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 netrivialnega enotskega vektorja b z realnimi ali kompleksnimi elementi, tako da velja:

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

Vektor b za katerega velja (1) in $b^* b = 1$ imenujemo **izotropni vektor**. V tem problemu, je neničeln vektor skaliran in rotiran v ortogonalni smeri. Bolj splošen problem imenujemo problem inverzne zaloge vrednosti, kjer iščemo enotski vektor b za katerega velja:

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

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

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

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 kompleksna. Zato bomo od sedaj naprej vse vrednosti enačili z 0.

Definicija 1.1. Zaloga vrednosti matrike $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ je zaprta, konveksna podmnožica kompleksne ravnine definirana kot

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

Očitno je zaloga vrednost $W(A)$ množica vseh Rayleighjevih kvocientov matrike A. Če hočemo, da ima (1) vsaj eno rešitev, mora ???the origin??? biti v $W(A)$. $W(A)$ si lahko mislimo kot preslikavo, ki slika iz $n \times n$ kompleksnih matrik v podmnožico kompleksne ravnine. Označimo s $\sigma(A)$ množico vseh lastnih vrednosti matrike A, ki jo imenujemo spekter. Lastnosti zaloge vrednosti ([5]):

(1) $W(A)$ je konveksna, zaprta in omejena.
(2) $\sigma(A) \subseteq W(A)$.
(3) Za vsako unitarno matriko U, je $W(U^* A U) = W(A)$.
(4) $W(A + zI) = W(A) + z$, in $W(zA) = zW(A)$ za vsako kompleksno število z.
(5) Rob zaloge vrednosti $W(A), \partial W(A)$ je lomljenka algebrske krivulje, in vsaka točka v kateri $\partial W(A)$ ni diferenciabilna je lastna vrednost matrike A.
(6) Če je A normalna, potem $W(A) = Co(\sigma(A))$, kjer s Co označimo zaprto konveksno ogrinjačo množice.
(7) $W(A)$ je daljica na realni osi, če in samo če je A hermitska.

Izrek 1.2. *Naj imata A in b kompleksne elemente. Potem veljajo enakosti:*

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

Dokaz. ($\Rightarrow$) Če velja $b^* A b = 0$, je tudi $(b^* A b)^* = b^* A^* b = 0$. Če preoblikujemo prvo enačbo na desni v $b^* A b + b^* A^* b$ dobimo 0. Drugo enačbo podobno.

($\Leftarrow$) S seštevkom enačb na desni dobimo enačbo na levi:

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

□

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.

Lema 1.3. [4] *Izotropni vektorji matrike A so identični izotropnim vektorjem njenega simetričnega dela.*

Dokaz. To sledi iz $b^T Ab = b^T A_{sim} b + b^T A_{psim} b = b^T A_{sim} b$, kjer je z A_{sim} označen simetrični del matrike in z A_{psim} poševnosimetrični del matrike. □

Velja enakost:

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

Hermitski in poševno-hermitski del matrike A bomo označili s $H = (A + A^*)/2$ in $\tilde{K} = (A - A^*)/2 = \imath K$.

1.2. **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 realne matrike. To storimo z uporabo lastnih vektorjev matrike $H = (A + A^*)/2$. Ko je A realna matrika, nas zanima kako izračunati rešitev naslednje enačbe:

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

kjer je H realna in simetrična matrika (t.j. $H = H^T$). Vemo, da je $W(A)$ simetrična, glede na realno os in da je $0 \in W(A)$, če in samo če $\omega_1 \leq 0 \leq \omega_n$, kjer sta ω_1 in ω_n najmanjša in največja lastna vrednost matrike H. Naj bosta X_1 in X_n realna lastna vektorja, pripadajoča ω_1 in ω_n. Potem sta $X_1^T AX_1 = X_1^T HX_1 = \omega_1$ in $X_n^T AX_n = X_n^T HX_n = \omega_n$ 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

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

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

$$b^* Hb = b^* X\Omega X^T b = 0.$$

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

Izrek 2.1. *Naj bo b rešitev problema* (3), *potem vektor $c = X^T b$ s komponentami c_i zadošča naslednjima enačbama:*

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

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

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

Ker je Ω diagonalna matrika, lahko $c^* \Omega c$ zapišemo kot vsoto komponent $\bar{c}_i \omega_i c_i = \omega_i |c_i|^2$, ko $i = 1, 2, ...n$. Za drugo enačbo vemo, da je $\|b\| = 1$, kar če zapišemo s c je enako

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

saj je X ortonormirana matrika.

$\square$

Opomba: (4) velja samo za realna števila. Zaradi 2.1 mora biti 0 konveksna kombinacija lastnih vrednosti ω_i. Kot smo že videli, to pomeni, da če je A ali $-A$ pozitivna realna matrika, potem (3) nima netrivialne rešitve. Drugače je $0 \in W(A)$ in lahko vedno najdemo realno rešitev. Vbistvu kadar je $n > 2$, imamo neskončno rešitev.

2.1. **Iskanje izotropnih vektorjev.** Najprej bomo za izračun uporabili dva lastna vektorja, pozneje pa bomo vidli kako se izračuna več rešitev z uporabo treh lastnih vektorjev. Ker nimajo vse lastne vrednosti matrike H enakega predznaka, predpostavimo, da mora za najmanjšo lastno vrednost ω_1 veljati $\omega_1 < 0$. Naj bo $k > 1$ tak, da je $\omega_k > 0$ in t naj bo pozitivno realno število, manjše od 1. Običajno bomo rekli, da je $k = n$. Označimo $|c_1|^2 = t$,$|c_k|^2 = 1 - t$ in $c_i \neq 0, i \neq 1, k$, kar velja zaradi druge enačbe v 2.1, $t + (1 - t) = 1$. Iz prve enačbe v 2.1 mora veljati enačba

$$\omega_1 t + \omega_k (1 - t) = 0,$$

katere rešitev je:

$$t_s = \frac{\omega_k}{\omega_k - \omega_1}. \tag{5}$$

Ker je $\omega_1 < 0$, je imenovalec pozitiven in t_s pozitiven ter $t_s < 1$. Modul od c_1 (oz. c_k) je kvadratni koren od t_s (oz. $1 - t_s$). Ker je $b = Xc$, sta dve realni rešitvi:

$$b_1 = \sqrt{t_s} X_1 + \sqrt{1 - t_s} X_k, \quad b_2 = -\sqrt{t_s} X_1 + \sqrt{1 - t_s} X_k,$$

kjer sta X_1 in X_k lastna vektorja, ki pripadata lastnima vrednostima ω_1 in ω_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:

$$b_1 = \sqrt{\omega_k} X_1 + \sqrt{|\omega_1|} X_k, \quad b_2 = -\sqrt{\omega_k} X_1 + \sqrt{|\omega_1|} X_k$$

(sledi iz [4]). Vektor rešitev mora biti normiran, da bo enotski:

$$b_1 = \sqrt{\frac{\omega_k}{\omega_k + |\omega_1|}} X_1 + \sqrt{\frac{|\omega_1|}{\omega_k + |\omega_1|}} X_k, b_2 = -\sqrt{\frac{\omega_k}{\omega_k + |\omega_1|}} X_1 + \sqrt{\frac{|\omega_1|}{\omega_k + |\omega_1|}} X_k.$$

V principu, lahko te b-je pomnožimo s $e^{i\theta}$, ampak nam to vrne rešitev v isti smeri. Vbistvu lahko uporabimo vsak par pozitivnih in negativnih lastnih vrednosti. Ta postopek lahko vrne toliko rešitev kot je dvakratno število parov lastnih vrednosti matrike H z nasprotnimi predznaki, če so vse lastne vrednosti različne. Konstruirani rešitvi sta neodvisni in še več, ortogonalni, če $\omega_k = -\omega_1$. Predpostavimo, da je b realen.

Posledica 2.2. [4] *Dobljena izotropna vektorja sta ortogonalna ($b_1^T b_2 = 0$), če in samo če $\omega_k = -\omega_1$.*

Dokaz.

$$b_1^T b_2 = (\sqrt{\omega_k} X_1 + \sqrt{|\omega_1|} X_k)^T (-\sqrt{\omega_k} X_1 + \sqrt{|\omega_1|} X_k) = -(\omega_1 + \omega_k).$$

□

Ko sta A in b realna smo dokazali naslednji izrek:

Izrek 2.3. *Če je A realna in taka, da A ali $-A$ ni pozitivno realna, 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 z različnimi predznaki (ko obstajajo). Predpostavimo, da imamo $\omega_1 < 0 < \omega_2 < \omega_3$ in naj bo $t_1 = |c_1|^2$, $t_2 = |c_2|^2$. Enačba, ki mora veljati je:

$$\omega_1 t_1 + \omega_2 t_2 + \omega_3(1 - t_1 - t_2) = (\omega_1 - \omega_3)t_1 + (\omega_2 - \omega_3)t_2 + \omega_3 = 0, \tag{6}$$

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

$$t_2 = \frac{\omega_3}{\omega_3 - \omega_2} - \frac{\omega_3 - \omega_1}{\omega_3 - \omega_2} t_1,$$

ki definira premico v (t_1, t_2) ravnini. Preveriti moramo, če ta premica seka trikotnik, definiran s pogoji za t_1, t_2. Premica seka t_1-os pri $\omega_3/(\omega_3 - \omega_1)$, kar je več kot 1, saj je $\omega_1 < 0$, t_2-os pa pri $\omega_3/(\omega_3 - \omega_2)$, kar je 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 $\omega_1 < \omega_2 < 0 < \omega_3$ je podoben zgornjemu, le da premica seka t_2-os pod 1. Potem dobimo rešitve b s kombiniranjem pripadajočih treh lastnih vektorjev. Ta problem za iskanje koeficientov je v treh dimenzijah in možne rešitve t-ja so v eni dimenziji. Takšna konstrukcija pripelje do naslednjega izreka:

Izrek 2.4. *Če je $n > 2$ in A je realna, tako da A ali $-A$ ni pozitivno realna matrika, in 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:

$$\sum_{i=1}^{k-1} (\omega_i - \omega_k)t_i + \omega_k = 0, \quad t_i \geq 0, i = 1, \ldots, k-1, \sum_{i=1}^{k-1} t_i \leq 1. \tag{7}$$

Prva enačba opisuje hiperravnino v kateri moramo poiskati presečišča te hiperravnine z volumnom??, ki je definiran s pogoji. Če je A realna matrika smo končali, saj smo pokazali, da lahko poračunamo toliko realnih rešitev kot hočemo. Posebej lahko sčasoma izračunamo n neodvisnih rešitev, čeprav to ne definira izotropni podprostor.

3. Kompleksne matrike

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

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 in pozitivnim in negativnim imaginarnim delom???. Z uporabo treh lastnih vektorjev H, obstaja neskončno rešitev dobljenih v daljici trikotnika omejitev. Ko točko nenehno sprehajamo po daljici, se tudi imaginarni del rešitve nenhno spreminja. Če sta imaginarna dela, ki ustrezata robnima točkama daljice, različnih predznakov, potem sledi iz izreka o povprečni vrednosti, da obstaja točka na daljici, ki ima ničeln imaginarni del.??To se lahko izračuna z dihotomijo??. 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 nobene trojčke lastnih 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. Konstrukcija v 2. razdelku vrne vektorje b, tako da je $\Im(b*Ab) = 0$. S kombiniranjem lastnih vektorjev matrike K pripadjočim k pozitivnim in negativnim lastnim vrednostim, lahko (v nekaterih primerih) izračunamo dva vektorja b_1 in b_2, taka 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 $b(t, \theta) = e^{-i\theta}b_1 + tb_2, t, \theta \in \mathbb{R}, \alpha(\theta) = e^{i\theta}b_1^*Ab_2 + e^{-i\theta}b_2^*Ab_1$. Potem je*

$$b(t, \theta)^*Ab(t, \theta)) = \alpha_2 t^2 + \alpha(\theta)t + \alpha_1,$$

$\alpha(\theta) \in \mathbb{R}$, ko $\theta = arg(b_2^*Ab_1 - b_1^T\bar{A}\bar{b_2})$. Za $t_1 = (-\alpha(\theta) + \sqrt{\alpha(\theta)^2 - 4\alpha_1\alpha_2})/(2\alpha_2)$, 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.
Opomba: 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 primerne vektorje b_1 in b_2. Posebej, Y_i lastni vektorji K, če imajo vrednosti $\Re(Y_i^*HY_j)$ enak predznak, konstrukcija ne deluje.

Ekstremen primer je Jordanski blok z kompleksno vrednostjo α na diagonali in elementi 1 na naddiagonali. Potem imamo $\Re(Y_i^* H Y_j) = 0, i \neq j$ in $Y_i^* H Y_i = -\Re(\alpha)$. Zato so realni deli $b^* A b$ za vse vektorje b, ki se lahko konstruirajo, enaki.
Ko ni možno izračunati vseh vektorjev b_1 in b_2 potrebnih za lemo 3.1, izračunamo lastne vektorje H in uporabimo enako tehniko za matriko iA. V primeru neuspeha, kombiniramo lastne vektorje H in K. Naj bo x (oz. y) lastna vrednost K (oz. H), upoštevamo vektorje $X_\theta = cos(\theta)x + sin(\theta)y, 0 \leq \theta \leq \pi$. Ko gre θ od 0 do π, $X_\theta^* A X_\theta$ opisuje elipso v zalogi vrednosti. Za dan par lastnih vektorjev x, y iščemo presečišča elipse z realno osjo. Opazimo, da je $A = H + iK$, torej imamo:

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

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 dek $X_\theta^* A X \theta$ 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 $t = tan(\theta)$,

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

Če ima ta enačba realne rešitve, potem dobimo vrednosti θ, ki nam vrnejo take vektorje X_θ, da $\Im(X_\theta^* A X_\theta) = 0$. Ko je velikost problema velika, ne uporabimo te konstrukcije za vse pare lastnih vektorjev, saj nas to lahko preveč stane. Uporabimo samo lastne vektorje, ki pripadajo par najmanjšim in največjim lastnim vrednostim. Če tudi ta konstrukcija ne deluje, uporabimo algoritem iz [3], ki je opisan malo naprej v nalogi.

4. Algoritmi/Numerična analiza

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 detemination of the field of values of a general complex matrix*, SIAM J. Numer. Anal. **15** (1978) 595–602.