UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO

Finančna matematika – 1. stopnja

Mirjam Pergar

Računanje izotropnih vektorjev

Delo diplomskega seminarja

Mentor: izred. prof. dr. Bor Plestenjak

Ljubljana, 2016

Kazalo

Računanje izotropnih vektorjev

Povzetek

The computation of isotropic vectors

Abstract

Math. Subj. Class. (2010):
Ključne besede:
Keywords:

1. Uvod

1.1. **Problem.** Za dano nesingularno, kvadratno $n \times n$ matriko A z realnimi ali kompleksnimi elementi, nas zanima izračun enotskega vektorja b z realnimi ali kompleksnimi elementi, tako da velja:

$$b^*Ab = 0. \tag{1}$$

Vektor b, za katerega velja (1) in $b^*b = 1$ imenujemo **izotropni vektor**. Bolj splošen je problem inverzne zaloge vrednosti, kjer iščemo enotski vektor b, za katerega velja:

$$b^*Ab = \mu, \tag{2}$$

kjer je μ dano kompleksno število. Očitno je, da je problem (2) možno prevesti na problem (1) za drugo matriko, saj je (2) ekvivalentno

$$b^*(A - \mu I)b = 0.$$

Če je μ lastna vrednost matrike A, torej velja $Av = \mu v$, kjer je v pripadajoči lastni vektor matrike A, potem je rešitev pripadajoč lastni vektor matrike A. Če pa μ ni lastna vrednost matrike A, je $A - \mu I$ nesingularna in je potreben izračun izotropnega vektorja te matrike. Tudi če matrika A ni realna imamo opravka s kompleksno matriko, ko je μ kompleksno število. Zato bomo od sedaj naprej vse vrednosti enačili z 0.

Izrek 1.1. *Naj imata A in b realne ali kompleksne elemente. Potem veljajo enakosti:*

$$b^*Ab = 0 \Leftrightarrow b^*(A + A^*)b = 0 \text{ in } b^*(A - A^*)b = 0.$$

Dokaz. ($\Rightarrow$) Če velja $b^*Ab = 0$, je tudi $(b^*Ab)^* = b^*A^*b = 0$. Če preoblikujemo prvo enačbo na desni v $b^*Ab + b^*A^*b$ dobimo 0. Drugo enačbo dokažemo na podoben način.
($\Leftarrow$) S seštevkom enačb na desni dobimo enačbo na levi:

$$\begin{aligned} b^*(A + A^*)b + b^*(A - A^*)b &= 0, \\ b^*(A + A^* + A - A^*)b &= 0, \\ b^*(2A)b &= 0, \\ b^*Ab &= 0. \end{aligned}$$

□

Če velja le $b^*(A+A^*)b = 0$, ugotovimo da je $\Re(b^*Ab) = 0$. Podobno, če velja samo $b^*(A - A^*)b = 0$, potem je $\Im(b^*Ab) = 0$. Ta dejstva bomo uporabili pri računanju rešitev za kompleksne matrike. Ko sta b in A realna, je problem mnogo enostavnejši, saj moramo upoštevati le simetričen del matrike A. Hermitski in poševno-hermitski del matrike A bomo označili s $H = (A + A^*)/2$ in $\tilde{K} = (A - A^*)/2 = \imath K$.

1.2. **Zaloga vrednosti.**

Definicija 1.2. Zaloga vrednosti matrike $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ je podmnožica kompleksne ravnine, definirana kot

$$W(A) = \{x^*Ax : x \in \mathbb{C}^n, x^*x = 1\}.$$

Očitno je zaloga vrednost $W(A)$ množica vseh Rayleighovih kvocientov matrike A. Podobno kot spekter je zaloga vrednosti množica iz katere lahko razberemo informacije o matriki in pogosto da več informacij kot spekter sam. Zaloga vrednosti vsebuje bistvene informacije o matriki A kot transformaciji, zlasti o lastnih vrednostih in lastnih prostorih (eigenspace) matrike A. Lastne vrednosti hermitskih in normalnih matrik imajo uporabne lastnosti, s katerimi si pomagamo pri izračunu zaloge vrednosti. Če vzamemo hermitski del matrike se zaloga vrednosti preslika na realno os, to je podobno kot če bi vzeli realni del kompleksnega števila. Če hočemo, da ima (1) vsaj eno rešitev, mora biti izhodišče vsebovano v $W(A)$.

Nekatere lastnosti zaloge vrednosti:

(1) $W(A)$ je konveksna in kompaktna podmnožica $\mathbb{C}$.
(2) $\sigma(A) \subseteq W(A)$, kjer $\sigma(A)$ označuje množico vseh lastnih vrednosti matrike A imenovano spekter.
(3) Za vsako unitarno matriko U je $W(U^*AU) = W(A)$.
(4) Seštevanje s skalarjem: $W(A+zI) = W(A)+z$ za vsako kompleksno število z.
(5) Množenje s skalarjem: $W(zA) = zW(A)$ za vsako kompleksno število z.
(6) Subaditivnost: Za vsak $A, B \in \mathbb{C}^{n\times n}$ velja $W(A+B) \subseteq W(A)+W(B)$.
(7) Projekcija: $W(H) = \Re(W(A))$, za vsak $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, kjer s H označimo hermitsko matriko.
(8) Če je A normalna, potem $W(A) = \mathrm{Co}(\sigma(A))$, kjer s Co označimo zaprto konveksno ogrinjačo množice.
(9) $W(A)$ je daljica na realni osi, če in samo če je A hermitska.

Dokaz. (1)
- Konveksnost: bomo pokazali pozneje.
- Kompaktnost (zaprta + omejena): Množica $W(A)$ je zaloga vrednosti (v klasičnem smislu) zvezne funkcije $x \to x^*Ax$ na definicijskem območju $\{x : x \in \mathbb{C}^n, x^*x = 1\}$ (površina Euklidske enotske krogle), ki je kompaktna množica. Ker je $W(A)$ slika kompaktne množice, pod zvezno funkcijo, sledi da je $W(A)$ kompaktna.

(2) Predpostavimo, da je $\lambda \in \sigma(A)$. Potem obstaja neničeln vektor $x \in \mathbb{C}^n$ (za katerga lahko predpostavimo, da je enotski), za katerega velja $Ax = \lambda x$ in zato je

$$\lambda = \lambda x^*x = x^*(\lambda x) = x^*Ax \in W(A)$$

.

(3) Ker unitarna transformacija naredi površino Euklidske enotske krogle invariantno, so kompleksna števila, ki sestavljajo množici $W(U^*AU)$ in $W(A)$ enaka. Če je $x \in \mathbb{C}^n$ in $x^*x = 1$ imamo

$$x^*(U^*AU)x = y^*Ay \in W(A),$$

kjer je $y = Ux$, torej

$$y^*y = x^*U^*Ux = x^*x = 1.$$

Torej je $W(U^*AU) \subseteq W(A)$.

(4) Imamo

$$\begin{aligned} W(A+zI) &= \{x^*(A+zI)x : x^*x = 1\} \\ &= \{x^*Ax + zx^*x : x^*x = 1\} \\ &= \{x^*Ax + z : x^*x = 1\} \\ &= \{x^*Ax : x^*x = 1\} + z \\ &= W(A) + z. \end{aligned}$$

(5) Imamo

$$\begin{aligned} W(zA) &= \{x^*(zA)x : x^*x = 1\} \\ &= \{zx^*Ax : x^*x = 1\} \\ &= z\{x^*Ax : x^*x = 1\} \\ &= zW(A). \end{aligned}$$

(6) Imamo

$$\begin{aligned} W(A+B) &= \{x^*(A+B)x : x \in \mathbb{C}^n, x^*x = 1\} \\ &= \{x^*Ax + x^*Bx : x \in \mathbb{C}^n, x^*x = 1\} \\ &\subseteq \{x^*Ax : x \in \mathbb{C}^n, x^*x = 1\} + \{yx^*By : y \in \mathbb{C}^n, y^*y = 1\} \\ &= W(A) + W(B). \end{aligned}$$

(7) Računamo

$$\begin{aligned} x^*Hx &= x^*\frac{1}{2}(A+A^*)x \\ &= \frac{1}{2}(x^*Ax + x^*A^*x) \\ &= \frac{1}{2}(x^*Ax + (x^*Ax)^*) \\ &= \frac{1}{2}(x^*Ax + \overline{x^*Ax}) \\ &= \Re(x^*Ax). \end{aligned}$$

(8) Če je A normalna, potem je $A = U^*\Lambda U$, kjer je $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ diagonalna in U je unitarna. Po lastnosti (3), $W(A) = W(\Lambda)$ in ker

$$x^*\Lambda x = \sum_{i=1}^{n} \bar{x}_i x_i \lambda_i = \sum_{i=1}^{n} |x_i|^2 \lambda_i$$

$W(\Lambda)$ je samo množica vseh konveksnih kombinacij diagonalnih elementov Λ ($x^*x = 1$ implicira $\sum_i |x_i|^2 = 1$ in $|x_i|^2 \geq 0$). Ker so diagonalni elementi Λ lastne vrednosti A, to pomeni daa je $W(A) = \mathrm{Co}(\sigma(A))$

(9) Ker je hermitska matrika tudi normalna velja

$$W(H) = \mathrm{Co}(\sigma(H)),$$

zaradi lastnosti (3). Vemo, da se zaloga vrednosti hermitske matrike projecira na realno os ter da je $\sigma(H)$ množica vseh realnih lastnih vrednosti matrike H. Konveksna ogrinjača $\sigma(H)$ je množica vseh daljic med lastnimi vrednostmi matrike$H$ in ker bo zaloga vrednosti samo na realni osi, je to daljica med najmanjšo in največjo realno lastno vrednostjo H.

$\square$

1.2.1. *Konveksnost.* V tem poglavju bomo dokazali, da je zaloga vrednosti konveksna, kar je znano tudi kot Toeplitz-Hausdorfferjev izrek.

Lema 1.3. *Naj bo H in$\mathbb{C}^{n\times n}$ hermitska matrika in $\mu \in W(H)$. Potem je množica $\mathcal{L}_H(\mu) = \{x \in \mathbb{C}^n : x^*x = 1, x^*Hx = \mu\}$ povezana s potmi (t.j. obstaja pot med poljubnima dvema točkama iz te množice)*

Dokaz. Zaradi lastnosti (3) in (4) lahko brez škode za splošnost predpostavimo, da je $\mu = 0$ in $H = \mathrm{diag}\{d_1, d_2, \ldots, d_n\}$ je realna diagonalna matrika. Potem je

$$W(H) = \Big\{\sum_{j=1}^{n} d_j|x_j|^2 : x_1, x_2, \ldots, x_n \in \mathbb{C}, \sum_{j=1}^{n} |x_j|^2 = 1\Big\}$$

Naj bo sedaj $x = (x_j), y = (y_j) \in \mathcal{L}_H(0)$ t.j. x, y sta enotska vektorja za katera velja

$$\sum_{j=1}^{n} d_j|x_j|^2 = \sum_{j=1}^{n} d_j|y_j|^2 = 0.$$

Pokazati želimo, da v $\mathcal{L}_H(0)$ obstaja zvezna pot, ki povezuje x in y. Ker je vsak vektor

$$\begin{bmatrix} r_1e^{i\theta_1} & r_2e^{i\theta_2} & \ldots & r_ne^{i\theta_n}\end{bmatrix}^T \in \mathcal{L}_H(0)$$

$(r_j \geq 0, \theta_j \in [o, 2\pi); j = 1, 2, \ldots, n)$ povezan z realnim vektorjem

$$[r_1 \quad r_2 \quad \ldots \quad r_n]^T \in \mathcal{L}_H(0)$$

z zvezno krivuljo

$$\begin{bmatrix} r_1e^{i\theta_1(1-t)} & r_2e^{i\theta_2(1-t)} & \ldots & r_ne^{i\theta_n(1-t)}\end{bmatrix}^T; \quad t \in [0, 1],$$

ki je v $\mathcal{L}_H(0)$, sleda, da sta x in y realna in nenegativna. Potem zvezna krivulja

$$u(t) = (u_j(t)) = \left(\sqrt{(1-t)x_j^2 - ty_j^2}\right) \in \mathcal{L}_H(0) \cap \mathbb{R}^n; \quad t \in [0, 1]$$

zadošča pogojema $u(0) = x$ in $u(1) = y$, s čimer je lema dokazana. $\square$

Seveda, zgornja lema drži za vsako skalarno množenje hermitske matrike. Še več, za realno diagonalno matriko $H = \mathrm{diag}\{d_1, d_2, \ldots, d_n\}$, $d_1 \geq d_2 \geq \cdots \geq d_n$, vrednost $\sum_{j=1}^{n} d_j|x_j|^2$ (kjer je $x_1, x_2, \ldots, x_n \in \mathbb{C}, \sum_{j=1}^{n} |x_j|^2 = 1$) doseže maksimum d_1, pri $|x_1| = 0$ in $x_2 = x_3 = \cdots = x_n = 0$ in doseže minimum d_n, pri $|x_n| = 1$ in $x_1 = x_2 = \cdots = x_{n-1} = 0$.

Posledica 1.4. *Naj bo $H \in \mathbb{C}^{n\times n}$ hermitska matrika in μ njena najmanjša ali največja lastna vrednost. Potem množica $\mathcal{L}_H(\mu) = \{x \in \mathbb{C}^n : x^*x = 1, x^*Hx = \mu\}$ vsebuje vse enotske vektorje matrike H, ki pripadajo μ.*

Izrek 1.5 (Toeplitz-Hausdorfferjev izrek)**.** *Za vsak $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ je $W(A)$ konveksna.*

Dokaz. Dokazati moramo, da za poljubni točki $\mu, \nu \in W(A)$, leži daljica s krajiščema μ in ν v $W(A)$. Zaradi lastnosti (4) lahko brez škode za splošnost predpostavimo, da sta $\mu = 0$ in $\nu = 1$. Naj bosta $x, y \in \mathbb{C}^n$ taka enotska vektorja, da velja $x^*Ax = 0$ in$y^*Ay = 1$. Naj bo H hermitski del matrike A in $\tilde{K}$ poševno-hermitski del matrike A, kot smo jih definirali v prejšnjem podpoglavju. Množica $\mathcal{L}_{\tilde{K}}(0) = \{x \in \mathbb{C}^n : x^*x = 1, x^*\tilde{K}x = 0\}$ je zaradi prejšnje leme povezana s potmi. Ker sta $x, y \in \mathcal{L}_{\tilde{K}}(0)$, obstaja taka zvezna vektorska funkcija $z(t) : [0,1] \to \mathcal{L}_{\tilde{K}}(0)$, da sta $z(0) = x$ in $z(1) = y$. Sledi, da je funkcija

$$\begin{aligned} z(t)^* A z(t) &= z(t)^* H z(t) + z(t)^* \tilde{K} z(t) \\ &= z(t)^* H z(t) \end{aligned}$$

realna in zvezna glede na spremenljivko t in zadošča pogojema $z(0)^* A z(0) = x^* A x = 0$ in $z(1)^* A z(1) = y^* A y = 1$. Sledi, da je daljica s krajiščema 0 in 1 vsebovana v $W(A)$. □

1.3. **Uporaba.** Zanimanje za izračun izotropnih vektorjev je povezano s preučevanjem delne stagnacije GMRES algoritma za reševanje linearnih sistemov z realnimi matrikami. Zaloga vrednosti se uporablja za preučevanje konvergence nekaterih iterativnih metod za reševanje linearnih sistemov in ima mnogo aplikacij v numerični analizi, diferencialnih enačbah, teoriji sistemov itd.

2. Realne matrike

V tem razdelku bomo opisali kako izračunamo željeno število izotropnih vektorjev za realno matriko. To storimo z uporabo lastnih vektorjev matrike $H = (A + A^*)/2$. Ko je A realna matrika, nas zanima kako izračunati rešitev naslednje enačbe:

$$b^* H b = 0, \tag{3}$$

kjer je H realna in simetrična matrika (t.j. $H = H^T$).

Lema 2.1. [4] *Izotropni vektorji realne matrike A so identični izotropnim vektorjem njenega simetričnega dela.*

Dokaz. To sledi iz $b^T A b = b^T A_{sim} b + b^T A_{psim} b = b^T A_{sim} b$, kjer je z $A_{sim} = \frac{A+A^T}{2}$ označen simetrični del matrike A in z $A_{psim} = \frac{A-A^T}{2}$ poševno-simetrični del matrike A. □

Velja enakost:

$$b^T A b = 0 \Leftrightarrow b^T (A + A^T) b = 0.$$

Vemo, da je $W(A)$ simetrična glede na realno os in, da je $0 \in W(A)$, če in samo če $\lambda_n \leq 0 \leq \lambda_1$, kjer sta λ_n in λ_1 najmanjša in največja lastna vrednost matrike H. Naj bosta x_1 in x_n realna lastna vektorja, pripadajoča λ_1 in λ_n. Potem sta $x_1^T A x_1 = x_1^T H x_1 = \lambda_1$ in $x_n^T A x_n = x_n^T H x_n = \lambda_n$ realni točki na skrajni levi in skrajni desni zaloge vrednosti $W(A)$ na realni osi. Realne rešitve (3) izračunamo z uporabo lastnih vektorjev matrike H. Predpostavimo, da iščemo vektorje b z normo 1. Matriko H lahko zapišemo kot

$$H = X \Lambda X^T,$$

kjer je Λ matrika, ki ima na diagonali lastne vrednosti λ_i, ki so realna števila. X je ortogonalna matrika lastnih vektorjev, tako da $X^T X = I$. Potem uporabimo ta spektralni razcep v (3):

$$b^* H b = b^* X \Lambda X^T b = 0.$$

Označimo s $c = X^T b$ vektor projekcije b na lastne vektorje matrike H. Dobimo naslednji izrek.

Izrek 2.2. *Naj bo b rešitev problema* (3). *Potem vektor $c = X^T b$ s komponentami c_i zadošča naslednjima enačbama:*

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i |c_i|^2 = 0, \tag{4}$$

$$\sum_{i=1}^{n} |c_i|^2 = 1. \tag{5}$$

Dokaz. Enačbo (4) dokažemo tako, da $c = X^T b$ oz. $c^* = b^* X$ vstavimo v (3) in dobimo

$$b^* H b = b^* X \Lambda X^T b = c^* \Lambda c = 0.$$

Ker je Λ diagonalna matrika, lahko $c^* \Lambda c$ zapišemo kot vsoto komponent $\bar{c_i} \lambda_i c_i = \lambda_i |c_i|^2$, za $i = 1, 2, ...n$. Za enačbo (5) vemo, da je $\|b\|_2 = 1$. Če normo zapišemo s c, dobimo

$$\|b\|_2 = \|Xc\|_2 = \|c\|_2 = 1,$$

saj je X ortogonalna matrika.

□

Opomba: Enačbi veljata samo za realna števila. Zaradi izreka 2.2 mora biti 0 konveksna kombinacija lastnih vrednosti λ_i. Kot smo že videli, to pomeni, da če je A definitna matrika (pozitivno ali negativno), potem (3) nima netrivialne rešitve. Drugače je $0 \in W(A)$ in lahko vedno najdemo realno rešitev. V bistvu, kadar je $n > 2$, imamo neskončno rešitev.

2.1. **Iskanje izotropnih vektorjev.** Najprej bomo za izračun uporabili dva lastna vektorja, pozneje pa bomo videli, kako se izračuna več rešitev z uporabo treh lastnih vektorjev. Če predpostavimo, da nimajo vse lastne vrednosti H enakega predznaka, potem mora za najmanjšo lastno vrednost λ_n veljati $\lambda_n < 0$. Naj bo $k < n$ tak, da je $\lambda_k > 0$ in naj bo t pozitivno realno število manjše od 1. Izberemo taka c_n in c_k, da velja $|c_n|^2 = t$, $|c_k|^2 = 1 - t$ in $c_i = 0, i \neq n, k$, ker velja enačba (5), $t + (1 - t) = 1$. Iz (4) mora veljati enačba:

$$\lambda_n t + \lambda_k (1 - t) = 0,$$

katere rešitev je:

$$t_s = \frac{\lambda_k}{\lambda_k - \lambda_n}. \tag{6}$$

Ker je $\lambda_n < 0$, je imenovalec pozitiven in t_s pozitiven ter $t_s < 1$. Absolutna vrednost c_n (oz. c_k) je kvadratni koren od t_s (oz. $1 - t_s$). Ker je $b = Xc$, sta dve realni rešitvi:

$$b_1 = \sqrt{t_s} x_n + \sqrt{1 - t_s} x_k, \quad b_2 = -\sqrt{t_s} x_n + \sqrt{1 - t_s} x_k,$$

kjer sta x_n in x_k lastna vektorja, ki pripadata lastnima vrednostima λ_n in λ_k. Druge možnosti za predznak dajo rešitve, ki so v isti smeri kot ti dve. Ker imata izraza v rešitvah enaka imenovalca, lahko rešitvi zapišemo kot:

$$b_1 = \sqrt{\lambda_k} x_n + \sqrt{|\lambda_n|} x_k, \quad b_2 = -\sqrt{\lambda_k} x_n + \sqrt{|\lambda_n|} x_k$$

(sledi iz [4]). Vektor mora biti normiran, zato

$$b_1 = \sqrt{\frac{\lambda_k}{\lambda_k + |\lambda_n|}} x_n + \sqrt{\frac{|\lambda_n|}{\lambda_k + |\lambda_n|}} x_k, \quad b_2 = -\sqrt{\frac{\lambda_k}{\lambda_k + |\lambda_n|}} x_n + \sqrt{\frac{|\lambda_n|}{\lambda_k + |\lambda_n|}} x_k.$$

Konstruirani rešitvi sta neodvisni in še več, ortogonalni, če $\lambda_k = -\lambda_n$.
Predpostavimo, da je b realen.

Posledica 2.3. [4] *Dobljena izotropna vektorja sta ortogonalna ($b_1^T b_2 = 0$), če in samo če $\lambda_k = -\lambda_n$.*

Dokaz.

$$b_1^T b_2 = (\sqrt{\lambda_k} x_n + \sqrt{|\lambda_n|} x_k)^T (-\sqrt{\lambda_k} x_1 + \sqrt{|\lambda_n|} x_k) = -(\lambda_n + \lambda_k).$$

□

Za ta postopek lahko uporabimo vsak par pozitivnih in negativnih lastnih vrednosti, uporaba najmanjše lastne vrednosti λ_n torej ni nujna. Tako lahko postopek vrne toliko rešitev kot je dvakratno število parov lastnih vrednosti matrike H z nasprotnimi predznaki, če so vse lastne vrednosti različne.
Ko sta A in b realna smo dokazali naslednji izrek:

Izrek 2.4. *Če je A realna in nedefinitna (t.j. ni pozitivno in negativno definitna), potem obstajata najmanj dva neodvisna realna izotropna vektorja.*

Da bi pokazali, da imamo neskončno število realnih rešitev in, da bi jih nekaj izračunali, moramo vzeti vsaj tri različne lastne vrednosti, ki ne smejo biti istega predznaka (ko obstajajo). Predpostavimo, da imamo $\lambda_1 < 0 < \lambda_2 < \lambda_3$ in naj bo $t_1 = |c_1|^2$, $t_2 = |c_2|^2$. Veljati mora enačba (5)

$$\lambda_1 t_1 + \lambda_2 t_2 + \lambda_3 (1 - t_1 - t_2) = (\lambda_1 - \lambda_3) t_1 + (\lambda_2 - \lambda_3) t_2 + \lambda_3 = 0 \tag{7}$$

s pogoji: $t_i \geq 0, i = 1, 2$ in $t_1 + t_2 \leq 1$. Torej velja zveza

$$t_2 = \frac{\lambda_3}{\lambda_3 - \lambda_2} - \frac{\lambda_3 - \lambda_1}{\lambda_3 - \lambda_2} t_1.$$

S tem je definirana premica v (t_1, t_2) ravnini in preveriti moramo, če ta premica seka trikotnik, definiran s pogoji za t_1, t_2. Premica seka t_1-os pri $\lambda_3/(\lambda_3 - \lambda_1)$, kar je več kot 1, saj je $\lambda_1 < 0$, t_2-os pa pri $\lambda_3/(\lambda_3 - \lambda_2)$, kar je tudi več kot 1. Ta premica ima negativen naklon. Vse dopustne vrednosti za t_1 in t_2 so dane z daljico v trikotniku. Zato obstaja neskončno število možnih pozitivnih parov (t_1, t_2). Primer $\lambda_1 < \lambda_2 < 0 < \lambda_3$ je podoben zgornjemu, le da premica seka t_2-os pod 1. Potem dobimo rešitve b s kombiniranjem pripadajočih treh lastnih vektorjev. Takšna konstrukcija pripelje do naslednjega izreka:

Izrek 2.5. *Če je $n > 2$ in je A realna in nedefinitna, potem ima matrika H vsaj tri različne lastne vrednosti z različnimi predznaki. Potem obstaja neskončno število realnih izotropnih vektorjev.*

Seveda lahko nadaljujemo z večanjem števila lastnih vrednosti. Če uporabimo štiri različne lastne vrednosti z različnimi predznaki, potem moramo na problem gledati v treh dimenzijah. Prostor, kjer je omejitvam zadoščeno, je tetraeder, torej moramo poiskati presek dane ravnine s tem tetraedrom. V splošnem, če imamo k različnih lastnih vrednosti z različnimi predznaki, definira naš problem naslednja enačba:

$$\sum_{i=1}^{k-1} (\lambda_i - \lambda_k) t_i + \lambda_k = 0, \quad t_i \geq 0, i = 1, \ldots, k-1, \quad \sum_{i=1}^{k-1} t_i \leq 1. \tag{8}$$

Prva enačba opisuje hiperravnino v kateri moramo poiskati presečišča te hiperravnine z volumnom telesa definiranega s pogoji. Če je A realna matrika smo končali, saj smo pokazali, da lahko poračunamo toliko realnih rešitev kot hočemo.

3. Kompleksne matrike

V tem razdelku si bomo pogledali kompleksne matrike. Predstavljeni bodo trije teoretični postopki iz [1],[2] in [3], kako priti do izotropnih vektorjev.

3.1. **Iskanje izotropnih vektorjev.**

3.1.1. *Meurant 1.* V nekaterih primerih lahko izračunamo rešitve s samo enim računanjem lastnih vrednosti in vektorjev matrike K, vendar to ne deluje vedno. Sredstvo, ki lahko pomaga je, da uporabimo lastne vektorje matrike H. Če ima matrika A kompleksne elemente, nam prejšnja konstrukcija za realne matrike vrne le vektorje za katere je $\Re(b^*Ab) = 0$. Najprej opazimo, da lahko v nekaterih primerih uporabimo podobno konstrukcijo kot v prejšnjem razdelku, ki najde množico rešitev za hermitsko matriko H z ničelnim realnim delom ter pozitivnim in negativnim imaginarnim delom. Z uporabo treh lastnih vektorjev H, obstaja neskončno rešitev dobljenih na daljici v trikotniku omejitev. Ko poljubno točko iz te daljice nenehno sprehajamo po njej, se tudi imaginarni del rešitve nenehno spreminja. Če sta imaginarna dela, ki ustrezata robnima točkama daljice, različnih predznakov, potem iz izreka o povprečni vrednosti sledi, da obstaja točka na daljici, ki ima ničeln imaginarni del. Opomba: to vsebuje samo izračun kvadratne forme x^*Ax. Ne potrebujemo nobenih izračunov lastnih vrednosti in vektorjev. Vendar, se sprememba predznaka v vrednostih x^*Ax ne zgodi za katerkoli tri lastne vrednosti.

3.1.2. *Meurant 2.* Druga konstrukcija algoritma v [1] uporabi lastne vrednosti in lastne vektorje matrike $K = (A - A^*)/(2i)$, ki je hermitska. S konstrukcijo iz 2. razdelka lahko poiščemo tak vektor b, da je $\Im(b^*Ab) = 0$. S kombiniranjem lastnih vektorjev matrike K pripadajočim k pozitivnim in negativnim lastnim vrednostim, lahko (v nekaterih primerih) izračunamo taka vektorja b_1 in b_2, da $\alpha_1 = \Re(b_1^*Ab_1) < 0$ in $\alpha_2 = \Re(b_2^*Ab_2) > 0$.

Lema 3.1. *Naj bosta b_1 in b_2 enotska vektorja z $\Im(b_i^*Ab_i) = 0$, $i = 1, 2$, in $\alpha_1 = \Re(b_1^*Ab_1) < 0, \alpha_2 = \Re(b_2^*Ab_2) > 0$. Naj bo*

$$b(t, \theta) = e^{-i\theta} b_1 + tb_2, \quad t, \theta \in \mathbb{R},$$

$$\alpha(\theta) = e^{i\theta} b_1^*Ab_2 + e^{-i\theta} b_2^*Ab_1.$$

Potem je

$$b(t, \theta)^*Ab(t, \theta) = \alpha_2 t^2 + \alpha(\theta)t + \alpha_1, \quad \alpha(\theta) \in \mathbb{R},$$

ko

$$\theta = arg(b_2^*Ab_1 - b_1^T \bar{A}\bar{b_2}).$$

Za

$$t_1 = \frac{-\alpha(\theta) + \sqrt{\alpha(\theta)^2 - 4\alpha_1\alpha_2}}{2\alpha_2},$$

imamo

$$b(t_1, \theta) \neq 0, \quad \frac{b(t_1, \theta)^*}{\|b(t_1, \theta)\|} A \frac{b(t_1, \theta)}{\|b(t_1, \theta)\|} = 0.$$

Lema 3.1 prikazuje kako se izračuna rešitev iz b_1 in b_2. Če imamo b_1 in b_2, taka da $\alpha_1 = \Re(b_1^*Ab_1) < 0$ in $\alpha_2 = \Re(b_2^*Ab_2) > 0$, smo končali.

Dokaz. Imamo enotska vektorja b_1, b_2 za katera velja $\Im(b_i^* A b_i) = 0$, $i = 1, 2$ in $\alpha_1 = \Re(b_1^* A b_1) < 0, \alpha_2 = \Re(b_2^* A b_2) > 0$. Radi bi pokazali

$$\Re(b(t,\theta)^* A b(t,\theta)) = 0 \quad t, \theta \in \mathbb{R}.$$

$$\begin{aligned}
b(t,\theta)^* A b(t,\theta) &= (e^{-i\theta} b_1 + t b_2)^* A (e^{-i\theta} b_1 + t b_2) \\
&= (b_1^* (\overline{e^{-i\theta}})^T + b_2^* t) A (e^{-i\theta} b_1 + t b_2) \\
&= (b_1^* (e^{\overline{-i\theta}})^T + b_2^* t) A (e^{-i\theta} b_1 + t b_2) \\
&= (b_1^* (e^{i\theta})^T A + b_2^* t A)(e^{-i\theta} b_1 + t b_2) \\
&= b_1^* e^{i\theta} A e^{-i\theta} b_1 + b_1^* e^{i\theta} A t b_2 + b_2^* t A e^{-i\theta} b_1 + b_2^* t A t b_2 \\
&= b_1^* A b_1 + e^{i\theta} b_1^* A b_2 t + e^{-i\theta} b_2^* A b_1 t + t^2 b_2^* A b_2
\end{aligned}$$

Če gledamo samo realni del zadnje vrstice dobimo naslednjo kvadratno enačbo:

$$\alpha_1 + \alpha(\theta) t + \alpha_2 t^2 = 0.$$

Ena rešitev te enačbe je

$$t_1 = \frac{-\alpha(\theta) + \sqrt{\alpha(\theta)^2 - 4\alpha_1 \alpha_2}}{2\alpha_2}.$$

Preveriti je potrebno le še kdaj bo

$$\alpha(\theta) = e^{i\theta} b_1^* A b_2 + e^{-i\theta} b_2^* A b_1 \in \mathbb{R}.$$

To bo držalo, ko bo

$$\theta = \arg(b_2^* A b_1 - \overline{b_1^* A b_2}) = \arg(b_2^* A b_1 - b_1^T \bar{A} \bar{b_2}).$$

□

Algoritem:

1. S kombiniranjem lastnih vektorjev K, pripadajočim pozitivnim in negativinim lastnim vrednostim, izračunamo vektorja b_1 in b_2, taka da $\alpha_1 = \Re(b_1^* A b_1) < 0$ in $\alpha_2 = \Re(b_2^* A b_2) > 0$. Uporabimo lemo 3.1 in končamo.
2. Če ne najdemo b_1, b_2 potrebna za lemo 3.1, izračunamo še lastne vektorje matrike H. Ponovimo korak 1. za matriko $\imath A$.
3. Če postopek ne deluje niti za $\imath A$, uporabimo kombinacijo lastnih vektorjev K in H, kjer z x označimo lastni vektor K in z y lastni vektor H.
4. Upoštevamo vektorje $X_\theta = \cos(\theta) x + \sin(\theta) y$, $0 \leq \theta \leq \pi$. $X_\theta^* A X_\theta$ opiše elipso znotraj zaloge vrednosti.
5. Za dan par (x, y) iščemo presečišča elipse $X_\theta^* A X_\theta$ z realno osjo. Z upoštevanjem, da je $A = H + iK$, računamo:

$$\begin{aligned}
X_\theta^* A X_\theta = &\cos^2(\theta)(x^* H x + i x^* K x) \\
&+ \sin^2(\theta)(y^* H y + i y^* K y) \\
&+ \sin(\theta)\cos(\theta)(x^* H y + y^* H x + i[x^* K y + y^* K x]).
\end{aligned}$$

   Naj bo $\alpha = \Im(x^* H x + i x^* K x), \beta = \Im(y^* h y + i y^* K y)$ in $\gamma = \Im(x^* H y + y^* H x + i[x^* K y + y^* K x])$. Ko enačimo imaginarni del $X_\theta^* A X \theta$ z 0, dobimo enačbo:

$$\alpha \cos^2(\theta) + \beta \sin^2(\theta) + \gamma \sin(\theta)\cos(\theta) = 0.$$

Predpostavimo, da $\cos(\theta) \neq 0$ in delimo, dobimo kvadratno enačbo za $t = \tan(\theta)$,

$$\beta t^2 + \gamma t + \alpha = 0.$$

6. Če ima ta enačba realne rešitve, potem dobimo vrednosti θ, ki nam vrnejo take vektorje X_θ, da $\Im(X_\theta^* A X_\theta) = 0$.
7. Če tudi ta konstrukcija ne deluje, uporabimo algoritem iz [3], opisan čez dva razdelka.

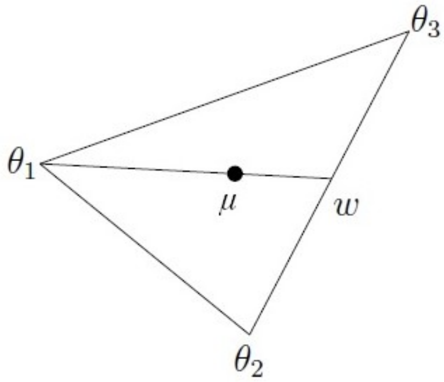
Opomba 1: Ko je A realna in imamo $b_1 = x_1, b_2 = x_2$ za lastne vektorje H, potem je $\theta = 0$ in lema 3.1 pove, kako se izračuna en izotropni vektor. Vendar v kompleksnem primeru ne moremo vedno najti primernih vektorjev b_1 in b_2. Konstrukcija ne deluje, če imajo vrednosti $\Re(y_i^* H y_j)$ enak predznak, kjer so y_i lastni vektorji K. Ekstremen primer je Jordanski blok s kompleksno vrednostjo α na diagonali in elementi 1 na naddiagonali. Potem je $\Re(y_i^* H y_j) = 0$, ko $i \neq j$, in $y_i^* H y_i = -\Re(\alpha)$. Zato so realni deli $b^* A b$ za vse vektorje b, ki se lahko konstruirajo, enaki.

Opomba 2: Ko je velikost problema velika, ne uporabimo zadnje konstrukcije za vse pare lastnih vektorjev, saj nas to lahko preveč stane. Uporabimo samo lastne vektorje, ki pripadajo par najmanjšim in največjim lastnim vrednostim.

3.1.3. *Carden.* V tem razdelku opišemo idejo za Cardenov algoritem za dano matriko $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ in $\mu \in \mathbb{C}$. Kot smo omenili v prvem poglavju, je vseeno, če rešujemo problem 2 ali problem 1 za matriko $A - \mu I$. Preden se lotimo algoritma, je potrebno opisati postopek iskanja izotropnega vektorja, ki ga potem uporabimo v algoritmu. Predpostavimo, da je μ v konveksni ogrinjači treh točk $\theta_i \in W(A)$, za katere smo lahko izračunali izotropne vektorje b_i. Konveksna ogrinjača teh treh točk θ_i je trikotnik (lahko je izrojen). Radi bi, da je μ na daljici, ki ima take robne točke, da za njih vemo ali lahko izračuamo izotropne vektorje. Zato lahko brez škode za splošnost predpostavimo, da je θ_1 ena od robnih točk te daljice. Za drugo robno točko vzamemo w, ki je presečišče daljice med θ_2 in θ_3 s premico, ki teče skozi θ_1 in μ. Ker je w konveksna kombinacija θ_2 in θ_3, mu lahko določimo pripadajoč izotropni vektor. Ker pa je μ konveksna kombinacija w in θ_1, lahko tudi njemu določimo izotropni vektor.

Naj bo $\varepsilon > 0$ toleranca (npr. $\varepsilon = 10^{-16}\,\|A\|$ za dvojno natančnost).
Algoritem:

1. Poiščemo zunanjo aproksimacijo $W(A)$, tako da zračunamo najbolj levo in najbolj desno lastno vrednost $H_\theta = (e^{i\theta}A + e^{-i\theta}A^*)/2$ za $\theta = 0, \pi/2$. Če μ ni v zunanji aproksimaciji, potem $\mu \notin W(A)$ in ustavimo algoritem, drugače nadaljujemo.
2. Če je višina ali širina zunanje aproksimacije manj kot ε, potem je $W(A)$ približno hermitska ali poševno-hermitska (ali kompleksen premik katere od teh) in je zaloga vrednosti približno točka. V obeh primerih ugotovimo ali je $\mu \in W(A)$. Če je, poiščemo pripadajoč izotropni vektor.
3. Če $\mu \notin W(A)$, nadaljujemo s konstrukcijo notranje aproksimacije $W(A)$ z uporabo lastnih vektorjev najbolj leve in desne lastne vrednosti H_θ.
4. Če μ leži v notranji aproksimaciji, lahko poiščemo izotropni vektor, ki generira μ. Uporabimo postopek, ki je bil opisan v začetku tega razdelka. Če μ ne



SLIKA 1. Ilustracija postopka določanja izotropnega vektorja za točko v konveksni ogrinjači treh točk iz $W(A)$.

leži v notranji aproksimaciji, določimo katera stranica notranje aproksimacije mu leži najbližje.

5. Izračunamo $\hat{\mu}$, ki je najbližja točka do μ, ki leži na notranji aproksimaciji. Če je $|\hat{\mu} - \mu| < \varepsilon$, izračunamo izotropni vektor za $\hat{\mu}$ in ga sprejmemo kot izotropni vektor za μ ter ustavimo algoritem.
6. Posodobimo notranjo in zunanjo aproksimacijo z izračunom največje lastne vrednosti in pripadajočega lastnega vektorja H_θ, kjer je smer θ pravokotna na stranico notranje aproksimacije, ki je najbližja μ. Če ne dobimo nove robne točke, ki se ni dotikala notranje aproksimacije, potem $\mu \notin W(A)$.
7. Ponovno preverimo, če je μ v novi zunanji aproksimaciji. Če je, se vrnemo na 4. korak, drugače $\mu \notin W(A)$.

Opomba: Korake 4.-7. ponavljamo, dokler ni notranja aproksimacija ε blizu μ ali dokler zunanja aproksimacija ne vsebuje μ. Carden trdi, da se v večini primerov postopek konča v koraku 4. po le nekaj ponavljanjih.
Zunanja aproksimacija zaloge vrednosti, ki seka $\partial W(A)$ v robnih točkah, bo pravokotnik, katerega stranice so vzporedne z realno in imaginarno osjo, notranja aproksimacija pa štirikotnik z oglišči v robnih točkah $\partial W(A)$.

3.1.4. *Chorianopoulos, Psarrakos in Uhlig.* V tem razdelku opišemo algoritem Chorianopoulosa, Psarrakosa in Uhliga (označimo s CPU) za inverzen problem zaloge vrednosti. Algoritem je hitrejši in daje natančne numerične rezultate tam, kjer se zgornja algoritma mnogokrat ustavita. Tak primer je ko μ, $\mu \in W(A)$ ali $\mu \notin W(A)$, leži zelo blizu roba zaloge vrednosti $\partial W(A)$. Ta algoritem uporabi za iskanje izotropnih vektorjev le nekaj najbolj osnovnih lastnosti zaloge vrednosti poleg konveksnosti, kot je $W(\alpha A + \beta I) = \alpha W(A) + \beta$.

Algoritem:

1. Izračunamo do 4 robne točke zaloge vrednosti p_i in njihove izotropne vektorje b_i, za $i = 1, 2, 3, 4$, tako da izračunamo ekstremne lastne vrednosti, ki pripadajo enotskim lastnim vektorjem x_i matrike H in K.
2. Nastavimo $p_i = b_i^* A b_i$. Dobimo 4 točke p_i, ki označujejo ekstremne vrednosti $W(A)$, tj. najmanjši in največji horizontalni in vetikalni razteg. Označimo jih z rM in rm za maksimalen in minimalen horizontalni razteg $W(A)$ in

z iM in im za maksimalen in minimalen vertikalen razteg $W(A)$. Če je $|p_i| < 10^{-13}$, za $i = 1, 2, 3, 4$, potem je naš izotropni vektor kar pripadajoč enotski vektor.

3. Če med računanjem lastnih vektorjev in lastnih vrednosti ugotovimo, da je ena od matrik H in iK definitna, tj. da imajo njene lastne vrednosti vse enak predznak, potem vemo da $\mu \notin W(A)$ in algoritem ustavimo.
4. Narišemo elipse, ki so preslikave velikega kroga kompleksne sfere $\mathbb{C}^n$, ki gredo skozi vse možne pare točk rm, rM, im in iM, ki imajo nasprotno predznačene imaginarne dele. Nato izračunamo presečišča vsake dobljene elipse z realno osjo.
5. Če so izračunana presečišča na obeh straneh 0, potem izračunamo izotropni vektor z lemo 3.1.
6. Če presečišča niso na obeh straneh 0, potem moramo rešiti kvadratno enačbo

$$(tx + (1-t)y)^*A(tx + (1-t)y) = (x^*Ax + y^*Ay - (x^*Ay + y^*Ax))t^2 \\ + (-2y^*Ay + (x^*Ay + y^*Ax))t + y^*Ay. \tag{9}$$

Njene ničle določijo koordinatne osi $W(A)$ točk na elipsah skozi točke x^*Ax, $y^*Ay \in \partial W(A)$ in so generirane s točkami v $\mathbb{C}^n$ na velikem krogu skozi x in y.

7. To je kvadratna enačba s kompleksnimi števili. Nas zanimajo samo rešitve, ki imajo imaginaren del enak 0, saj želimo uporabiti lemo 3.1. Če imaginarni del enačbe (9) enačimo z 0, dobimo naslednjo polinomsko enačbo z realnimi koeficienti:

$$t^2 + gt + \frac{p}{f} = 0 \tag{10}$$

za $q = \Im(x^*Ax)$, $p = \Im(y^*Ay)$ in $r = \Im(x^*Ay + y^*Ax)$. Označimo $f = p + q - r$ in $g = (r - 2p)/f$.

8. Enačba (10) ima realni rešitvi t_i, $i = 1, 2$, ki vrneta generirajoča vektorja $b_i = t_i x + (1 - t_i)y$ $(i = 1, 2)$ za realni točki. Z normalizacijo dobimo izotropne vektorje.
9. Če nobena od možnih elips ne seka realno os na vsaki strani 0, potem preverimo, če to stori njihova skupna množica in ponovimo isti postopek.
10. Če niti skupna množica ne gre, potem izračunamo še več lastnih vrednosti in lastnih vektorjev za $A(\theta) = \cos(\theta)H + \sin(\theta)iK$ za kote $\theta \neq 0, \pi/2$ in delamo bisekcijo med točkami rm, rM, im, iM.
11. Končamo, ko najdemo definitno matriko $A(\theta)$ ali elipso, ki seka realno os na obeh straneh 0, nakar lahko uporabimo lemo 3.1.

4. Numerična analiza

V tem poglavju bomo primerjali hitrosti algortimov Meuranta (drug algoritem), Cardna in CPU na različnih primerih problema iskanja izotropnih vektorjev. Označimo jih z `AlgM`, `AlgC` in `AlgCPU`.

5. Zaključek

Literatura

[1] G. Meurant, *The computation of isotropic vectors*, Numer. Alg. **60** (2012) 193–204.

[2] R. Carden, *A simple algorithm for the inverse field of values problem*, Inverse Probl. **25** (2009) 1–9

[3] C. Chorianopoulos, P. Psarrakos in F. Uhlig, *A method for the inverse numerical range problem*, Electron. J. Linear Algebra **20** (2010) 198–206

[4] N. Ciblak, H. Lipkin, *Orthonormal isotropic vector bases*, In: Proceedings of DETC'98, 1998 ASME Design Engineering Technical Conferences (1998).

[5] Johnson, C. R., *Numerical determination of the field of values of a general complex matrix*, SIAM J. Numer. Anal. **15** (1978) 595–602.

[6] P. Psarrakos, M. Tsatsomeros, *Numerical range: (in) a matrix nutshell* Math. Notes from Washington State University, Vol 45, No. 2 (2002)