Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg
Fakultät für Mathematik – Institut für Analysis und Numerik
Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme
Computational Methods for Systems and Control Theory

Wintersemester 2015/16
Dr. Sara Grundel
Carolin Penke

Numerische Lineare Algebra (Eigenwertprobleme) – 6. Hausaufgabe

Abgabe: 21.01.2016 in der Vorlesung
Besprechung: 25.01.2016

Aufgabe 1 (13 Punkte) (Davidson-Verfahren für EWP)

In dieser Hausaufgabe wollen wir ein weiteres Verfahren zur Berechnung von Eigenpaaren großer sparser Matrizen untersuchen. Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Im Algorithmus 1 ist das *Davidson-Verfahren* zur Berechnung des betragsmäßig größten Eigenwertes und des zugehörigen Eigenvektors dargestellt.

Algorithmus 1 Davidson-Verfahren

INPUT: Matrix A, Startvektor u_1, Toleranz $\epsilon \ll 1$

OUTPUT: Approximationen (θ, v) an größten Eigenwert und zugehörigen Eigenvektor

1: $u_1 = u_1/\|u_1\|_2$, $U_1 = [u_1]$, $r = 1$
2: **while** $\|r\|_2 \geq \epsilon$ **do**
3: Konstruiere reduzierte Matrix $M_k := U_k^H A U_k$
4: Berechne größten Eigenwert θ und zugehörigen Eigenvektor s von M_k
5: $v := U_k s$
6: $r = Av - \theta v$
7: Finde neuen Basisvektor t durch Lösung einer *Korrekturgleichung* ((2) oder (3))
8: $t = \mathrm{MGS}(U_k, t)$
9: $U_{k+1} = [U_k,\ u_{k+1} := t/\|t\|_2]$
10: $k = k + 1$
11: **end while**

Der Ausgangspunkt des Davidson-Verfahrens ist ein k-dimensionaler Unterraum $\mathcal{U}_k$ des $\mathbb{C}^n$, der von der orthonormalen Basis $\{u_1, \dots, u_k\}$ aufgespannt wird. Mit der Matrix $U_k := [u_1, \dots, u_k] \in \mathbb{C}^{n\times k}$ wird im Schritt 4 der größte Eigenwert θ und der zugehörige Eigenvektor $s \in \mathbb{C}^k$ der reduzierten Matrix

$$M_k := U_k^H A U_k \in \mathbb{C}^{k\times k}. \tag{1}$$

mittels Standard-Methoden (z.B. QR-Algorithmus) berechnet.

Anschließend werden θ und $v := U_k s$ als Approximationen an ein Eigenpaar von A verwendet und in Schritt 6 wird das zugehörige Residuum r berechnet.

Im Schritt 7 wird nun eine Korrektur t an den Vektor v mittels einer sogenannten Korrekturgleichung ermittelt. Mögliche Varianten sind dabei:

(i) *Diagonale Vorkonditionierung*: lösen des linearen Gleichungssystems

$$(D_A - \theta I)t = -r \text{ mit } D_A := \operatorname{diag}(A). \tag{2}$$

(ii) Approximative Lösung von

$$(A - \theta I)t = -r, \tag{3}$$

mit einer begrenzen Anzahl $m \ll n$ Iterationsschritten eines iterativen Lösers, wie z.B. GMRES, für Gleichungssysteme. Diese Schritte werden häufig *innere Iterationen* genannt.

(iii) Exakte Lösung von (3), d.h. mit LU-Zerlegung oder n Schritte GMRES.

Diese Korrektur wird noch bezüglich $\mathcal{U}_k$ orthonormalisiert (Schritt 8, dabei steht MGS für *modifiziertes Gram-Schmidt-Verfahren*) und als $(k+1)$-ter Basisvektor verwendet.
Der gesamte Vorgang wird wiederholt bis die Norm des Residuums $\|r\|_2$ eine Fehlertoleranz ϵ unterschreitet oder eine maximale Iterationsanzahl erreicht wurde.

Bemerkung: Genauere Informationen zum GMRES (*Generalized Minimal RESidual*) Verfahren gibt es in der Vorlesung zu iterativen Lösern für lineare Gleichungssysteme. Die genaue Arbeitsweise is für diese Aufgabe **nicht** wichtig. Es reicht zu wissen, dass GMRES eng mit dem Arnoldi-Prozess verwandt ist und damit pro Iterationsschritt prinzipiell nur ein Matrix-Vektor-Produkt sowie einige Skalarprodukte benötigt.

Aufgaben:

a) Zeigen Sie, dass die Approximationen θ und $v := U_k s$ (Schritt 4-5) eine *Ritz-Galerkin-Bedingung* erfüllen, d.h.

$$r := Av - \theta v \perp \mathcal{U}_k. \tag{4}$$

In diesem Fall heißt θ *Ritzwert* und v der zughörige *Ritzvektor* von A bzgl. $\mathcal{U}_k$.

b) Für welche spezielle Klasse von Matrizen ist die Korrekturgleichung (2) sinnvoll?

c) Überlegen Sie sich, wie in der nächsten Iteration die neue reduzierte Matrix $M_{k+1} := U_{k+1}^H A U_{k+1}$ mit $U_{k+1} = [U_k, u_{k+1}]$ im Schritt 3 effektiv berechnet werden kann, ohne das Produkt komplett neu aufzustellen.

d) Implementieren Sie das Davidson-Verfahren mit den verschiedenen Korrekturgleichungen **(i)**-**(iii)** in MATLAB®. Benutzen Sie `eig(M)` um das Eigenpaar von M_k zu bestimmen und GMRES als iterativen Löser für die Korrekturgleichung. Benutzen Sie $m = 1,\ 2,\ 5$ im Fall **(ii)** und $m = n$ im Fall **(iii)**. Zur Orthonormalisierung von t sollte das modifizierte Gram-Schmidt-Verfahren (MGS) verwendet werden. Testen Sie das Programm, indem Sie den größten Eigenwert der Matrix A berechnen, die Sie zusammen mit dem MGS auf der Vorlesungs-Homepage finden.

Hinweis: Nutzen Sie die MATLAB® Funktion `gmres` und beschränken Sie die Iterationszahl mit dem `maxiter` Parameter:

```
t=gmres(A-theta*I,r,[],[],maxiter).
```

Ein Funktionskopf könnte beispielsweise so aussehen:

```
[r,lambda,u]=davidson(A,u1,tol,preq,maxouter,maxinner).
```

Dabei ist `u1` ein Startvektor, `tol` die Fehlertoleranz, `preq` ein flag für die verschiedenen Korrekturgleichungen, `maxouter` die Anzahl (äußerer) Davidson-Iterationen und `maxinner` die Anzahl der Iterationen des Lösers der Korrekturgleichung (3). Speichern Sie die Norm des Residuums r in jeder äußeren Iteration und plotten Sie den Verlauf für jede Variante. Beschreiben Sie ihre Beobachtungen in den Fällen **(i)**-**(iii)**.

e) Zu welchem Verfahren aus der Vorlesung ist das Davidson-Verfahren formal äquivalent, wenn man im Schritt 7 einfach $t = -r$ als Korrektur verwendet?

f) Im Fall **(iii)** sollte Ihr Verfahren stagnieren. Wie kann dieses Verhalten erklärt werden?

Aufgabe 2 (7 Punkte) (Harmonische Ritzwerte)

Seien $\mathcal{U}, \mathcal{W}$ lineare Unterräume des $\mathbb{R}^n$ mit Basen $u_1, \ldots, u_k$ und $w_1, \ldots, w_k$. Ein Wert $\theta \in \mathbb{R}$ ist ein harmonischer Ritzwert von A bzgl. des Unterraums $\mathcal{W}$, wenn θ^{-1} ein Ritzwert von A^{-1} bzgl. $\mathcal{W}$ ist. Zeigen Sie die Äquivalenz der folgenden Aussagen für $\mathcal{W} := A\mathcal{U}$

(i) θ ist ein harmonischer Ritzwert von A bzgl. $\mathcal{W}$.

(ii) $Au - \theta u \perp \mathcal{W}$ für $u \in \mathcal{U} \setminus \{0\}$

(iii) Die Eigenwerte von $M := (W^T U)^{-1} W^T A U$ sind die harmonischen Ritzwerte von A, wenn die Matrizen U und W die Basisvektoren von $\mathcal{U}$ bzw. $\mathcal{W}$ enthalten.

Senden Sie Ihre Programme an `penke@mpi-magdeburg.mpg.de`. Der Dateiname sollte Ihren Namen und die zugehörige Hausaufgaben- und Aufgabenummer enthalten, z.B. `name_ha3auf3`. Im Fall mehrerer Programmdateien ist die Verwendung eines Dateiarchivierers empfehlenswert. Geben Sie außerdem bitte die Quellcodes Ihrer Programme in ausgedruckter Form zusammen mit den restlichen Aufgaben ab.