

Metody Numeryczne - Zadanie IV

Mateusz Kamiński

Listopad 2025

1 Wstęp

Celem zadania jest sprowadzenie macierzy \mathbf{A} do postaci trójdiamondalnej, wykorzystamy do tego transformację Householdera, która nie zmieni widma macierzy \mathbf{A} . Następnie należało znaleźć jej wektory własne, wykorzystamy do tego fakt, że dowolna macierz podobna $\mathbf{B} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}$, gdzie \mathbf{P} to dowolna macierz odwracalna, ma identyczne widmo z macierzą \mathbf{A} . Do sprowadzenia macierzy do postaci diagonalnej użyjemy obrotów Givensa, aby wyeliminować elementy pod diagonalą oraz żeby w kolejnym kroku móc odczytać wartości własne.

2 Opis

2.1 Trójdiamondalizacja

Rozważana w zadaniu macierz A ma postać:

$$A = \begin{pmatrix} \frac{19}{12} & \frac{13}{12} & \frac{5}{6} & \frac{5}{6} & \frac{13}{12} & -\frac{17}{12} \\ \frac{13}{12} & \frac{13}{12} & \frac{5}{6} & \frac{5}{6} & -\frac{11}{12} & \frac{13}{12} \\ \frac{5}{6} & \frac{5}{6} & \frac{5}{6} & -\frac{1}{6} & \frac{5}{6} & \frac{5}{6} \\ \frac{5}{6} & \frac{5}{6} & -\frac{1}{6} & \frac{5}{6} & \frac{5}{6} & \frac{5}{6} \\ \frac{13}{12} & -\frac{11}{12} & \frac{5}{6} & \frac{5}{6} & \frac{13}{12} & \frac{13}{12} \\ -\frac{17}{12} & \frac{13}{12} & \frac{5}{6} & \frac{5}{6} & \frac{13}{12} & \frac{19}{12} \end{pmatrix}$$

Na początku zadania sprowadzamy macierz \mathbf{A} do postaci trójdiamondalnej, wykorzystując odbicia Householdera. Transformacja Householdera pozwala wyzerować wybrane elementy w kolumnach macierzy. W praktyce, dla każdej kolumny k (poza dwoma ostatnimi) bierzemy wektor

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}_{k+1:n, k}$$

czyli fragment kolumny rozpoczynający się poniżej diagonalnego elementu. Następnie obliczamy jego normę $\|x\|$ i na tej podstawie tworzymy wektor \mathbf{v} .

$$\mathbf{v} = \mathbf{x} + \sigma \|x\| \mathbf{e}_1, \quad \sigma = \text{sign}(x_1)$$

gdzie $\mathbf{e}_1 = (1, 0, 0, 0, 0, 0)^T$.

Następnie normalizujemy wektor v , otrzymując wektor Householdera:

$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{v}}{\|\mathbf{v}\|}.$$

Na tej podstawie budujemy macierz odbicia

$$\mathbf{H}_k = \mathbf{I} - 2\mathbf{u}\mathbf{u}^T,$$

która zeruje wszystkie elementy poniżej pierwszego w k -tej kolumnie. Macierz transformacji przyjmuje postać:

$$\mathbf{Q}_k = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_k & 0 \\ 0 & \mathbf{H}_k \end{pmatrix},$$

dzięki czemu przekształca tylko odpowiedni fragment macierzy \mathbf{A} . W każdym kroku wykonujemy transformację podobieństwa

$$\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{Q}_k^T \mathbf{A} \mathbf{Q}_k,$$

co zachowuje widmo macierzy, a jednocześnie zeruje kolejne elementy macierzy \mathbf{A} . Po wykonaniu $n - 2$ takich kroków otrzymujemy macierz trójdiamondalną.

Uzyskana w ten sposób macierz ma postać

$$\mathbf{T} = \mathbf{Q}^T \mathbf{A} \mathbf{Q},$$

gdzie \mathbf{T} jest trójdiamondalna, a \mathbf{Q} jest iloczynem wszystkich odbić Householdera. Macierz \mathbf{T} zachowuje wszystkie wartości własne macierzy \mathbf{A} , co pozwala w dalszym etapie na efektywne zastosowanie algorytmu QR z obrotami Givensa do sprowadzenia jej do postaci diagonalnej. Otrzymana macierz \mathbf{T} wygląda:

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} 1.5833 & -2.3965 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ -2.3965 & -0.0126 & 0.9348 & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & 0.9348 & 2.3690 & -2.0789 & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & -2.0789 & 0.0602 & 0.0000 & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & 0.0000 & 1.7078 & -0.4548 \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & -0.4548 & 1.2922 \end{pmatrix}.$$

2.2 Szukanie wartości własnych – diagonalizacja

Gdy mamy już macierz \mathbf{T} przystępujemy do wyznaczania jej wartości własnych. W tym celu stosujemy iteracyjny algorytm QR oparty na obrotach Givensa, który w przypadku macierzy trójdiamondalnych działa wyjątkowo efektywnie (jeden obrót w czasie $\mathcal{O}(1)$, sumarycznie $\mathcal{O}(n)$).

W każdej iteracji zerujemy kolejno elementy pod diagonalą przy pomocy rotacji Givensa skonstruowanej tak, aby wyzerować element $\mathbf{T}_{i+1,i}$. Obrót działa lokalnie na dwóch sąsiednich wierszach i kolumnach, co powoduje pojawienie się dodatkowego elementu poza trójdiamondalnością, który następnie jest „spychany” w dół macierzy.

Po wystarczającej liczbie iteracji macierz \mathbf{T} staje się w przybliżeniu diagonalna, a jej wartości na przekątnej stanowią przybliżenia wartości własnych macierzy \mathbf{A} .

2.3 Działanie obrotu Givensa

W celu wyzerowania elementu $\mathbf{T}_{i+1,i}$ stosujemy rotację Givensa działającą na parę elementów (a, b) znajdujących się w tej samej kolumnie:

$$\begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \\ 0 \end{pmatrix}, \quad r = \sqrt{a^2 + b^2}, \quad c = \frac{a}{r}, \quad s = \frac{b}{r}.$$

Oznacza to, że odpowiednia kombinacja liniowa wierszy i oraz $i+1$ pozwala zastąpić wartość b przez zero.

PRZED OBROTEM ($G @ T$):

kolumny →						
...	i	i+1	i+2	...		
<hr/>						
i	...	a	x	y	...	
i+1	...	b	u	v	...	

PO OBROCIE:

kolumny →						
...	i	i+1	i+2	...		
<hr/>						
i	...	r	*	*	...	
i+1	...	0	*	*	...	

Po zastosowaniu rotacji Givensa wiersz i oraz wiersz $i + 1$ ulegają przekształceniu według wzorów:

$$\text{new_row}_i = c \text{row}_i + s \text{row}_{i+1}, \quad \text{new_row}_{i+1} = -s \text{row}_i + c \text{row}_{i+1}.$$

Rotacja wyzerowała element $T_{i+1,i}$, natomiast pozostałe elementy w dwóch wierszach zostały odpowiednio zmodyfikowane (oznaczone jako *).

W przypadku macierzy trójdiamondowej zmieniają się wyłącznie te elementy, które leżą w sąsiedztwie diagonalnym. Przykład lokalnego fragmentu macierzy przed obrotem:

PRZED:

i-1 i i+1						
<hr/>						
i	x		a		c	
i+1	0		b		e	

Po zastosowaniu obrotu Givensa otrzymujemy strukturę:

PO:

i-1 i i+1						
<hr/>						
i	x'		r		c'	
i+1	0		0		e'	

gdzie r jest nową wartością na diagonalnej, 0 jest wyzerowanym elementem pod diagonalą, a pozostałe wpisy x', c', e' trzeba wyliczyć.

Aby zachować symetrię oraz strukturę trójdiamondową macierzy, po wykonaniu obrotu na wierszach stosujemy ten sam obrót Givensa na odpowiednich kolumnach, co odpowiada operacji

$$T \leftarrow T G^T.$$

Obrót ten działa analogicznie jak wcześniej, lecz na kolumnach i oraz $i + 1$:

$$\text{new_col}_i = c \text{col}_i + s \text{col}_{i+1}, \quad \text{new_col}_{i+1} = -s \text{col}_i + c \text{col}_{i+1}.$$

Operacja kolumnowa usuwa efekt uboczny powstały po obrocie wierszy. W wyniku przekształcenia wierszy pojawią się dodatkowy element poza trójdiamondnością, w pozycji $T_{i,i+2}$ lub $T_{i+1,i-1}$.

Z tego powodu zarówno obrót wierszy

$$\mathbf{T} \leftarrow \mathbf{G} \mathbf{T},$$

jak i obrót kolumn

$$\mathbf{T} \leftarrow \mathbf{T} \mathbf{G}^T,$$

muszą działać lokalnie w zakresie od $i - 1$ do $i + 2$. Tylko w tym otoczeniu mogą pojawić się niezerowe liczby po transformacji; wszystkie pozostałe elementy macierzy pozostają równe zero.

2.4 Algorytm QR

W klasycznym algorytmie QR wykonujemy faktoryzację

$$\mathbf{T}_k = \mathbf{Q}_k \mathbf{R}_k,$$

a następnie aktualizujemy macierz według wzoru

$$\mathbf{T}_{k+1} = \mathbf{R}_k \mathbf{Q}_k.$$

Macierz \mathbf{Q}_k jest iloczynem ortogonalnych rotacji Givensa, które zerują kolejne elementy pod diagonalą w macierzy \mathbf{T}_k . Gdybyśmy zapisywali wszystkie te rotacje jawnie, otrzymalibyśmy

$$\mathbf{Q}_k = \mathbf{G}_1^T \mathbf{G}_2^T \cdots \mathbf{G}_m^T,$$

gdzie każda macierz \mathbf{G}_j jest obrotem Givensa działającym na dwóch sąsiednich wierszach.

W mojej implementacji nie tworzymy jednak macierzy \mathbf{Q}_k jawnie. Zamiast tego stosujemy każdą rotację Givensa bezpośrednio do macierzy \mathbf{T}_k . Najpierw wykonujemy mnożenie z lewej strony

$$\mathbf{T}_k \leftarrow \mathbf{G}_j \mathbf{T}_k,$$

co odpowiada części operacji $\mathbf{Q}_k^T \mathbf{T}_k$, a następnie mnożymy przez odpowiednią rotację z prawej strony

$$\mathbf{T}_k \leftarrow \mathbf{T}_k \mathbf{G}_j^T,$$

co realizuje część operacji $\mathbf{T}_k \mathbf{Q}_k$.

Ponieważ w klasycznym zapisie QR zachodzi

$$\mathbf{R}_k = \mathbf{Q}_k^T \mathbf{T}_k,$$

możemy zapisać aktualizację macierzy w postaci

$$\mathbf{T}_{k+1} = (\mathbf{Q}_k^T \mathbf{T}_k) \mathbf{Q}_k,$$

czyli w pełnej postaci przekształcenia podobieństwa

$$\mathbf{T}_{k+1} = \mathbf{Q}_k^T \mathbf{T}_k \mathbf{Q}_k.$$

3 Implementacja

```
import numpy as np
from numpy.typing import NDArray

vector = NDArray[np.float64]
matrix = NDArray[np.float64]

def house_holder(x: vector) -> vector:
    # znak x[0]
    sigma = 1.0 if x[0] >= 0 else -1.0

    # odbicie wektora
    v = x.copy()
    x_norm = np.linalg.norm(x)
    v[0] += sigma * x_norm

    # normalizacja wektora Householdera u
    v_norm = np.linalg.norm(v)
    u = v / v_norm

    return u

def tridiagonalize(A: matrix) -> tuple[matrix, matrix]:
    A = A.copy()
    n = A.shape[0]

    for k in range(n - 2):
        # opuszczamy pierwszy element
        x = A[k + 1:, k]

        u = house_holder(x)

        # tworzenie macierzy Householdera
        H_small = np.eye(n - k - 1) - 2.0 * np.outer(u, u)

        # wstawiamy H_small w odpowiednie miejsce dużej macierzy Q_k
        Q_k = np.eye(n)
        Q_k[k + 1:, k + 1:] = H_small

        # transformacja podobieństwa
        A = (Q_k.T @ A) @ Q_k

    return A

def qr_step_tridiagonal(T: matrix) -> matrix:
    n = T.shape[0]
    T = T.copy()

    # QR T = Q R za pomocą rotacji Givensa (zerujemy elementy poddiagonalne)
    for i in range(n - 1):
        a = T[i, i]
        b = T[i + 1, i]

        r = np.hypot(a, b)
        c = a / r
        s = b / r

        apply_givens_rows(T, i, i+1, c, s)
        apply_givens_cols(T, i, i+1, c, s)

    return T
```

```

def apply_givens_rows(T, i, j, c, s):
    """
    Zastosowanie rotacji Givensa G na wierszach i,j: T := G @ T.
    """
    n = T.shape[0]

    left = max(0, i - 1)
    right = min(n - 1, i + 2)

    for col in range(left, right + 1):
        Ti = T[i, col]
        Tj = T[j, col]

        T[i, col] = c * Ti + s * Tj
        T[j, col] = -s * Ti + c * Tj

def apply_givens_cols(T, i, j, c, s):
    """
    Zastosowanie rotacji Givensa G na kolumnach i,j: T := T @ G^T.
    """
    n = T.shape[0]

    top = max(0, i - 1)
    bottom = min(n - 1, i + 2)

    for row in range(top, bottom + 1):
        Ti = T[row, i]
        Tj = T[row, j]

        T[row, i] = c * Ti + s * Tj
        T[row, j] = -s * Ti + c * Tj

def main():
    A: matrix = np.array([[19/12, 13/12, 5/6, 5/6, 13/12, -17/12],
                          [13/12, 13/12, 5/6, 5/6, -11/12, 13/12],
                          [5/6, 5/6, 5/6, -1/6, 5/6, 5/6],
                          [5/6, 5/6, -1/6, 5/6, 5/6, 5/6],
                          [13/12, -11/12, 5/6, 5/6, 13/12, 13/12],
                          [-17/12, 13/12, 5/6, 5/6, 13/12, 19/12]], dtype=np.float64)

    T = tridiagonalize(A)
    np.set_printoptions(linewidth=np.inf)
    print(T)
    print("\n\nAfter diagonal -----\n\n")
    eps = 1e-12
    max_iter = 1000

    for it in range(max_iter):
        diag_old = np.diag(T).copy()
        T = qr_step_tridiagonal(T)
        diag_new = np.diag(T)

        # sprawdzamy maksymalną zmianę przekątnej
        diff = np.linalg.norm(diag_new - diag_old)
        if diff < eps:
            print(f"Diagonal converged after {it} iterations, diff = {diff:.2e}")
            break
    print(T)

```

```

if __name__ == "__main__":
    main()

```

3.1 Wyniki

Po wykonaniu redukcji do postaci trójdiamondalnej oraz kolejnych iteracji algorytmu QR, macierz \mathbf{T}_k ulega diagonalizacji. Na przekątnej macierzy końcowej otrzymujemy przybliżone wartości własne macierzy początkowej \mathbf{A} :

$$\lambda_1 = 4, \quad \lambda_2 = 3, \quad \lambda_3 = 2, \quad \lambda_4 = 1, \quad \lambda_5 = -1, \quad \lambda_6 = -2.$$

Są to wartości własne macierzy \mathbf{A} uzyskane jedynie na podstawie transformacji podobieństwa, dzięki czemu zachowują pełną poprawność numeryczną. Elementy pozadiagonalne macierzy \mathbf{T}_k są śmieciami rzędu $10^{-9}\text{--}10^{-16}$, co pozwala traktować macierz jako diagonalną.

Końcowa macierz po 74 iteracjach, z błędem $\epsilon = 10^{-12}$ ma postać:

$$\mathbf{A}_{\text{diag}} \approx \begin{pmatrix} 4.00000000 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & 3.00000000 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & -2.00000000 & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & 2.00000000 & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & -1.00000000 & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & 1.00000000 \end{pmatrix}$$

4 Podsumowanie

- Zastosowano transformacje Householdera do sprowadzenia macierzy \mathbf{A} do postaci trójdiamondalnej, co zmniejszyło koszt dalszych obliczeń z rzędu $\mathcal{O}(n^3)$ do $\mathcal{O}(n)$ na każdą iterację QR.
- Wykorzystano rotacje Givensa do wykonywania kolejnych iteracji algorytmu QR bez jawnego wyznaczania macierzy \mathbf{Q}_k i \mathbf{R}_k .
- Przekształcenie podobieństwa $\mathbf{T}_{k+1} = \mathbf{Q}_k^T \mathbf{T}_k \mathbf{Q}_k$ umożliwiło zachowanie wartości własnych macierzy.