Metoda QR cu deplasare explicită pentru matrice simetrice

Noțiuni teoretice

Din cauza creșterii rapide a erorii obținute, metodele puterii nu se folosesc la calcularea tuturor valorilor proprii ale unei matrice.

O alternativă este algoritmul QR care determină simultan toate valorile proprii ale unei matrice simetrice tridiagonale. Pentru a putea determina valorile proprii ale oricărei matrice simetrice, vom folosi în prealabil metoda Householder, metodă care transformă o matrice simetrică într-una simetrică tridiagonală.

Matricea A, de dimensiune $n \times n$, în forma simetrică tridiagonală este:

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & b_2 & 0 & \cdots & 0 \\ b_2 & a_2 & b_3 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & b_{n-1} & a_{n-1} & b_n \\ 0 & \cdots & 0 & b_n & a_n \end{bmatrix}$$

Dacă $b_2 = 0$, respectiv $b_n = 0$, atunci matricea A va avea o valoare proprie egală cu a_1, respectiv cu a_n. Ceea ce face metoda QR în cazul în care b_2 și b_n sunt diferite de 0 este să scadă progresiv valorea lui b_2, respectiv a lui b_n, până devin aproximativ egale cu 0.

Când $b_j = 0$ pentru o valoare a lui j care respectă condiția $2 < j < n$, problema poate fi redusă la rezolvarea a două probleme de dimensiune mai mică: o problemă de dimensiune $j - 1$ (a) și o problemă de dimensiune $n - j + 1$ (b).

$$
(a) \quad \begin{bmatrix} a_1 & b_2 & 0 & \cdots & 0 \\ b_2 & a_2 & b_3 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & b_{j-1} \\ 0 & \cdots & 0 & b_{j-1} & a_{j-1} \end{bmatrix} \qquad (b) \quad \begin{bmatrix} a_j & b_{j+1} & 0 & \cdots & 0 \\ b_{j+1} & a_{j+1} & b_{j+2} & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & b_n \\ 0 & \cdots & 0 & b_n & a_n \end{bmatrix}
$$

Dacă niciuna din valorile b_j nu este egală cu 0, atunci metoda QR presupune formarea unei secvențe $A = A^{(1)}, A^{(2)}, A^{(3)}...$ după cum urmează:

- $A^{(1)} = A$ este factorizată ca fiind $A^{(1)} = Q^{(1)}R^{(1)}$, unde $Q^{(1)}$ este o matrice ortogonală, iar $R^{(1)}$ este o matrice superior triunghiulară.
- $A^{(2)} = R^{(1)}Q^{(1)}...$

În general, $A^{(i)}$ este factorizat ca fiind $A^{(i)} = Q^{(i)}R^{(i)}$, unde $Q^{(i)}$ este o matrice ortogonală, iar $R^{(i)}$ este o matrice superior triunghiulară. Apoi, $A^{(i+1)} = R^{(i)}Q^{(i)}$. Deoarece $Q^{(i)}$ este ortogonală, $R^{(i)} = {Q^{(i)}}^t A^{(i)}$ şi $A^{(i+1)} = R^{(i)}Q^{(i)} = ({Q^{(i)}}^t A^{(i)})Q^{(i)} = {Q^{(i)}}^t A^{(i)}Q^{(i)}$.

Acest operații asigură faptul că $A^{(i+1)}$ este o matrice simetrică ce are aceleași valori proprii ca $A^{(i)}$ și, având în vedere că inițial $A^{(1)} = A$, înseamnă că $A^{(i+1)}$ are aceleași valori proprii ca matricea A. Tridiagonalitatea matricei $A^{(i+1)}$ este asigurată de modul în care definim $R^{(i)}$ și $Q^{(i)}$.

Matrice de rotație

Pentru a putea descrie construirea matricelor $Q^{(i)}$ și $R^{(i)}$, este necesară definirea noțiunii de *matrice de rotație*. O *matrice de rotație* P este diferită de matricea identitate în cel mult patru elemente. Aceste patru elemente sunt: $p_{ii} = p_{jj} = cos\Theta$ și $p_{ij} = -p_{ji} = sin\Theta$, pentru o valoare Θ și $i \neq j$.

Orice matrice de rotație P este ortogonală pentru că definiția implică $PP^t = I$. Pentru orice matrice de rotație P, matricea produs AP este diferită de A doar prin valorile din coloanele i și j, în timp ce matricea produs PA este diferită de A doar prin valorile din liniile i și j. Mai mult, pentru orice $i \neq j$, valoarea unghiului Θ poate fi aleasă astfel încât elementul $(PA)_{ij}$ să se anuleze.

Construcția matricelor Q și R

Pentru a obține matricea superior triunghiulară $R^{(1)}$, sunt necesare mai multe matrice de rotație aplicate asupra matricei A.

$$R^{(1)} = P_n P_{n-1} ... P_2 A^{(1)}$$

Pentru început, construim matricea de rotație P_2 cu:

$$p_{11} = p_{22} = cos\Theta_2, \quad p_{12} = -p_{21} = sin\Theta_2$$

unde

$$sin\Theta_2 = \frac{b_2}{\sqrt{{b_2}^2 + {a_1}^2}}, \quad cos\Theta_2 = \frac{a_1}{\sqrt{{b_2}^2 + {a_1}^2}}$$

Pentru verificare, vom calcula produsul:

$$(-sin\Theta_2)a_1 + (cos\Theta_2)b_2 = \frac{-b_2 a_1}{\sqrt{{b_2}^2 + {a_1}^2}} + \frac{a_1 b_2}{\sqrt{{b_2}^2 + {a_1}^2}} = 0$$

ceea ce înseamnă că elementul din poziția $(2, 1)$ din matricea ${A_2}^{(1)} = P_2 A^{(1)}$ este egal cu 0. Înmulțirea lui P_2 cu $A^{(1)}$ modifică liniile 1 și 2, însă având în vedere că matricea $A^{(1)}$ este tridiagonală, doar valoarea elementului de indice (1,3) poate deveni diferit de 0 în matricea ${A_2}^{(1)}$.

În general, matricea P_k este aleasă astfel încât elementul cu indicele $(k, k-1)$ din ${A_k}^{(1)} = P_k {A_{k-1}}^{(1)}$ să fie 0. Ceea ce face ca elementul de indice $(k-1, k+1)$ să devină diferit de 0.

După construirea tuturor matricelor de rotație $P_2, P_3, ...P_n$, putem determina matricele Q și R:

$$R^{(1)} = {A_n}^{(1)} = P_n P_{n-1} ... P_2 A$$
$$Q^{(1)} = {P_2}^t {P_3}^t ... {P_n}^t$$

Ortogonalitatea matricelor de rotație implică:

$$Q^{(1)} R^{(1)} = ({P_2}^t {P_3}^t ... P_n^t)(P_n ... P_3 P_2) A^{(1)} = A^{(1)}$$

Matricea $Q^{(1)}$ este ortogonală deoarece:

$${Q^{(1)}}^t Q^{(1)} = ({P_2}^t {P_3}^t ... P_n^t)^t ({P_2}^t {P_3}^t ... P_n^t) = (P_n ... P_3 P_2)({P_2}^t {P_3}^t ... P_n^t) = I$$

Accelerarea convergenței

Dacă valorile proprii $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n$, ale matricei A, au module diferite, rata de convergență a elementului ${b_{j+1}}^{(i+1)}$ către 0 în matricea $A^{(i+1)}$ depinde de raportul $\left|\frac{\lambda_{i+1}}{\lambda_i}\right|$. Convergența lui ${b_{j+1}}^{(i+1)}$ către 0 determină rata cu care elementul ${a_j}^{(i+1)}$ converge către valoarea proprie corespunzătoare λ_j.

Pentru a accelera convergența, vom implementa o tehnică de deplasare explicită: este aleasă o constantă σ, constantă apropiată de una din valorile proprii ale matricei A. În acest caz, factorizarea devine:

$$A^{(i)} - \sigma I = Q^{(i)} R^{(i)}$$

iar matricea $A^{(i+1)}$ este definită ca fiind:

$$A^{(i+1)} = R^{(i)} Q^{(i)} + \sigma I.$$

Cu această modificare, rata convergenței lui ${b_{j+1}}^{(i+1)}$ către 0 depinde de raportul $\left|\frac{\lambda_{i+1}-\sigma}{\lambda_i-\sigma}\right|$. Acest lucru poate aduce o îmbunătățire semnificativă asupra convergenței elementului ${a_j}^{(i+1)}$ către valoarea proprie corespunzătoare λ_j, în cazul în care σ este mai apropiat de λ_{j+1} decât de λ_j.

Vom schimba constanta σ la fiecare pas, astfel încât, atunci când A are valori proprii distincte în modul, ${b_n}^{(i+1)}$ să conveargă la 0 mai rapid decât oricare alt ${b_j}^{(i+1)}$, pentru orice j mai mic strict ca n. Când ${b_n}^{(i+1)}$ este aproape 0, tragem concluzia că λ_n este aproximativ egal cu ${a_n}^{(i+1)}$, după care eliminăm rândul n și coloana n și continuăm cu determinarea valorii proprii λ_{n-1}. Procesul se încheie în momentul în care am obținut câte o aproximare pentru fiecare valoare proprie a matricei A.

Tehnica de deplasare explicită alege la pasul i constanta σ_i ca fiind egală cu valoarea proprie cea mai apropiată de ${a_n}^{(i)}$ a matricei $E^{(i)}$:

$$E^{(i)} = \begin{bmatrix} {a_{n-1}}^{(i)} & {b_n}^{(i)} \\ {b_n}^{(i)} & {a_n}^{(i)} \end{bmatrix}$$

Probleme rezolvate

Problema 1

Să se determine matricea P cu proprietatea că PA are un element egal cu 0 în poziția $(2,1)$ (linia 2, coloana 1).

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix}$$

Soluție:

Forma lui P este: $P = \begin{bmatrix} cos\Theta & sin\Theta & 0 \\ -sin\Theta & cos\Theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

Prin urmare, $PA = \begin{bmatrix} 3cos\Theta + sin\Theta & cos\Theta + 3sin\Theta & sin\Theta \\ -3cos\Theta + cos\Theta & -sin\Theta + 3cos\Theta & cos\Theta \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix}$

Unghiul Θ este ales astfel încât $-3sin\Theta + cos\Theta = 0$, ceea ce înseamnă că $tg\Theta = \frac{1}{3}$.

Rezultă că: $cos\Theta = \frac{3\sqrt{10}}{10}, sin\Theta = \frac{\sqrt{10}}{10}$.

$$PA = \begin{bmatrix} \frac{3\sqrt{10}}{10} & \frac{\sqrt{10}}{10} & 0 \\ -\frac{\sqrt{10}}{10} & \frac{3\sqrt{10}}{10} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{10} & \frac{3\sqrt{10}}{5} & \frac{\sqrt{10}}{10} \\ 0 & \frac{4\sqrt{10}}{5} & \frac{3\sqrt{10}}{10} \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix}$$

Observație: După cum putem observa, matricea PA nu este nici simetrică, nici tridiagonală.

Problema 2

Determinați prima iterație a metodei QR pentru matricea A:

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix}$$

Soluție:

$A^{(1)} = A$ și P_2 reprezintă matricea de rotație determinată în cadrul problemei 1.

$$A_2{}^{(1)} = P_2 A^{(1)} = \begin{bmatrix} \frac{3\sqrt{10}}{10} & \frac{\sqrt{10}}{10} & 0 \\ -\frac{\sqrt{10}}{10} & \frac{3\sqrt{10}}{10} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{10} & \frac{3\sqrt{10}}{5} & \frac{\sqrt{10}}{10} \\ 0 & \frac{4\sqrt{10}}{5} & \frac{3\sqrt{10}}{10} \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix}$$

În continuare, calculăm:

$$sin\Theta_3 = \frac{1}{\sqrt{(1^2 + (\frac{4\sqrt{10}}{5})}^2} = 0.36761, \quad cos\Theta_3 = \frac{\frac{4\sqrt{10}}{5}}{\sqrt{(1^2 + (\frac{4\sqrt{10}}{5})}^2} = 0.92998$$

Vom determina $R^{(1)} = A_3{}^{(1)} = P_3 A_2{}^{(1)}$ și $Q^{(1)} = P_2{}^t P_3{}^t$ astfel:

$$R^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.92998 & 0.36761 \\ 0 & -0.36761 & 0.92998 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \sqrt{10} & \frac{3\sqrt{10}}{5} & \frac{\sqrt{10}}{10} \\ 0 & \frac{4\sqrt{10}}{5} & \frac{3\sqrt{10}}{10} \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} \sqrt{10} & \frac{3\sqrt{10}}{5} & \frac{\sqrt{10}}{10} \\ 0 & 2.7203 & 1.9851 \\ 0 & 0 & 2.4412 \end{bmatrix}$$

$$Q^{(1)} = \begin{bmatrix} \frac{3\sqrt{10}}{10} & -\frac{\sqrt{10}}{10} & 0 \\ \frac{\sqrt{10}}{10} & \frac{3\sqrt{10}}{10} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.92998 & -0.36761 \\ 0 & 0.36761 & 0.92998 \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} 0.94868 & -0.29409 & 0.11625 \\ 0.31623 & 0.88226 & -0.34874 \\ 0 & 0.36761 & 0.92998 \end{bmatrix}$$

În consecință, $A^{(2)} = R^{(1)} Q^{(1)}$

$$A^{(2)} = \begin{bmatrix} \sqrt{10} & \frac{3\sqrt{10}}{5} & \frac{\sqrt{10}}{10} \\ 0 & 2.7203 & 1.9851 \\ 0 & 0 & 2.4412 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0.94868 & -0.29409 & 0.11625 \\ 0.31623 & 0.88226 & -0.34874 \\ 0 & 0.36761 & 0.92998 \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} 3.6 & 0.8602 & 0 \\ 0.8602 & 3.1297 & 0.8974 \\ 0 & 0.8974 & 2.2702 \end{bmatrix}$$

Elementele de sub diagonala principală din matricea $A^{(2)}$ sunt mai mici decât cele din matricea $A^{(1)}$ cu aproximativ 14%. Pentru a obține valori sub 0.001, vor fi necesare 13 iterații folosind algoritmul QR. După 13 iterații, vom obține:

$$A^{(13)} = \begin{bmatrix} 4.4139 & 0.01941 & 0 \\ 0.01941 & 3.0003 & 0.00095 \\ 0 & 0.00095 & 1.5858 \end{bmatrix}$$

Ceea ce înseamnă că am determinat aproximația unei valori proprii a matricei A, 1.5858 și că putem determina și celelalte două valori proprii calculând valorile proprii ale matricei reduse:

$$\begin{bmatrix} 4.4139 & 0.01941 \\ 0.01941 & 3.0003 \end{bmatrix}$$

Problema 3

Aplicați metoda QR cu deplasare explicită pentru matricea A:

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix}$$

Soluție:

Pentru a determina factorul de accelerare σ_1, trebuie să determinăm valorile proprii ale matricei $\begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}$ care sunt $\mu_1 = 4$ și $\mu_2 = 2$. Cum ambele valori sunt la fel de depărtate de valoarea lui ${a_3}^{(1)}$, alegem pe oricare dintre cele două, de exemplu, pe $\mu_2 = 2$. Prin urmare, $\sigma_1 = 2$.

$$A^{(1)} - \sigma_1 I = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Continuăm cu determinarea lui ${A_2}^{(1)}$, ca în cazul algoritmului fără deplasare:

$${A_2}^{(1)} = \begin{bmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Determinăm $R^{(1)} = {A_3}^{(1)} = \begin{bmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$ și

$$A^{(2)} = R^{(1)}Q^{(1)} = \begin{bmatrix} 2 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 1 & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \end{bmatrix}$$

Am terminat o iterație a algoritmului QR. Nici ${b_2}^{(2)} = \frac{\sqrt{2}}{2}$, nici ${b_3}^{(2)} = -\frac{\sqrt{2}}{2}$ nu sunt suficient de apropiate de 0, așa că vom calcula și pasul următor al algoritmului QR. De data aceasta, determinăm valorile proprii ale matricei:

$$\begin{bmatrix} 1 & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \end{bmatrix}$$

Acestea sunt $\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{3}$. Determinăm cea mai apropiată valoare proprie de ${a_3}^{(2)} = 0$. Rezultă $\sigma_2 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{3}$.

$$A^{(3)} = \begin{bmatrix} 2.6720277 & 0.37597448 & 0 \\ 0.37597448 & 1.4736080 & 0.030396964 \\ 0 & 0.030396964 & -0.047559530 \end{bmatrix}$$

Dacă ${b_3}^{(3)} = 0.030396964$ este suficient de apropiat de 0, atunci aproximația valorii proprii λ_3 este 1.5864151, suma dintre ${a_3}^{(3)}$ și $\sigma_1 + \sigma_2 = 2 + \frac{1-\sqrt{3}}{2}$. Eliminând a treia linie și a treia coloană din $A^{(3)}$ obţinem:

$$A^{(3)} = \begin{bmatrix} 2.6720277 & 0.37597448 \\ 0.37597448 & 1.4736080 \end{bmatrix}$$

cu valorile proprii μ_1=2.7802140 și μ_2=1.3654218. Prin urmare, $\lambda_1 \approx \mu_1 + \sigma_1 + \sigma_2 = 4.4141886$ și $\lambda_2 \approx \mu_2 + \sigma_1 + \sigma_2 = 2.9993964$.

Valorile proprii exacte ale matricei A sunt $\lambda_1 = 4.41420$, $\lambda_2 = 3.00000$, și $\lambda_3 = 1.58579$, ceea ce demostrează că algoritmul QR cu deplasare explicită oferă precizie bună și în cazul unui număr mic de iterații.

Probleme propuse

Problema 1

Implementați în OCTAVE algoritmul QR fără deplasare pentru determinarea valorilor proprii ale unei matrice simetrice tridiagonale. Date de intrare: A - matricea simetrică tridiagonală; n - dimensiunea matricei; tol - toleranța acceptată; $maxiter$ - numărul maxim de iterații. Date de ieșire: valorile proprii ale matricei A sau un mesaj de eroare în cazul în care a fost depășit $maxiter$.

Problema 2

Pornind de la programul anterior, realizați implementarea algoritmului QR cu deplasare explicită pentru a determina valorile proprii ale unei matrice simetrice tridiagonale.

Problema 3

Determinați primele două iterații ale algoritmului QR fără deplasare pentru matricile simetrice tridiagonale următoare:

$$(a)\quad \begin{bmatrix} 6 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & 2 \\ 0 & 2 & 3 \end{bmatrix} \qquad (b)\quad \begin{bmatrix} 2 & 4 & 0 \\ 4 & 2 & -3 \\ 0 & -3 & -1 \end{bmatrix}$$

$$(c)\quad \begin{bmatrix} 2 & -3 & 0 & 0 \\ -3 & 3 & -2 & 0 \\ 0 & -2 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \qquad (d)\quad \begin{bmatrix} 2 & -2 & 0 & 0 \\ -2 & 2 & 4 & 0 \\ 0 & 4 & 2 & -2 \\ 0 & 0 & -2 & 3 \end{bmatrix}$$

Problema 4

Folosind algoritmul QR cu deplasare explicită, determinați valorile proprii ale matricelor de la *Problema* 3 cu o toleranță de 10^{-5}.