
ЛЕКЦИЯ 6

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ

1. Методы спуска

На прошлой лекции были рассмотрены итерационные методы вариационного типа. Для системы

$$A\vec{u} = \vec{f},$$

для которой выполняется $A = A^*$, был введен функционал

$$\Phi(\vec{u}, \vec{u}) = (A\vec{u}, \vec{u}) - 2(\vec{f}, \vec{u}) + c.$$

Если же $A \neq A^*$, то в качестве матрицы A нужно рассматривать матрицу $\frac{A + A^*}{2}$. Такая матрица будет самосопряженной.

Было показано, что

$$\Phi(\vec{u}) \rightarrow \min \Leftrightarrow A\vec{u} - \vec{f} = 0.$$

Исходя из этого, можно построить итерационные методы, основанные на минимизации функционала. Вспомним, что градиент функции направлен в сторону ее максимального роста. Поэтому $-\nabla\Phi(\vec{u})$ направлен в сторону максимального убывания функционала. Будем искать приближение к решению в виде:

$$\vec{u}^{(k+1)} = \vec{u}^{(k)} - \alpha_k \nabla\Phi(\vec{u}^{(k)}).$$

Значение α_k можно выбирать из разных соображений.

1.1. Метод наискорейшего спуска

Значение α_k выбирается из условия, что $\Phi(\vec{u}^{(k+1)})$ принимает минимальное значение на выбранной линии.

$$\nabla\Phi(\vec{u}) = 2(A\vec{u} - \vec{f}),$$

$$\nabla\Phi(\vec{u}^{(k)}) = 2(A\vec{u}^{(k)} - \vec{f}) = 2\vec{r}_k,$$

где \vec{r}_k — вектор невязок. Найдем значение $\nabla\Phi(\vec{u}^{(k+1)})$.

$$\begin{aligned}\nabla\Phi(\vec{u}^{(k+1)}) &= (A\vec{u}^{(k+1)}, \vec{u}^{(k+1)}) - 2(\vec{u}^{(k+1)}, \vec{f}) + c = \\ &= (A(\vec{u}^{(k)} - \tau_k \vec{r}_k), \vec{u}^{(k)} - \tau_k \vec{r}_k) - 2(\vec{u}^{(k)} - \tau_k \vec{r}_k, \vec{f}) + c,\end{aligned}$$

где $\tau_k = 2\alpha_k$. В точке минимума

$$\Phi(\tau_k) \rightarrow \min \Leftrightarrow \frac{\partial\Phi}{\partial\tau} = 0,$$

$$\frac{\partial\Phi}{\partial\tau} = -(A\vec{r}_k, \vec{u}^{(k)} - \tau_k \vec{r}_k) - \tau_k(A(\vec{u}^{(k)} - \tau_k \vec{r}_k), \vec{r}_k) + 2(\tau_k \vec{r}_k, \vec{f}) = 0.$$

$$\tau(A\vec{r}_k, \vec{r}_k) + \tau(A\vec{r}_k, \vec{r}_k) = 2(A\vec{r}_k, \vec{u}^{(k)}) - 2(\tau_k \vec{r}_k, \vec{f}).$$

Откуда следует:

$$\tau_k = \frac{(\vec{r}_k, \vec{r}_k)}{(A\vec{r}_k, \vec{r}_k)}.$$

τ_k обеспечивает минимум функционала $\Phi(\vec{u}^{(k+1)})$ на выбранном направлении. Окончательно получим:

$$\begin{aligned}\vec{u}^{(k+1)} &= \vec{u}^{(k)} - \tau_k \vec{r}_k, \\ \vec{u}^{(k+1)} &= \vec{u}^{(k)} - \tau_k(A\vec{u}^{(k)} - \vec{f}),\end{aligned}$$

$$\tau_k = \frac{(\vec{r}_k, \vec{r}_k)}{(A\vec{r}_k, \vec{r}_k)}.$$

Получим обычный метод простой итерации.

1.2. Метод минимальных невязок

Метод минимальных невязок основан на таком же подходе, что и метод наискорейшего спуска, но значения параметра α_k выбираются другим образом.

Рассмотрим последующее приближение в виде:

$$\vec{u}^{(k+1)} = \vec{u}^{(k)} - \tau_k \vec{r}_k.$$

Значение τ_k будем выбирать из условия

$$\|\vec{r}_{k+1}\| \rightarrow \min.$$

Будем минимизировать не функционал, а невязку системы уравнений. Для этого перепишем исходное уравнение в терминах невязок. Умножим обе части уравнения на матрицу A .

$$\begin{aligned}A\vec{u}^{(k+1)} &= A\vec{u}^{(k)} - \tau_k A\vec{r}_k, \\ \underbrace{A\vec{u}^{(k+1)} - \vec{f}}_{\vec{r}_{k+1}} &= \underbrace{A\vec{u}^{(k)} - \vec{f}}_{\vec{r}_k} - \tau_k A\vec{r}_k.\end{aligned}$$

Откуда следует:

$$\vec{r}_{k+1} = \vec{r}_k - \tau_k A\vec{r}_k.$$

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

Значение τ_k выбирается из условия минимума нормы $\|\vec{r}_{k+1}\|$.

$$(\vec{r}_{k+1}, \vec{r}_{k+1}) = \|\vec{r}_{k+1}\|^2 = (\vec{r}_k - \tau_k A\vec{r}_k, \vec{r}_k - \tau_k A\vec{r}_k) = (\vec{r}_k, \vec{r}_k) - \tau_k (A\vec{r}_k, \vec{r}_k) - \tau_k (\vec{r}_k, A\vec{r}_k) + \tau_k^2 (A\vec{r}_k, A\vec{r}_k).$$

Обозначим $a = (A\vec{r}_k, A\vec{r}_k)$, $b = -2(A\vec{r}_k, \vec{r}_k)$. Тогда для значения параметра τ_k получим:

$$\tau_k = -\frac{b}{2a} = \frac{(A\vec{r}_k, \vec{r}_k)}{(A\vec{r}_k, A\vec{r}_k)}.$$

1.3. Метод сопряженных градиентов

Пусть известны значения невязок $\vec{r}^{(0)}, \vec{r}^{(1)}, \dots, \vec{r}^{(k-1)}$. Выберем следующее приближение так, чтобы невязка была ортогональна всем предыдущим.

$$\vec{r}^{(k)} \perp \vec{r}^{(j)}, \quad j = 0, 1, \dots, k-1.$$

Все невязки образуют базис и являются линейно независимыми. Пусть количество невязок равно размерности системы. Это означает, что следующая невязка будет тождественно равна нулю. Таким образом, за n шагов можно получить точное решение системы. В этом смысле метод сопряженных градиентов является прямым, а не итерационным. Однако этот метод используют как итерационный, не доводя процесс до конца и заканчивая гораздо раньше, чем на n -ом шаге.

Вектора $\vec{r}^{(0)}, A\vec{r}^{(0)}, A^2\vec{r}^{(0)}, \dots, A^{n-1}\vec{r}^{(0)}$ образуют базис. Также базис образуют вектора $\vec{r}^{(0)}, \vec{r}^{(1)}, \dots, \vec{r}^{(k-1)}, A\vec{r}^{(k-1)}$. Можно показать, что в последнем базисе невязка связана только с тремя последними коэффициентами.

$$\vec{r}^{(k)} = \gamma_{k-1}r^{(k-1)} + \gamma_{k-2}r^{(k-2)} + \gamma_k A r^{(k-1)}.$$

Тогда можно построить итерационный процесс:

$$\vec{r}^{(0)} = \vec{s}^{(1)} = A\vec{u}^{(0)} - \vec{f}.$$

1.

$$\alpha_k = \frac{(\vec{r}^{(k-1)}, \vec{r}^{(k-1)})}{(A\vec{s}^{(k)}, \vec{s}^{(k)})},$$

2.

$$\vec{r}^{(k)} = \vec{r}^{(k-1)} - \alpha_k A\vec{s}^{(k)},$$

3.

$$\vec{u}^{(k)} = \vec{u}^{(k-1)} - \alpha_k \vec{s}^{(k)},$$

4.

$$\beta_k = \frac{(\vec{r}^{(k)}, \vec{r}^{(k)})}{(\vec{r}^{(k-1)}, \vec{r}^{(k-1)})},$$

5.

$$\vec{s}^{(k+1)} = \vec{r}^{(k)} + \beta_k \vec{s}^{(k)}.$$

К сожалению, этот метод может неконтролируемо накапливать вычислительные ошибки из-за погрешности округления.

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

2. Спектральные задачи

Спектральные задачи относятся к одним из самых трудных задач в вычислительной математике. Они заключаются в вычислении собственных значений и собственных векторов матрицы. Спектральные задачи делятся на несколько типов:

1. Границы спектра $[m, M]$. Пусть $A = A^*$. Тогда $\forall i \lambda_i \in [m, M]$.
2. Полная задача вычисления спектра (λ_i, \vec{l}_i) .
3. Вычисление значения λ_i , ближайшего к заданному параметру σ .

2.1. Нахождение границ спектра

Рассмотрим задачу определения максимального собственного значения $\max_i |\lambda_i|$. Пусть матрица A обладает полным набором (λ_i, \vec{l}_i) . В этом случае собственные вектора $\{\vec{l}_i\}$ образуют базис в R^n . Тогда любой вектор в пространстве можно разложить по базису.

$$\vec{u}^{(0)} = \sum_{i=1}^n c_i \vec{l}_i.$$

Будем считать, что

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_n|.$$

Рассмотрим итерационный процесс.

$$\vec{u}^{(k+1)} = A \vec{u}^{(k)},$$

$$\vec{u}^{(k)} = A \vec{u}^{(k-1)} = A^2 \vec{u}^{(k-2)} = \dots = A^k \vec{u}^{(0)} = \sum_{i=1}^n c_i A^k \vec{l}_i = \sum_{i=1}^n c_i \lambda_i^k \vec{l}_i.$$

Рассмотрим скалярное произведение

$$\begin{aligned} (\vec{u}^{(k+1)}, \vec{u}^{(k)}) &= \left(\sum_{i=1}^n c_i \lambda_i^{k+1} \vec{l}_i, \sum_{i=1}^n c_i \lambda_i^k \vec{l}_i \right) = \\ &= c_1^2 \lambda_1 \lambda_1^{2k} \underbrace{(\vec{l}_1, \vec{l}_1)}_1 + \sum_{\substack{i \neq 1 \\ j \neq 1}} c_i c_j \lambda_1^{k+1} \lambda_j^k (\vec{l}_i - \vec{l}_j). \end{aligned}$$

Тогда получим:

$$\frac{(\vec{u}^{(k+1)}, \vec{u}^{(k)})}{(\vec{u}^{(k)}, \vec{u}^{(k)})} = \lambda_1 + O \left[\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k \right].$$

Отсюда следует, что отношение скалярных произведений будет стремиться к максимальному по абсолютной величине собственному значению матрицы A . Для самосопряженных матриц, когда $A = A^*$:

$$\frac{(\vec{u}^{(k+1)}, \vec{u}^{(k)})}{(\vec{u}^{(k)}, \vec{u}^{(k)})} = \lambda_1 + O \left[\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{2k} \right].$$

В этом случае сходимость будет более быстрой. Такой метод называется **степенным**.



Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

2.2. Вычисление максимального (не по модулю) собственного значения

Пусть матрица A обладает спектром $\{\lambda_i\}$. Тогда при сдвиге матрица $A + aE$ будет обладать спектром $\{\lambda_i + a\}$. Применим степенной метод к матрице $A + aE$.

$$\max_i |\lambda_i + a| = \lambda_{max} + a + \max_i |\lambda_i|.$$



Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

Таким образом, вычитанием сдвига можно получить максимальное (не по модулю) значение λ_i .

Пусть, например, матрица A имеет собственные значения $\lambda_i = -7, -4, 2, 3$.

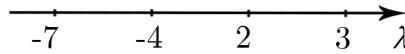


Рис. 6.1

Сдвинем границы спектра на значение, равное 7. Получим максимальное значение 10.

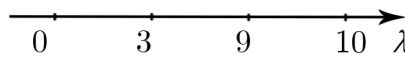


Рис. 6.2

Вычтем из него 7 и получим, что $\lambda_{max} = 3$. Однако, чем сильнее сдвигаем значение λ_i , тем хуже сходимость метода, т. к. сходимость пропорциональна $\sim \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k$.

2.3. Вычисление собственного значения, ближайшего к нулю

Пусть задано начальное приближение $\vec{u}^{(0)}$. Рассмотрим итерационный процесс вида:

$$\vec{u}^{(k+1)} = A^{-1}\vec{u}^{(k)}.$$

Если матрица A обладает собственными значениями λ_i , то матрица A^{-1} обладает значениями $\frac{1}{\lambda_i}$. Тогда степенной метод для такого итерационного процесса даст максимальное значение $\frac{1}{\lambda_i}$, т. е. значение λ_i ближайшее к нулю.

Если требуется найти значение, ближайшее к параметру σ , то нужно устроить итерационный процесс вида:

$$\vec{u}^{(k+1)} = (A + \sigma E)^{-1}\vec{u}^{(k)}.$$

Однако стоит помнить, что вычисление обратной матрицы — очень затратная операция. Степенной метод хорошо работает, когда $\lambda_2 \ll \lambda_1$. Однако в практических приложениях это не всегда так.

2.4. Вычисление полного спектра. Метод вращения

Вычисление полного спектра матрицы — одна из самых трудоемких задач. Скорость сходимости методов очень маленькая. Рассмотрим метод **вращения**.

$$\{\lambda_i, \vec{l}_i\} \Leftrightarrow \Lambda = Q^T A Q,$$

где Λ — диагональная матрица, на диагонали которой расположены собственные значения. Q — ортогональная матрица, т. е. $Q^T Q = E$. Q — матрица вращения во всем пространстве. Будем приближаться к Λ итерационным способом.

$$\tilde{A} = T_{ij}^T A T_{ij},$$

