Máster Universitario en Computación Paralela y Distribuida Algoritmos Matriciales Paralelos en Ingeniería

# Tema 4.

# Cálculo de valores propios generalizados: el Algoritmo iterativo QZ

# Bibliografía:

"Matrix Computations". G.Golub & C. Van Loan. Baltimore; London: Johns Hopkins University Press, 1996 (u otra edición del libro)

## Lecturas recomendadas:

"Matrix Computations". G.Golub & C. Van Loan.

Capítulo 7. Punto 7.7

# El problema generalizado de valores propios

#### Definiciones y conceptos básicos

Sean  $A \in C^{n \times n}$ ,  $B \in C^{n \times n}$ ,  $\lambda \in C$ .  $A - \lambda B \in C^{n \times n}$  se denomina *pencil* 

Valores propios del *pencil*  $A - \lambda B$ :  $\lambda(A, B) = \{z \in C : \det(A - zB) = 0\}$ 

Si  $\lambda \in \lambda(A, B)$  y  $Ax = \lambda Bx$ , con  $x \neq 0$ , entonces se dice que x es un vector propio de  $A - \lambda B$ 

Si rank(B) = n,  $A - \lambda B$  tiene n valores propios

Si rank(B) < n,  $\lambda(A, B)$  puede ser finito, vacío o infinito

Si 
$$0 \neq \lambda \in \lambda(A, B)$$
 entonces  $\frac{1}{\lambda} \in \lambda(B, A)$ 

Si B es no singular  $\lambda(A, B) = \lambda(B^{-1}A, I) = \lambda(B^{-1}A)$ 

## • Proposición: Descomposición Generalizada de Schur

Sean  $A \in C^{n \times n}$ ,  $B \in C^{n \times n}$ .

Existen matrices unitarias Q y Z tales que  $Q^HAZ = T$  y  $Q^HBZ = S$  son triangulares superiores.

Si existe algún k tal que  $t_{kk}$  y  $s_{kk}$  son ambos cero, entonces  $\lambda(A,B) = C$ .

Si no:  $\lambda(A, B) = \{t_{ii} / s_{ii} : s_{ii} \neq 0\}$ 

# • Proposición: Descomposición Real Generalizada de Schur

Sean  $A \in \mathfrak{R}^{n \times n}$ ,  $B \in \mathfrak{R}^{n \times n}$ .

Existen matrices ortogonales Q y Z tales que  $Q^TAZ = T$  es cuasi-triangular superior y  $Q^TBZ = S$  es triangular superior.

B =

-2

1

4

6

3 -1

2

>> eig(C)

ans =

-3.6644

0.7568

-0.6924

# **Ejemplo**

>> [AA,BB,Q,Z]=qz(A,B)

$$AA =$$

$$BB =$$

$$Q =$$

$$-0.9149 -0.3308 -0.2315$$

-3.6644

0.7568

-0.6924

# El algoritmo QZ: caso real. Ideas y funcionamiento

#### Idea básica para el cálculo de valores y vectores propios

Transformación que conserva los autovalores

Transformación que conserva los autovalores

 $\boldsymbol{A}$ 

 $\rightarrow$ 

Forma condensada

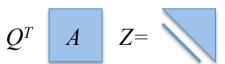


Forma canónica

#### Idea básica del algoritmo QZ:

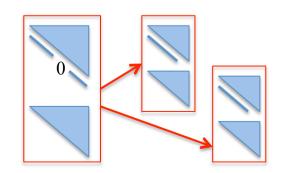
- 1. Reducción simultánea (en un número finito de pasos) de la matriz A a la forma de Hessenberg superior y de la B a la forma triangular superior.
- 2. Deflactar el problema, si es posible
- 3. Reducción simultánea, mediante un proceso iterativo, de la matriz A, en forma de Hessenberg superior, y de la matriz B, en forma triangular superior, a la forma triangular superior

Paso 1



$$Q^T \mid B \mid Z =$$

Paso 2



Paso 3

$$Q^T$$
  $A$   $Z=$   $T$ 

$$Q^T$$
  $B$   $Z=$   $S$ 

# 1. Reducción simultánea (en un número finito de pasos) de la matriz A a la forma de Hessenberg superior y de la B a la forma triangular superior.

1.1 Calcular U tal que  $U^TB$  sea triangular superior y construir  $U^TB$  y  $U^TA$ 

1.2 Reducir a la forma de Hessenberg superior manteniendo la estructura triangular superior de B y los valores propios generalizados del par (A,B)

1.2 Reducir a la forma de Hessenberg superior manteniendo la estructura triangular superior de B y los valores propios generalizados del par (A,B)

$$B = BZ_{45} = \begin{cases} x & x & x & x \\ 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x \\ 0 & 0 & 0 & x \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{cases}$$

$$B = Q^{T}_{34}B = \begin{cases} x & x & x & x \\ 0 & x & x & x \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} \end{cases}$$

1.2 Reducir a la forma de Hessenberg superior manteniendo la estructura triangular superior de B y los valores propios generalizados del par (A,B)

$$A = Q^{T}_{45}A = \begin{bmatrix} x & x & x & x & x \\ x & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \end{bmatrix}$$

$$B = Q^{T}_{23}B = \begin{bmatrix} x & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & 0 & x & x \\ 0 & 0 & 0 & x & x \end{bmatrix}$$

$$A = AZ_{45} = \begin{bmatrix} x & x & x & x & x \\ x & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \end{bmatrix}$$

$$B = BZ_{45} = \begin{bmatrix} x & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & 0 & x & x \\ 0 & 0 & 0 & 0 & x \end{bmatrix}$$

$$A = Q^{T}_{34}A = \begin{bmatrix} x & x & x & x & x \\ x & x & x & x & x \\ \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ 0 & 0 & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \end{bmatrix}$$

$$B = Q^{T}_{34}B = \begin{bmatrix} x & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{x} \end{bmatrix}$$

1.2 Reducir a la forma de Hessenberg superior manteniendo la estructura triangular superior de B y los valores propios generalizados del par (A,B)

$$A = AZ_{34} = \begin{bmatrix} x & x & x & x & x \\ x & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \end{bmatrix}$$

$$B = BZ_{34} = \begin{bmatrix} x & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & 0 & x & x \\ 0 & 0 & 0 & 0 & x \end{bmatrix}$$

$$B = BZ_{34} = \begin{cases} x & x & x & x \\ 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x \\ 0 & 0 & 0 & x \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{cases}$$

$$B = Q^{T}_{34}B = \begin{cases} x & x & x & x \\ 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \end{cases}$$

$$B = BZ_{45} = \begin{cases} x & x & x & x \\ 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x \\ 0 & 0 & 0 & x \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{cases}$$

## Algoritmo: Reducción a las formas Hessenberg-Triangular

```
Entradas: A \in \Re^{n \times n}, B \in \Re^{n \times n}
Salidas: A = Q^T A Z \in \Re^{n \times n}, Hessenberg superior, y B = Q^T B Z \in \Re^{n \times n}, triangular superior
Calcular Q ortogonal tal que Q^TB sea triangular superior.
B = Q^T B; \quad A = Q^T A;
Para i = 1, 2, ..., n - 2
     Para i = n, n - 1, ..., j + 2
          %% Anular los elementos de A
           [c,s] = Givens(A(i-1,j),A(i,j))
           A(i-1:i, j:n) = AplicaRotacionPorFilas(A(i-1:i, j:n), c, s)
           B(i-1:i,i-1:n) = AplicaRotacionPorFilas(B(i-1:i,i-1:n),c,s)
           %% Anular los elementos de B
           [c,s] = Givens(B(i,i-1),B(i,i));
           B(1:i,i-1:i) = AplicaRotacionPorColumnas(B(1:i,i-1:i),c,s)
           A(1:n,i-1:i) = AplicaRotacionPorColumnas(A(1:n,i-1:i),c,s)
     Finpara
Finpara
```

#### 2. Deflactar el problema, si es posible

2.1 Matriz de Hessenberg no es irreducida

y  $A - \lambda B$  se convierte en  $(A_{11} - \lambda B_{11})$  y  $(A_{22} - \lambda B_{22})$ 

2.2 Matriz triangular superior no es singular

Se puede reducir al primer caso mediante transformaciones de Givens aplicadas de forma bilateral.

#### 2.2 Deflactar el problema, si matriz triangular superior no es singular

$$A = Q^{T}_{34}A = \begin{bmatrix} \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \end{bmatrix}$$

$$B = BZ_{23} = \begin{bmatrix} \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \end{bmatrix}$$

$$A = Q^{T}_{45}A = \begin{bmatrix} x & x & x & x & x \\ x & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \end{bmatrix}$$

2.2 Deflactar el problema, si matriz triangular superior no es singular

Y el problema se ha transformado al caso ya resuelto en que la Matriz de Hessenberg no es irreducida

# 3. Reducción simultánea, mediante un proceso iterativo, de la matriz A, en forma de Hessenberg superior, y de la matriz B, en forma triangular superior, a la forma triangular superior

- En esta etapa se parte de matrices A, Hessenberg superior irreducida, y B, triangular superior.
- Idea básica:

Aplicar el algoritmo iterativo QR (un paso de Francis) a la matriz  $AB^{-1}$  (Hessenberg superior) sin llegar a formar nunca explícitamente  $AB^{-1}$ 

- Se aplica un procedimiento de tipo  $Q^TAZ \rightarrow A'$  y  $Q^TBZ \rightarrow B'$  que reduzca A y B a la forma triangular superior.
- En cada paso se verifica  $A'B'^{-1} = (Q^TAZ)(Q^TBZ)^{-1} = Q^TAZZ^TB^{-1}Q = Q^T(AB^{-1})Q$ , siendo Q la matriz con la que hay que iterar en el paso de Francis del algoritmo iterativo QR
- En lugar de calcular explícitamente la Q, se busca una matriz  $P/Pe_1=Qe_1$ , y luego se reduce la matriz  $P^T(AB^{-1})P$  a la forma de Hessenberg superior mediante transformaciones ortogonales.
- El teorema de la Q implícita garantiza que el resultado así obtenido es  $Q^T(AB^{-1})Q$
- Se puede probar que en el límite las matrices A y B tienden a la forma triangular superior.

## 3. Reducción simultánea, mediante un proceso iterativo, de la matriz A, en forma de Hessenberg superior, y de la matriz B, en forma triangular superior, a la forma triangular superior

Funcionamiento del algoritmo

Functionamiento del algoritmo
$$Sea M = AB^{-1} \in \Re^{n \times n}, \text{ y sean } a \text{ y } b \text{ los valores propios de } \begin{bmatrix} M_{n-1,n-1} & M_{n-1,n} \\ M_{n,n-1} & M_{n,n} \end{bmatrix} \qquad Sea v = (M - aI)(M - bI)e_1 = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Obsérvese que v puede calcularse en O(1) sin formar explícitamente las matrices  $M \vee (M - aI)(M - bI)$ 

Sea  $P_0$  una matriz de Householder tal que  $P_0v = ke_1$ 

Obsévese que  $(P_0A)(P_0B)^{-1} = P_0(AB^{-1})P_0^{T}$ 

# 3. Reducción simultánea, mediante un proceso iterativo, de la matriz A, en forma de Hessenberg superior, y de la matriz B, en forma triangular superior, a la forma triangular superior

• Ahora basta con restaurar las matrices A y B a la forma Hessenberg-Triangular mediante transformaciones ortogonales. Con ello que  $AB^{-1}$  tiene de nuevo la forma de Hessenberg superior:

Mediante dos transformaciones de Householder,  $Z_1$  y  $Z_2$  devolver a B la forma triangular. Las transformaciones hay que aplicarlas también a A:

Mediante una transformación de Householder,  $P_1$  devolver a la primera columna de A la forma de Hessenberg superior. La transformación hay que aplicarlas también a B:

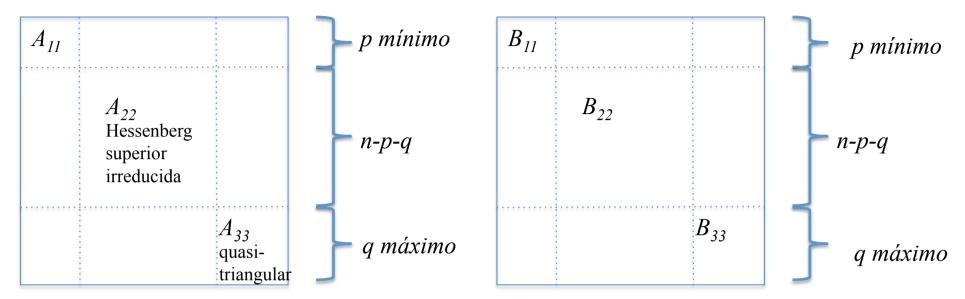
Se continua así hasta devolver a la matriz *A* la forma de Hessenberg superior y a *B* la forma triangular superior.

Algorithm 7.7.2 (The QZ Step) Given an unreduced upper Hessenberg matrix  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  and a nonsingular upper triangular matrix  $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , the following algorithm overwrites A with the upper Hessenberg matrix  $Q^TAZ$  and B with the upper triangular matrix  $Q^TBZ$  where Q and Z are orthogonal and Q has the same first column as the orthogonal similarity transformation in Algorithm 7.5.1 when it is applied to  $AB^{-1}$ 

```
Let M = AB^{-1} and compute (M - aI)(M - bI)e_1 = (x, y, z, 0, ..., 0)^T
       where a and b are the eigenvalues of M's lower 2-by-2.
for k = 1:n-2
       Find Householder Q_k so Q_k | x y z|^T = [*00]^T
       A = \operatorname{diag}(I_{k-1}, Q_k, I_{n-k-2})A
       B = \operatorname{diag}(I_{k-1}, Q_k, I_{n-k-2})B
       Find Householder Z_{k1} so
                \begin{bmatrix} b_{k+2,k} & b_{k+2,k+1} & b_{k+2,k+2} \end{bmatrix} Z_{k1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & * \end{bmatrix}.
       A = A \operatorname{diag}(I_{k-1}, Z_{k1}, I_{n-k-2})
       B = B \operatorname{diag}(I_{k-1}, Z_{k1}, I_{n-k-2})
       Find Householder Z_{k2} so
                \begin{bmatrix} b_{k+1,k} & b_{k+1,k+1} \end{bmatrix} Z_{k2} = \begin{bmatrix} 0 & * \end{bmatrix}.
       A = A \operatorname{diag}(I_{k-1}, Z_{k2}, I_{n-k-1})
       B = B \operatorname{diag}(I_{k-1}, Z_{k2}, I_{n-k-1})
       x = a_{k+1,k}; y = a_{k+1,k}
       if k < n-2
               z=a_{k+3,k}
        end
end
Find Householder Q_{n-1} so Q_{n-1} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix}
A = \operatorname{diag}(I_{n-2}, Q_{n-1})A
B = \operatorname{diag}(I_{n-2}, Q_{n-1})B
Find Householder Z_{n-1} so
        \begin{bmatrix} b_{n,n-1} & b_{nn} & | Z_{n-1} = [0 *] \end{bmatrix}
A = A \operatorname{diag}(I_{n-2}, Z_{n-1})
B = B \operatorname{diag}(I_{n-2}, Z_{n-1})
```

This algorithm requires  $22n^2$  flops. Q and Z can be accumulated for an additional  $8n^2$  flops and  $13n^2$  flops, respectively.

#### Algoritmo iterativo QZ (completo)



Calcular p mínimo y q máximo para que

 $A_{22}$  sea Hessenberg superior irreducida y  $B_{22}$  sea triangular superior

 $A_{33}$  esté en forma quasi-triangular

Mientras q < n

- 1. Aplicar un paso básico del Algoritmo Iterativo QZ a  $A_{22}$  y  $B_{22}$
- 2. Recalcular p y q