_{k+1}e_k^T$, kjer je

$$T_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{k-1} \\ & & \beta_{k-1} & \alpha_k \end{bmatrix}.$$

Naj bodo $\theta_1, \ldots, \theta_k$ Ritzeve vrednosti, $\widetilde{\theta}_1, \ldots, \widetilde{\theta}_k$ pa harmonične Ritzeve vrednosti matrike A glede na V_k. Podobno naj bodo $\theta_1(\sigma), \ldots, \theta_k(\sigma)$ Ritzeve vrednosti, $\widetilde{\theta}_1(\sigma), \ldots, \widetilde{\theta}_k(\sigma)$ pa harmonične Ritzeve vrednosti matrike $A - \sigma I$ glede na isti podprostor kot prej. Pokažite, da veljajo naslednje zveze

a) $\theta_i(\sigma) = \theta_i - \sigma$,

b) $\widetilde{\theta}_i(\sigma)$ so rešitve enačbe $\det\Big((T_{k,k} - \sigma I)(T_{k,k} - (\sigma + \widetilde{\theta})I) + \beta_k^2 e_k e_k^T\Big) = 0$.

c) Lastne vrednosti $(k+1) \times (k+1)$ matrike

$$\begin{bmatrix} T_k - \sigma I & \beta_{k+1} e_k \\ \beta_{k+1}^T e_k^T & \beta_{k+1}^2/\delta_k \end{bmatrix},$$

kjer je $\delta_k^{-1} = e_k^T (T_k - \sigma I)^{-1} e_k$, so 0 in $\widetilde{\theta}_1(\sigma), \ldots, \widetilde{\theta}_k(\sigma)$.

d) Uporabite točko c) in pokažite, da se Ritzeve in harmonične Ritzeve vrednosti $A - \sigma I$ prepletajo v smislu

$$\cdots < \widetilde{\theta}_{-1}(\sigma) < \theta_{-1}(\sigma) < 0 < \theta_1(\sigma) < \widetilde{\theta}_1(\sigma) < \cdots,$$

kjer so novi indeksi določeni glede na oddaljenost 0 v pozitivni oz. negativni smeri.

(D.2) Naj bo U unitarna matrika in $\tau \in \mathbb{C}$ točka z absolutno vrednostjo 1, ki se razlikuje od vseh lastnih vrednosti matrike U. Definiramo

$$A = i(U + \tau I)(U - \tau I)^{-1}.$$

Pokažite:

a) Vse lastne vrednosti matrike A so realne.

b) Lastna vrednost matrike U, ki je najbližja τ, se preslika v dominantno lastno vrednost matrike A.

c) Matrika A je hermitska.

Iz zgornjih ugotovitev sledi, da lahko računanje lastnih vrednosti unitarne matrike prevedemo na hermitski problem.

(X.1) V knjigi [4] lahko v razdelku 6.5 najdete opis dveh različic bločnega Arnoldijevega algoritma, ki sta označena kot algoritma 6.8 in 6.9. Razvijte sorodni različici bločne Lanczosove metode za računanje lastnih vrednosti simetrične matrike (kjer naj bo velikost bloka parameter metode) in ju implementirajte v Matlabu. Metodi preizkusite na matriki, ki jo dobite v Matlabu z ukazom `A=delq(numgrid('S',40)))` in ju primerjajte z navadno Lanczosevo metodo (ki ji ustreza vaša metoda, če so bloki velikosti 1). Kaj lahko poveste o računanju večkratnih lastnih vrednosti v odvisnosti od velikosti bloka?

(X.2) Rešite nalogo 11 (točke a, b in c) na strani 227 iz knjige [3], ki zahteva razvoj bločne variante BiLanczosevega algoritma za reševanje nesimetričnega linearnega sistema.

Metodo imlementirajte v Matlabu, pri čemer naj bo velikost bloka parameter metode. Preizkusite jo na večjem testnem primeru in jo primerjajte z navadno BiLanczosevo metodo (z velikostjo bloka 1). Za test uporabite matriki številka 214 in 2335 iz zbirke [5], ki je na voljo tudi v spletni učilnici.

(X.3) Na predavanjih smo obravnavali metodo DIOM, ki jo najdete tudi v knjigi [3] na strani 156. V originalnem algoritmu se izvaja LU algoritem brez pivotiranja, zaradi česar se lahko algoritem kritično zaustavi. Rešitev je uporaba LU z delnim pivotiranjem.

Razvijte varianto DIOM z delnim pivotiranjem in jo implementirajte v Matlabu. Metodo preizkusite na večjem testnem primeru. Za test uporabite [5], ki je na voljo tudi v spletni učilnici.

(X.4) Metodo GMRES lahko razvijemo tudi tako, da namesto Gram-Schmidtove ortogonalizacije uporabljamo Householderjeva zrcaljenja. Podrobnosti lahko najdete v knjigi [3] v razdelku 6.5.2.

GMRES z Householderjevimi zrcaljenji implementirajte v Matlabu. Metodo preizkusite na večjem testnem primeru. Za test uporabite matriki številka 214 in 2335 iz zbirke [5], ki je na voljo tudi v spletni učilnici.

(X.5) Pri polinomskem predpogojevanju vzamemo $M^{-1} = s(A)$, kjer je s polinom nizke stopnje. Poseben primer je pospešitev Čebiševa, kjer uporabimo polinome Čebiševa. Več o tem lahko najdete v knjigi [3] v razdelku 12.3.2.

V Matlabu implementirajte CG s pospešitvijo Čebiševa in metodo primerjajte na nekaj testnih primerih. Kako izberete interval $[\alpha, \beta]$, ki ga potrebujemo za definicijo polinomov?

Primerjajte metodo na večjem testnem primeru. Za test uporabite matriki številka 37 in 757 iz zbirke [5], ki sta na volji tudi v spletni učilnici.

(Y.1) V Matlabu implementirajte Jacobi-Davidsonovo metodo za hermitske matrike s harmoničnimi Ritzevimi vrednostmi. Algoritem najdete v knjigi [2] v poglavju 4.7 (oziroma na `http://web.eecs.utk.edu/~dongarra/etemplates/node145.html`). Implementacijo preizkusite na testnem primeru iz knjige [2] in poskusite priti do podobnih rezultatov.

(Y.2) V Matlabu implementirajte Jacobi-Davidsonovo QZ metodo za posplošeni problem lastnih vrednosti $Ax = \lambda Bx$. Algoritem najdete v knjigi [2] v poglavju 8.4 (oziroma na http://web.eecs.utk.edu/~dongarra/etemplates/node287.html). Program preizkusite na testnem primeru iz knjige [2] in poskusite priti do podobnih rezultatov. Testni primer sta matriki številka 294 (kot A) in 297 (kot B) iz zbirke [5], ki je na voljo tudi v spletni učilnici.

(Y.3) V Matlabu implementirajte metodo racionalnega Krilova za posplošeni problem lastnih vrednosti $Ax = \lambda Bx$. Metodo najdete v knjigi [2] v poglavju 8.4 (oziroma na http://web.eecs.utk.edu/~dongarra/etemplates/node295.html).

Poskusite program predelati tako, da bi z njim lahko iskali vse lastne vrednosti, ki so blizu imaginarni osi. Začne naj v točki αi, nato pa samodejno izbira nove premike oblike βi. Pri tem je potrebno paziti, da že izračunanih lastnih vrednosti ne izračunate še enkrat.

Literatura

[1] Z. Bai et al, A test matrix collection for non-Hermitian eigenvalue problems (Release 1.0). Na voljo na http://www.netlib.org/lapack/lawnspdf/lawn123.pdf

[2] Z. Bai et al, Templates for the solution of algebraic eigenvalue problems: a practical guide. Na voljo na http://www.cs.utk.edu/~dongarra/etemplates/book.html

[3] Y.Saad, Iterative methods for sparse linear systems. Na voljo na http://www-users.cs.umn.edu/~saad/PS/all_pdf.zip

[4] Y.Saad, Numerical methods for large eigenvalue problems, Second Edition. Na voljo na http://www-users.cs.umn.edu/~saad/eig_book_2ndEd.pdf

[5] T. Davis, University of Florida Sparse Matrix Collection. Na voljo na http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/index.html