

## **Wyznaczanie wartości i wektorów własnych macierzy (problem własny)**

Plan wykładu:

1. Pojęcia podstawowe, definicje
2. Metoda Kryłowa poszukiwania pierwiastków równania charakterystycznego
3. Lokalizacja (szacowanie) wartości własnych – tw. Gerschgorina
4. Proste metody iteracyjne
  - a) Metoda potęgowa dla wartości własnej o największym module
  - b) przyśpieszanie zbieżności
  - c) redukcja macierzy metodą Hottelinga
  - d) redukcja macierzy metodą Wielandta
5. Sprowadzanie macierzy symetrycznych/hermitowskich do postaci trójdzielnej
  - a) metoda Householdera
  - b) Metoda Lanczosa
6. Sprowadzanie macierzy symetrycznych/hermitowskich do postaci macierzy Hessenberga
7. Wyznaczanie wartości i wektorów własnych macierzy trójdzielnych i macierzy Hessenberga
  - a) Metoda bisekcji
  - b) Rozkład LR i QR, rozkład QR metodą Householdera
8. Uogólniony problem własny

## Pojęcia podstawowe

Często przy tworzeniu modeli matematycznych wykorzystywanych do symulacji zjawisk fizycznych czy zachowania się układu, zachodzi potrzeba rozwiązania tzw. **problemu własnego** (np. rów. Schrodingera):

$$Ax_k = \lambda_k x_k \quad A = [a_{ij}]$$

- A jest macierzą kwadratową o  $n \times n$
- $x_k$  jest **wektorem własnym** macierzy odpowiadającym **wartości własnej**  $\lambda_k$

$$a_{ij}, \lambda_k, x_m^{(k)} \in \mathbb{C}$$

Nie zawsze układ równań, którego chcemy znaleźć rozwiązanie, przyjmuje tak prostą postać. Nierzadko mamy do czynienia z tzw. **uogólnionym problemem własnym**:

$$A \cdot x = \lambda B \cdot x$$

Jeśli macierz B jest nieosobliwa to problem uogólniony można przekształcić do postaci:

$$B^{-1}Ax = \lambda x$$

Liczbę  $\lambda$  nazywamy wartością własną macierzy jeśli istnieje taki niezerowy wektor  $x$  dla którego zachodzi:

$$Ax = \lambda x$$

Wektor  $x$  nazywamy (prawostronnym) wektorem własnym przynależnym do wartości własnej  $\lambda$ . Ciąg wszystkich wartości własnych nazywamy **widmem macierzy** A i oznaczamy: **Sp(A)**.

Z powyższej definicji wynika:

$$(A - \lambda I)x = 0$$

Macierz  $(A - \lambda I)$  jest osobliwa, więc:

$$\det(A - \lambda I) = 0$$

Wyznacznik ten jest wielomianem stopnia  $n$  zmiennej

$$\begin{aligned} \lambda: w(\lambda) &= \det(A - \lambda I) = \\ &= (-1)^n (\lambda^n + a_{n-1}\lambda^{n-1} + \dots + a_0) \end{aligned}$$

Każda wartość własna  $\lambda_k$  jest pierwiastkiem **wielomianu charakterystycznego** macierzy A.

**Def.** Wartości i wektory własne macierzy transponowanej  $A^T$  nazywamy **lewostronnymi wartościami** i **lewostronnymi wektorami własnymi** macierzy  $A$ .

Wyznacznik macierzy po jej transponowaniu nie ulega zmianie. Dlatego widmo macierzy  $A$  jest równe widmu lewostronnemu.

**Tw.** Jeżeli  $\lambda_p$  jest wartością własną macierzy, a  $\lambda_l$  jest jej lewostronną wartością własną oraz gdy

$$\lambda_p \neq \lambda_l$$

Wówczas wektor własny  $x_l$  jest ortogonalny do lewostronnego wektora własnego  $x_p$ .

$$x_l^T x_p = 0$$

$$x_l^T A x_p = \lambda_p x_l^T x_p$$

$$x_l^T A x_p = (A^T x_l)^T x_p = \lambda_l x_l^T x_p$$

$$(\lambda_l - \lambda_p) x_l^T x_p = 0 \quad (\lambda_p \neq \lambda_l)$$

Dla macierzy symetrycznej  $A=A^T$  wektory własne są zarazem wektorami lewostronnymi. Jeżeli więc wektory własne przynależą do różnych wartości własnych to są do siebie **ortogonalne**.

**Def.** Macierze  $A$  i  $B$  są podobne jeśli istnieje nieosobliwa macierz podobieństwa  $P$ , że:

$$P^{-1}AP = B$$

**Tw.** Jeżeli macierze  $A$  i  $B$  są podobne to mają identyczne widmo wartości własnych.

**Tw.** Macierz  $Q_{m \times n}$  ( $m \geq n$ ) nazywamy ortogonalną jeśli:

$$Q^T Q = I_{n \times n}$$

**Tw.** Jeżeli macierz  $Q_{n \times n}$  jest ortogonalna to:

$$Q Q^T = I_{n \times n}$$

**Tw.** Macierz symetryczna  $A$  jest ortogonalnie podobna do macierzy diagonalnej  $D$ :

$$Q^T A Q = D$$

**Tw.** Wartości własne macierzy symetrycznej są rzeczywiste.

**Def.** Macierz o elementach zespolonych i własności

$$A = (A^T)^* \Rightarrow a_{ii} \in R$$

nazywamy macierzą hermitowską. Wartości własne macierzy hermitowskiej są rzeczywiste a wektory własne są do siebie ortogonalne.

**Tw.** Dla dowolnej macierzy A istnieje macierz nieosobliwa P, która może mieć elementy zespolone i zachodzi pomiędzy nimi związek

$$P^{-1}AP = \begin{bmatrix} J_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & J_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & J_k \end{bmatrix}$$

Powyższa macierz definiuje **postać kanoniczną Jordana**

$$k = 1, 2, \dots, K \leq n$$

$J_k$  jest macierzą zdefiniowaną następująco

$$J_k = \begin{bmatrix} \lambda_i & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_i & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_i & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \lambda_i \end{bmatrix}$$

$\lambda_i$  jest wartością własną macierzy A i może wystąpić w wielu macierzach  $J_k$ .

Wyznaczniki

$$\det(J_k - \lambda I) = (\lambda_i - \lambda)^m$$

są **dzielnikami elementarnymi** macierzy A. Liczba m jest stopniem macierzy  $J_k$ . Dla m=1 macierz  $J_k$  stanowi **dzielnik liniowy**.

Jeśli wszystkie wartości własne macierzy A są różne to wszystkie dzielniki elementarne są liniowe.

**Iloczyn skalarny (wewnętrzny)**

$$\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = \mathbf{a}^T \mathbf{b} = [\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n] \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_n \end{bmatrix}$$

**Iloczyn zewnętrzny**

$$\mathbf{a} \rangle \langle \mathbf{b} = \mathbf{a} \mathbf{b}^T = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix} [\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n]$$

$$= \begin{bmatrix} \alpha_1 \beta_1 & \alpha_1 \beta_2 & \dots & \alpha_1 \beta_n \\ \alpha_2 \beta_1 & \alpha_2 \beta_2 & \dots & \alpha_2 \beta_n \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \alpha_n \beta_1 & \alpha_n \beta_2 & \dots & \alpha_n \beta_n \end{bmatrix}$$

**Tw.** (Schura) Suma kwadratów modułów wartości własnych jest ograniczona od góry przez kwadrat normy euklidesowej:

$$\sum_{i=1}^n |\lambda|^2 \leq \|A\|_E^2$$

**Tw.** Widmo macierzy ulega przesunięciu po dodaniu do niej macierzy jednostkowej pomnożonej przez liczbę:

$$Sp(A + cI) = Sp(A) + c$$

widmo:

$$Sp(A) = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots\}$$

zostaje zastąpione przez:

$$Sp(A + cI) = \{\lambda_1 + c, \lambda_2 + c, \dots\}$$

**Tw.** (Cayleya-Hamiltona)  
Jeśli

$$w(\lambda) = \det(A - \lambda I) = 0$$

jest równaniem charakterystycznym macierzy A  
to

$$w(A) = 0$$

## Metoda Kryłowa poszukiwania zer równania charakterystycznego

$$w(\lambda) = \lambda^n + \sum_{i=0}^{n-1} b_i \lambda^i = 0$$

Korzystając z tw. CH

$$w(A) = A^n + \sum_{i=0}^{n-1} b_i A^i = 0$$

Co dla dowolnego wektora  $\mathbf{y}$  daje

$$A^n \mathbf{y} + \sum_{i=0}^{n-1} b_i A^i \mathbf{y} = 0$$

układ n równań na n niewiadomych

$$b_0, b_1, b_2, \dots, b_{n-1}$$

Do jego utworzenia potrzeba jednak  $n^3$  obliczeń, oraz  $n^3/3$  aby go rozwiązać.

Uwaga:

Wyznaczenie zer wielomianu charakterystycznego może być źle uwarunkowane.

## Lokalizacja wartości własnych

**Tw.** (Gershgorina) Niech  $C_i$  oznaczają koła domknięte na płaszczyźnie zespolonej o środkach w punktach  $a_{ii}$  (elementy diagonalne macierzy  $A$ ) i promieniach równych sumie modułów elementów z danego ( $i$ -tego) wiersza:

$$C_i = \{z : |z - a_{ii}| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|\}$$

Wówczas:

$$Sp(A) \subset \bigcup_{i=1}^n C_i$$

Jeżeli kół  $C_i$  tworzy zbiór rozłączny z pozostałymi kołami, to w zbiorze tym leży dokładnie  $k$  wartości własnych macierzy  $A$ .

Wnioski:

1. Jeżeli macierz jest symetryczna i diagonalnie dominująca o nieujemnych elementach na diagonalu, to jest nieujemnie określona, a jeśli jest ona dodatkowo nieosobliwa to jest dodatnio określona. Macierz symetryczna silnie diagonalnie dominująca jest dodatnio określona wtedy i tylko wtedy gdy elementy na diagonalu są dodatnie.

2. W każdym kole rozłącznym z pozostałymi leży dokładnie jedna wartość własna.

Wartości własne macierzy  $A$  leżą na płaszczyźnie zespolonej i zawarte są w kole o środku w  $0$  i promieniu równym promieniowi spektralnemu tej macierzy. Ponieważ:

$$\rho(A) \leq \|A\|_p, \quad p = 1, 2, \infty, E$$

więc można przyjąć że:

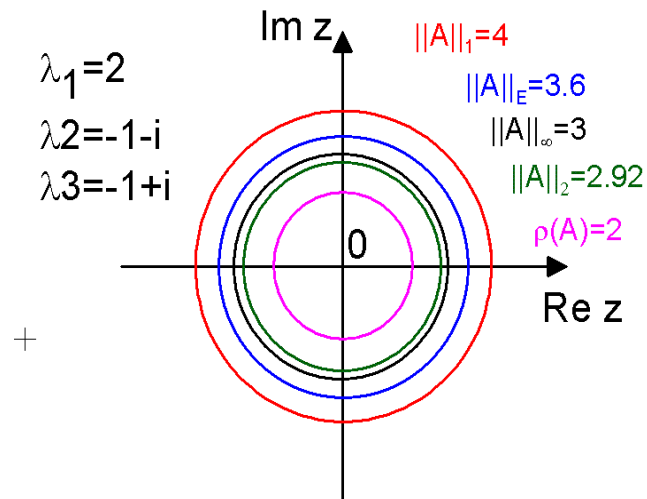
$$\lambda_i \in \{z : |z| \leq \|A\|_p\}$$

Widma wartości własnych i lewostronnych wartości własnych są identyczne. Aby otrzymać lepsze oszacowanie położenia wartości własnych można więc zastosować twierdzenie Geshgorina dla  $A^T$ . Koła zawierające wartości własne mają środki w  $a_{ii}$  i promienie równe sumie modułów pozostałych elementów w  $i$ -tych kolumnach.

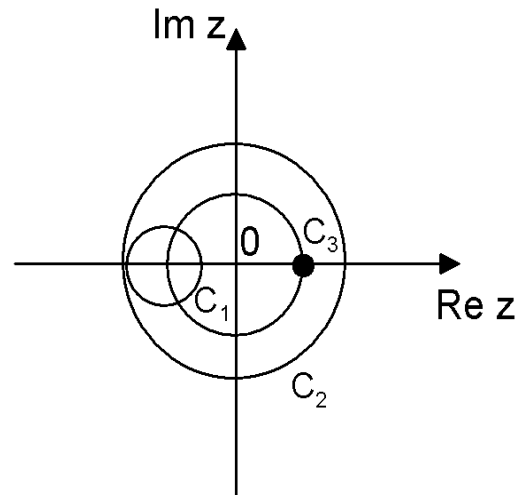
**Przykład.** Podać lokalizację wartości własnych macierzy

$$A = \begin{bmatrix} -2 & -1 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

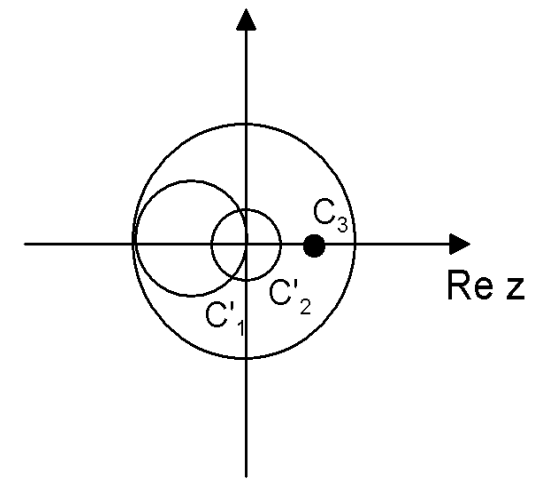
a)



b) Tw. Gershgorina



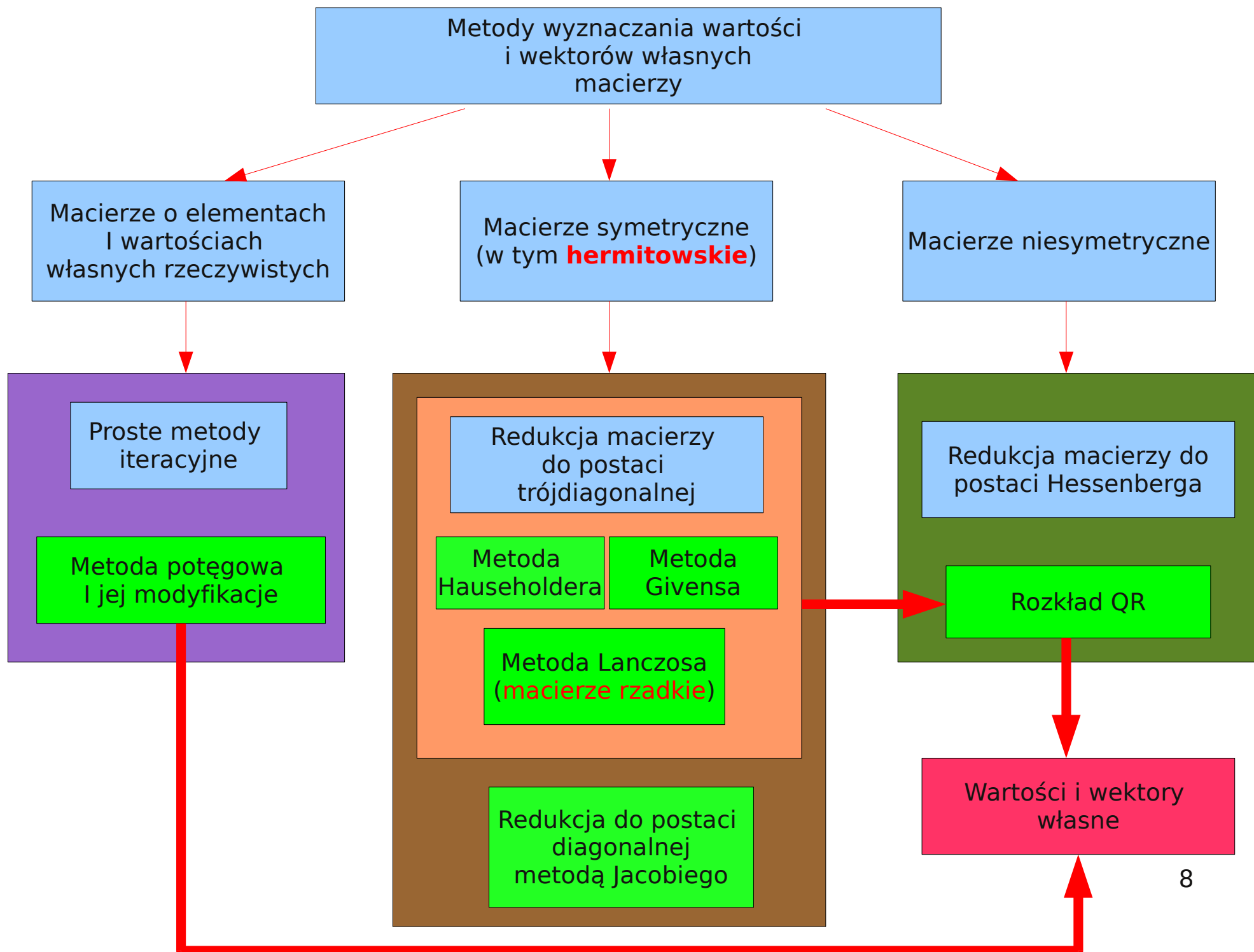
c) Tw. Gershgorina  $A^T$



a) najgorsze oszacowanie – lokalizacja w kole o promieniu 4

b) tw. Gershgorina – lokalizacja w kole o promieniu 3

c) tw. Gershgorina dla  $A^T$  – jedno z kół jest odseparowane ( $C'_3$ ) i zdegenerowane  
 znajduje się w nim dokładnie jedna wartość własna ( $\lambda=2$ ) - najlepsze oszacowanie





## Metoda potęgowa wyznaczania pojedynczych wartości własnych i wektorów własnych.

Założmy że istnieje  $n$  liniowo niezależnych wektorów własnych macierzy  $A$ , stanowią bazę przestrzeni liniowej

$$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \dots, \mathbf{x}_n$$

Wówczas dla dowolnego wektora  $\mathbf{v}_0$

$$\mathbf{v}_0 = \sum_{i=1}^n a_i \mathbf{x}_i$$

Jeśli  $\lambda_i$  stanowią wartości własne macierzy

$$A\mathbf{v}_0 = \sum_{i=1}^n a_i \lambda_i \mathbf{x}_i$$

$$\mathbf{v}_m = A^m \mathbf{v}_0 = \sum_{i=1}^n a_i \lambda_i^m \mathbf{x}_i$$

Zakładamy że wartości własne tworzą ciąg

$$|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_n|$$

Jeśli  $\lambda_1$  jest dominującą wartością własną, oraz wektor  $\mathbf{v}_0$  ma składową w kierunku  $\mathbf{x}_1$  to wówczas zachodzi

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{A^m \mathbf{v}_0}{\lambda_1^m} = a_1 \mathbf{x}_1$$

Z czego można wysnuć wniosek że wartość własną można obliczyć następująco

$$\lambda_1 = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\mathbf{y}^T \mathbf{v}_{m+1}}{\mathbf{y}^T \mathbf{v}_m}$$

Dla dowolnego wektora  $\mathbf{y}$  **nieortogonalnego** do  $\mathbf{x}_1$ . Zazwyczaj  $\mathbf{y}$  ma 1 na pozycji elementu o największym module w  $\mathbf{v}_{m+1}$  a na pozostałych 0.

Jaka jest zbieżność metody?

$$\mathbf{v}_m = \lambda_1 \left[ a_1 \mathbf{x}_1 + \sum_{i=2}^n \left( \frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^m a_i \mathbf{x}_i \right]$$

Zależy od  $(\lambda_i/\lambda_1)^m$  ale również od współczynników  $a_i$  czyli od wyboru  $\mathbf{v}_0$ . Jeśli wartość własna o największym module jest zespolona to ciąg nie jest zbieżny.

Jak wyznaczyć wektor własny  $\mathbf{x}_1$ ?

Ponieważ

$$\mathbf{v}_m \approx \lambda_1 a_1 \mathbf{x}_1$$

więc unormowany wektor własny będzie miał postać

$$\mathbf{x}_1 = \frac{\mathbf{v}_m}{|\mathbf{v}_m|}$$

Jeśli wartość własna jest pierwiastkiem wielokrotnym równania charakterystycznego to metoda jest zbieżna bo składnik z  $\lambda_1$  dominuje

$$\mathbf{v}_m = A^m \mathbf{v}_0 = \lambda_1^m \sum_{i=1}^k a_i \mathbf{x}_i + \sum_{i=k+1}^n \lambda_i^m a_i \mathbf{x}_i$$

Uwaga: problem pojawia się gdy  $\lambda_1 = -\lambda_j$  tj. identyczne moduły generują oscylacje (wtedy wybieramy ciąg wektorów  $\mathbf{v}_{2k}$ )

## Przyspieszanie zbieżności

### 1. Proces $\delta^2$

$$\mathbf{e}_j^T \mathbf{v}_m = \sum_{i=1}^n a_i \lambda_i^m \mathbf{e}_j^T \mathbf{x}_i = \sum_{i=1}^n b_i \lambda_i^m$$

$$\frac{\mathbf{e}_j^T \mathbf{v}_{m+1}}{\mathbf{e}_j^T \mathbf{v}_m} = \frac{b_1 \lambda_1^{m+1} + \sum_{i=2}^n b_i \lambda_i^{m+1}}{b_1 \lambda_1^m + \sum_{i=2}^n b_i \lambda_i^m}$$

Po podzieleniu licznika i mianownika przez  $b_1 \lambda_1^m$  a następnie rozwinięciu M w szereg potęgowy dostajemy

$$\frac{\mathbf{e}_j^T \mathbf{v}_{m+1}}{\mathbf{e}_j^T \mathbf{v}_m} = \lambda_1 + \beta_2 \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^m + \beta_3 \left( \frac{\lambda_3}{\lambda_1} \right)^m + \dots$$

Co dla dużych m można przybliżyć

$$\lambda_1 \approx R_m - \beta_2 r^m$$

$$R_m = \frac{\mathbf{e}_j^T \mathbf{v}_{m+1}}{\mathbf{e}_j^T \mathbf{v}_m} \quad r = \frac{\lambda_2}{\lambda_1}$$

Wykorzystując różnice progresywne 1 i 2 rzędu można znaleźć lepsze przybliżenie

$$\lambda_1 \approx R_{m+2} - \frac{(\Delta R_{m+1})^2}{\Delta^2 R_m}$$

### 2. Iloraz Rayleigha

Jeśli macierz jest symetryczna to jej wektory własne są ortogonalne. Załóżmy że są również ortonormalne

$$\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j = \delta_{ij}$$

Wtedy

$$\mathbf{v}_m^T A \mathbf{v}_m = \mathbf{v}_m^T \mathbf{v}_{m+1} = \sum_{i=1}^n a_i^2 \lambda_i^{2m+1}$$

Oraz

$$\mathbf{v}_m^T \mathbf{v}_m = \sum_{i=1}^n a_i^2 \lambda_i^{2m}$$

co daje lepszą zbieżność niż wariant podstawowy metody

$$\frac{\mathbf{v}_m^T \mathbf{v}_{m+1}}{\mathbf{v}_m^T \mathbf{v}_m} = \lambda_1 + O \left[ \left( \frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^{2m} \right] \quad 10$$

## Wyznaczanie pozostałych wartości własnych

### a) metoda redukcji wektora

Jeśli znamy wartość własną o największym module to możemy wykorzystać ten fakt przy wyznaczaniu kolejnej największej co do modułu wartości własnej tj.  $\lambda_2$

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_m &= \mathbf{v}_{m+1} - \lambda_1 \mathbf{v}_m \\ &= \sum_{i=2}^n a_i (\lambda_i - \lambda_1) \lambda_i^m \mathbf{x}_i \end{aligned}$$

Ponieważ wektory  $\mathbf{v}_{m+1}$  oraz  $\lambda_1 \mathbf{v}_m$  są bliskie więc metoda może być w pewnych przypadkach nieużyteczna.

### b) metoda zerowania składowej

Znając  $\lambda_1$  możemy zdefiniować wektor

$$\mathbf{w}_0 = (A - \lambda_1 I) \mathbf{v}_0$$

Czyli z  $\mathbf{v}_0$  usuwamy składową w kierunku  $\mathbf{x}_1$ .

Wektor  $\mathbf{w}_0$  nie ma składowej w kierunku  $\mathbf{x}_1$  więc ciąg  $\mathbf{w}_m$  powinien być zbieżny do  $\lambda_2$  oraz  $\mathbf{x}_2$ . Ze względu na błędy zaokrągleń jednak usuwa się co pewną ilość iteracji składową  $\mathbf{x}_1$  tj.

$$\mathbf{z}_m = (A - \lambda_1 I) \mathbf{w}_m$$

Aby wyznaczyć kolejne wartości własne korzystamy z wektora

$$\mathbf{w}_0 = (A - \lambda_1 I)(A - \lambda_2 I) \mathbf{v}_0$$

Taki proces staje się mało wydajny dla kolejnych wartości własnych.

Uwaga:

Metoda redukcji składowej jest odpowiednikiem **metody metody czasu urojonego z ortogonalizacją Schmidta** stosowaną w mechanice kwantowej do rozwiązywania równ. Schrodingera.

Zaletami są: prostota oraz fakt że nie trzeba pamiętać postaci macierzy (elementy mogą być wyznaczane na bieżąco).

## Redukcja macierzy

**Tw.** Jeśli  $\lambda_1$  jest wartością własną macierzy  $A$  i  $x_1$  odpowiadającym jej wektorem własnym oraz dla dowolnego wektora  $v$  o własności

$$v^T x_1 = 1$$

Macierz zredukowana

$$W_1 = A - \lambda_1 x_1 v^T$$

Ma te same wartości co macierz  $A$  oprócz  $\lambda_1$  która jest zerem.

Pełny dowód - A. Ralston „Wstęp do analizy...”

Zakładamy  $x_1^{(1)} = 1$

Definiujemy wektor  $u$

$$u = x_1 - e_1$$

( $e_i$  - i -ty wersor w n-wymiarowej przestrzeni kartezjańskiej, lub i-ta kolumna macierzy jednostkowej)  
oraz macierz  $T$

$$T = I + u e_1^T$$

$$T T^{-1} = I \Rightarrow T^{-1} = I - u e_1^T$$

Przy pomocy  $T$  konstruujemy macierz podobną do  $A$

$$C = T^{-1} A T$$

pierwsza kolumna  $C$  jest równa ( $C_{10}$  - pierwszy wiersz macierzy  $C$ )

$$C_{01} = \lambda_1 e_1$$

Ponadto definiujemy macierz  $D$

$$D = T^{-1} x_1 v^T T$$

w której wiersze od 2 do  $n$  są równe 0, natomiast wiersz pierwszy ma postać

$$D_{10} = v^T + (1 - v^{(1)}) e_1^T$$

Wobec powyższego można rozpatrywać macierz

$$C - \lambda_1 D = T^{-1} (A - \lambda_1 x_1 v^T) T = T^{-1} W_1 T$$

która ma te same wartości własne co  $A$  za wyjątkiem  $\lambda_1$  która jest równa 0.

Związek wektorów własnych macierzy  $W$  i  $A$

$$\mathbf{x}_i = \mathbf{w}_i$$

$$\lambda_i = \lambda_1, \quad (A - \lambda_1 I)\mathbf{w}_i = 0$$

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_i &= (\lambda_i - \lambda_1)\mathbf{w}_i + \lambda_1(\mathbf{v}^T \mathbf{w}_i)\mathbf{x}_1 \\ \lambda_i &\neq \lambda_1\end{aligned}$$

Algorytm wykorzystujący redukcję macierzy

1. wyznaczamy metodą potęgową  $\lambda_1$  oraz  $\mathbf{x}_1$
2. konstruujemy macierz  $W_1$  i znajdujemy  $\lambda_2$  oraz  $\mathbf{w}_2$
3. konstruujemy macierz

$$W_2 = W_1 - \lambda_2 \mathbf{w}_2 \mathbf{v}_1^T$$

$$\mathbf{v}_1^T \mathbf{w}_2 = 1$$

i szukamy  $\lambda_3$  oraz  $\mathbf{w}_3$

Uwaga:  
jeśli wartość własna jest k-krotna to zastosowanie powyższej procedury k-krotnie da tę samą wartość własną oraz k różnych wektorów.

## Metoda redukcji Hotellinga

Za wektor  $\mathbf{v}$  przyjmujemy lewy wektor własny przynależny do wartości własnej  $\lambda_1$ . Ale na ogół nie znamy lewych wektorów.

Metoda jest więc skuteczna tylko w przypadku macierzy symetrycznych, wtedy lewe wektory są identyczne z prawymi

$$\mathbf{v} = \mathbf{x}_1$$

$$W_1 = A - \lambda_1 \mathbf{x}_1 \mathbf{x}_1^T$$

lub rekurencyjnie

$$W_0 = A$$

$$W_i = W_{i-1} - \lambda_1 \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^T$$

$$i = 1, 2, \dots, n - 1$$

## Metoda redukcji Wielandta

Wektor  $\mathbf{v}$  definiujemy następująco

$$\mathbf{v}^T = \frac{A_{j0}}{\lambda_1 x_1^{(j)}}$$

Gdzie:  $x_1^{(j)}$  jest j-tą składową wektora  $\mathbf{x}_1$ ,  
 $A_{j0}$  jest j-tym wierszem macierzy  $A$

$$\mathbf{v}^T \mathbf{x}_1 = \frac{A_{j0} \mathbf{x}_1}{\lambda_1 x_1^{(j)}} = \frac{\lambda_1 x_1^{(j)}}{\lambda_1 x_1^{(j)}} = 1$$

$$W_1 = A - \lambda_1 \mathbf{x}_1 \mathbf{v}^T = A - \frac{\mathbf{x}_1 A_{j0}}{x_1^{(j)}}$$

Z powyższego wzoru wynika że j-ty wiersz macierzy  $W_1$  jest równy

$$(W_1)_{j0} = A_{j0} - \frac{x_1^{(j)} A_{j0}}{x_1^{(j)}} = 0$$

Wnioski:

- a) wektory własne odpowiadające niezerowym wartościom własnym mają zerową j-tą składową
- b) wartości własne  $W_1$  można obliczać (**metodą potęgową**) skreślając uprzednio j-ty wiersz i j-tą kolumnę, powstała macierz jest stopnia  $n-1$
- c) wartość  $j$  dobieramy tak by odpowiadała pozycji elementu o największym module w  $\mathbf{x}_1$
- d) w każdym kolejnym kroku metody mamy do czynienia z macierzami coraz niższego stopnia

## Redukcja macierzy gęstej do prostszej postaci - macierzy trójdzielnej lub Hessenberga

Macierz pierwotną przekształcamy iteracyjnie

$$A = A_0 \rightarrow A_1 \rightarrow A_2 \rightarrow \dots \rightarrow A_m$$

$$A_i = P_i^{-1} A_{i-1} P_i, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

tak aby końcowa macierz B była macierzą podobną do  $A_0$

$$B = A_m = P^{-1} A P$$

$$P = P_1 P_2 \dots P_m$$

a następnie w łatwy sposób wyznaczamy wartości i wektory własne macierzy B

$$B\mathbf{y} = \lambda\mathbf{y}$$

$$\mathbf{x} = P\mathbf{y} = P_1 \dots P_m \mathbf{y}$$

$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

Uwagi:

a) nakład obliczeń potrzebnych do wyznaczenia  $\mathbf{x}_i$  oraz  $\lambda_i$  macierzy B powinien być jak najmniejszy

b) algorytm numerycznego rozwiązania problemu własnego macierzy B nie może być gorzej uwarunkowany niż dla A

$$B = P^{-1} A P$$

$$B + \Delta B = P^{-1} (A + \Delta A) P$$

$$\Delta A = P \Delta B P^{-1}$$

$$|B| \leq |P^{-1}| \cdot |A| \cdot |P| = \text{cond}(P) |A|$$

$$|\Delta A| \leq \text{cond}(P) |\Delta B|$$

$$\frac{|\Delta A|}{|A|} \leq (\text{cond}(P))^2 \frac{|\Delta B|}{|B|}$$

Dla  $\text{cond}(P) \gg 1$

problem własny B będzie gorzej uwarunkowany niż dla A. Ale ponieważ

$$\begin{aligned} \text{cond}(P) &= \text{cond}(P_1 \dots P_m) \\ &\leq \text{cond}(P_1) \dots \text{cond}(P_m) \quad 15 \end{aligned}$$

więc **uwarunkowanie algorytmu zależy od postaci**  $P_i$

## Redukcja macierzy hermitowskiej do postaci trójdzielnej metodą Householdera

Pierwotna macierz hermitowska

$$A^H = A = A_0 \quad A^H = (A^T)^*$$

Transformujemy

$$A_i = P_i^{-1} A_{i-1} P_i$$

Przy pomocy **macierzy Householdera**

$$P_i = P_i^H = P_i^{-1} = I - \beta_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^H$$

Dokonujemy transformacji  $A_{i-1}$  do  $A_i$ .  $A_{i-1}$  ma postać

$$\begin{aligned} A_{i-1} &= \left[ \begin{array}{c|c|c} J_{i-1} & \mathbf{c} & 0 \\ \hline \mathbf{c}^H & \delta & \mathbf{a}_i^H \\ \hline 0 & \mathbf{a}_i & \tilde{A}_{i-1} \end{array} \right] \\ &= [\alpha_{jk}] \end{aligned}$$

$$\left[ \begin{array}{c|c} J_{i-1} & \mathbf{c} \\ \hline \mathbf{c}^H & \delta_i \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{cccccc|c} \delta_1 & \bar{\gamma}_2 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 \\ \gamma_2 & \ddots & \ddots & & & \cdot & \cdot \\ \cdot & \ddots & \ddots & \ddots & & \cdot & \cdot \\ \cdot & & \ddots & \ddots & \ddots & \cdot & \cdot \\ \cdot & & & \ddots & \ddots & \bar{\gamma}_{i-1} & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \gamma_{i-1} & \delta_{i-1} & \bar{\gamma}_i \\ \hline 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \gamma_i & \delta_i \end{array} \right]$$

$$\mathbf{a}_i = \begin{bmatrix} \alpha_{i+1,i} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \alpha_{ni} \end{bmatrix}$$

Zauważmy że w kolejnym kroku należy dokonać transformacji

- (n-i) elementowego wektora  $\mathbf{a}_i$
- macierzy kwadratowej

$$\tilde{A}_{i-1}$$

stopnia (n-i)



Trzeba utworzyć macierz Householdera stopnia (n-i)

$$\tilde{P}_i$$

taką aby transformowała wektor  $\mathbf{a}_i$

$$\tilde{P}_i \mathbf{a}_i = k \cdot \mathbf{e}_1$$

Macierz Householdera konstruujemy następująco

$$\tilde{P}_i = I - \beta \mathbf{u} \mathbf{u}^H$$

$$\beta = \begin{cases} \frac{1}{\sigma(\sigma + |\alpha_{i+1,i}|)} & \sigma \neq 0 \\ 0 & \sigma = 0 \end{cases}$$

$$\sigma = \|\mathbf{a}_i\|_2 = \sqrt{\sum_{j=i+1}^n |\alpha_{ji}|^2}$$

$$k = -\sigma e^{i\varphi} \iff \alpha_{i+1,i} = e^{i\varphi} |\alpha_{i+1,i}|$$

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} e^{i\varphi}(\sigma + |\alpha_{i+1,i}|) \\ \alpha_{i+2,i} \\ \vdots \\ \alpha_{n,i} \end{bmatrix}$$

$$P_i = \left[ \begin{array}{c|c|c} I & 0 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \tilde{P}_i \end{array} \right] \} i-1$$

Dokonujemy transformacji

$$\begin{aligned} P_i^{-1} A_{i-1} P_i &= P_i A_{i-1} P_i = \\ &= \left[ \begin{array}{c|c|c} J_{i-1} & \mathbf{c} & 0 \\ \hline \mathbf{c}^H & \delta_i & \mathbf{a}_i^H \tilde{P}_i \\ \hline 0 & \tilde{P}_i \mathbf{a}_i & \tilde{P}_i \tilde{A}_{i-1} \tilde{P}_i \end{array} \right] \\ &= \left[ \begin{array}{cccc|c|c} \delta_1 & \bar{\gamma}_2 & & 0 & 0 & \\ \gamma_2 & \ddots & \ddots & & \vdots & 0 \\ & \ddots & \ddots & \bar{\gamma}_{i-1} & 0 & \\ 0 & & \gamma_{i-1} & \delta_{i-1} & \bar{\gamma}_i & \\ \hline 0 & \dots & 0 & \gamma_i & \delta_i & \tilde{\gamma}_{i+1} 0 \dots 0 \\ \hline & & & & \gamma_{i+1} & \\ & & & & 0 & \\ & & & & \vdots & \tilde{P}_i \tilde{A}_{i-1} \tilde{P}_i \\ & & & & 0 & \end{array} \right] \end{aligned}$$

$$\gamma_{i+1} = k$$

Jak dokonać efektywnego mnożenia macierzy (zwykle jest nieekonomiczne)?

$$\tilde{P}_i = I - \beta \mathbf{u} \mathbf{u}^H$$

$$\begin{aligned} \tilde{P}_i \tilde{A}_{i-1} \tilde{P}_i &= (I - \beta \mathbf{u} \mathbf{u}^H) \tilde{A}_{i-1} (I - \beta \mathbf{u} \mathbf{u}^H) \\ &= \tilde{A}_{i-1} - \beta \tilde{A}_{i-1} \mathbf{u} \mathbf{u}^H - \beta \mathbf{u} \mathbf{u}^H \tilde{A}_{i-1} \\ &\quad + \beta^2 \mathbf{u} \mathbf{u}^H \tilde{A}_{i-1} \mathbf{u} \mathbf{u}^H \end{aligned}$$

Definiujemy dwa wektory pomocnicze

$$\mathbf{p} = \beta \tilde{A}_{i-1} \mathbf{u}$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{p} - \frac{\beta}{2} (\mathbf{p}^H \mathbf{u}) \mathbf{u}$$

ponieważ

$$\beta \geq 0$$

oraz z faktu, że  $A_{i-1}$  jest hermitowska wynika

$$\mathbf{p}^H \mathbf{u} = \beta \mathbf{u}^H \tilde{A}_{i-1} \mathbf{u} = (\mathbf{p}^H \mathbf{u})^H$$

$$\begin{aligned} \tilde{P}_i \tilde{A}_{i-1} \tilde{P}_i &= \tilde{A}_{i-1} - \mathbf{p} \mathbf{u}^H - \mathbf{u} \mathbf{p}^H + \beta \mathbf{u} \mathbf{p}^H \mathbf{u} \mathbf{u}^H \\ &= \tilde{A}_{i-1} - \mathbf{u} \left( \mathbf{p} - \frac{\beta}{2} (\mathbf{p}^H \mathbf{u}) \mathbf{u} \right)^H \\ &\quad - \left( \mathbf{p} - \frac{\beta}{2} (\mathbf{p}^H \mathbf{u}) \mathbf{u} \right) \mathbf{u}^H \\ &= \tilde{A}_{i-1} - \mathbf{u} \mathbf{q}^H - \mathbf{q} \mathbf{u}^H \end{aligned}$$

Przeprowadzając proces przekształcania macierzy do końca dostaniemy macierz B

$$B = A_{n-2} = \begin{bmatrix} \delta_1 & \tilde{\gamma}_2 & \cdots & 0 \\ \gamma_2 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \tilde{\gamma}_n \\ 0 & \cdots & \gamma_n & \delta_n \end{bmatrix}$$

Metoda Householdera jest stabilna numerycznie.

## Redukcja macierzy (rzadkiej) hermitowskiej do postaci trójdzielnej metodą Lanczosa

Naszym zadaniem jest znalezienie wartości i wektorów własnych macierzy stopnia  $n$

$$\begin{aligned}\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n &\in R \\ \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n &\in C^n\end{aligned}$$

Jeśli jednak  $n$  jest bardzo duże (np. rzędu  $\sim 10^5$ ) a nas interesuje jedynie mały wycinek widma wartości (wektorów) własnych (np.  $m=50$ ) to wtedy należy zredukować macierz do postaci trójdzielnej stopnia  $m$ .

W metodzie Lanczosa wykorzystujemy do tego celu **podprzestrzeń Kryłowa**

$$\begin{aligned}\mathbf{q} &\in C^n \\ K_m(\mathbf{q}, A) &= \text{span}[\mathbf{q}, A\mathbf{q}, \dots, A^{m-1}\mathbf{q}] \\ m &\geq 1 \\ K_0(\mathbf{q}, A) &= \{\mathbf{0}\} \\ \dim K_m &= m\end{aligned}$$

Zakładamy że wektory rozpinające podprzestrzeń

$$K_m = \text{span}[\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_m]$$

są **ortonormalne**

$$\mathbf{q}_i^H \mathbf{q}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

Metoda Lanczosa jest metodą iteracyjną – w każdej iteracji poszukujemy nowego wektora bazowego (wymiar podprzestrzeni zwiększa się o 1)

Sposób postępowania.

Wybieramy dowolny wektor startowy

$$\mathbf{q}_1 \in C^n, \quad \mathbf{q}_1 \neq \mathbf{0}$$

zakładamy także  $\gamma_1 \mathbf{q}_0 = \mathbf{0}$

a następnie wykonujemy rekurencyjnie ciąg obliczeń

$$A\mathbf{q}_i = \gamma_i \mathbf{q}_{i-1} + \delta_i \mathbf{q}_i + \gamma_{i+1} \mathbf{q}_{i+1} \quad i \geq 1$$

$$\delta_i = \mathbf{q}_i^H A \mathbf{q}_i$$

$$\gamma_{i+1} = \|\mathbf{r}_i\| \quad \mathbf{r}_i = A\mathbf{q}_i - \delta_i \mathbf{q}_i - \gamma_i \mathbf{q}_{i-1}$$

$$\mathbf{q}_{i+1} = \frac{\mathbf{r}_i}{\gamma_{i+1}} \Leftrightarrow \gamma_{i+1} \neq 0$$

$$\delta_i, \gamma_i \in R$$

Procedura zatrzyma się gdy

$$\gamma_{i+1} = 0$$

Wówczas wymiar wygenerowanej podprzestrzeni

$$m = \max_i \dim K_i(\mathbf{q}, A)$$

Schemat rekurencyjny można zapisać macierzowo

$$Q_i = [\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_i] \quad Q_i^H Q_i = I$$

$$J_i = \begin{bmatrix} \delta_1 & \gamma_2 & & 0 \\ \gamma_2 & \delta_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \gamma_i \\ 0 & & \gamma_i & \delta_i \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} A Q_i &= Q_i J_i + [0, \dots, 0, \gamma_{i+1} \mathbf{q}_{i+1}] \\ &= Q_i J_i + \gamma_{i+1} \mathbf{q}_{i+1} \mathbf{e}_i^T \\ i &= 1, 2, \dots, m \end{aligned}$$

$$\mathbf{e}_i = [0, 0, \dots, 1]^T \in R^i$$

Gdy warunek

$$\gamma_{i+1} = 0$$

jest spełniony wówczas zachodzi

$$A Q_m = Q_m J_m$$

Wartości własne  $J_m$  są wartościami własnymi  $A$

$$J_m \mathbf{z} = \lambda \mathbf{z}, \quad \mathbf{z} \neq \mathbf{0}$$

$$\mathbf{x} = Q_m \mathbf{z} \neq \mathbf{0}$$

$$A \mathbf{x} = A Q_m \mathbf{z} = Q_m J_m \mathbf{z} = \lambda Q_m \mathbf{z} = \lambda \mathbf{x}$$

W skrajnym przypadku metoda nie zatrzyma się sama i wówczas

$$m = n$$

Macierz  $Q_n$  jest macierzą unitarną, a macierz  $J_n$  jest macierzą trójdagonalną podobną do  $A$ .

**Uwagi praktyczne:**

1) można zredukować liczbę operacji wprowadzając wektor pomocniczy

$$\mathbf{u}_i = A \mathbf{q}_i - \gamma_i \mathbf{q}_{i-1}$$

wtedy

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{u}_i - \delta_i \mathbf{q}_i$$

$$\delta_i = \mathbf{q}_i^H A \mathbf{q}_i = \mathbf{q}_i^H \mathbf{u}_i$$

ponieważ

$$\mathbf{q}_i^H \mathbf{q}_{i-1} = 0$$

2. Jeśli nie interesują nas wektory własne A to można nie przechowywać wektorów  $\mathbf{q}_i$

W każdej iteracji ( $i \rightarrow i+1$ ) procedura wymaga obliczenia 5 iloczynów skalarnych oraz 1 przemnożenia wektora przez macierz A.

3. Jeśli interesuje nas jedynie

$$m \ll n$$

Wartości (wektorów) własnych macierzy A to wówczas nie czekamy aż  $\gamma_{i+1}=0$  ale przerywamy procedurę wcześniej. Wykorzystujemy tu fakt, że zbieżność metody dla skrajnych wartości własnych jest bardzo szybka.

4. Ze względu na błędy zaokrągleń wektory rozpinające podprzestrzeń Kryłowa przestają być ortogonalne (gdy rośnie wymiar podprzestrzeni). Konieczne staje się przeprowadzenie tzw. **reortogonalizacji** nowego wektora bazy

$$\tilde{\mathbf{q}}_{i+1}$$

do już wyznaczonych

$$\mathbf{q}_{i+1} = \tilde{\mathbf{q}}_{i+1} - \sum_{j=1}^i (\mathbf{q}_j^H \tilde{\mathbf{q}}_{i+1}) \mathbf{q}_j$$

Przeprowadzenie reortogonalizacji jest kosztowne.

## Redukcja macierzy do postaci macierzy Hessenberga (górnej) metodą eliminacji Gaussa

Naszym zadaniem jest przekształcenie w sposób rekurencyjny macierzy A

$$A = A_0 \rightarrow A_1 \rightarrow \dots \rightarrow A_{n-2} = B_H$$

$$A_i = P_i^{-1} A_{i-1} P_i$$

do postaci Hessenberga

$$B_H = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \end{bmatrix} = T + U$$

T - macierz trójdzielna

U - macierz trójkątna górna

Uwagi:

- 1) każda macierz kwadratowa jest ortogonalnie podobna do macierzy Hessenberga
- 2) ponieważ macierz A jest przekształcana przez podobieństwo więc przekształcenie macierzy **hermitowskiej** do postaci Hessenberga prowadzi do uzyskania macierzy trójdzielnej ze względu na symetrię A. Macierz trójdzielna jest hermitowska.

W każdej iteracji macierz przekształcenia  $P_i$  konstruujemy z dwóch macierzy:

a) macierzy permutacji

$$\pi_{rs} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & & & 0 \\ & \ddots & & & & & & & \\ & & 1 & & & & & & \\ & & & 0 & & & 1 & & \\ & & & & 1 & & & & \\ & & & & & \ddots & & & \\ & & & & & & 1 & & \\ & & & & & & & 0 & \\ & & & & & & & & 1 \\ & & & & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & & & & 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ \\ \\ \leftarrow r \\ \\ \\ \\ \leftarrow s \\ \\ \\ \end{matrix}$$

macierz do niej odwrotna

$$\pi_{rs}^{-1} = \pi_{rs}$$

b) macierzy eliminacji

$$G_j = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & l_{j+1,j} & 1 & \\ & & \vdots & & \ddots \\ & & l_{nj} & & & 1 \end{bmatrix}$$

z warunkiem  $l_{ij} \leq 1$

Macierz odwrotna  $G_j^{-1}$

$$G_j^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & -l_{j+1,j} & 1 & \\ & & \vdots & & \ddots \\ & & -l_{nj} & & & 1 \end{bmatrix}$$

Jakie są skutki mnożenia macierzy  $G_j$  oraz  $\pi_{rs}$  z  $A$ ?

1.  $\pi_{rs}^{-1} A$  - zamienia wiersze  $r$  i  $s$  w  $A$
2.  $A\pi_{rs}$  - zamienia kolumny  $r$  i  $s$  w  $A$
2.  $G_j^{-1} A$  - odejmuje wiersz  $j$ -ty przemnożony przez  $l_{rj}$  od wiersza  $r$  w  $A$
3.  $AG_j$  - przemnaża kolumnę  $r$ -tą przez  $l_{rj}$  a następnie dodaje do kolumny  $j$ -tej w  $A$

Założmy, że w macierzy  $A_{i-1}$  (i-1) pierwszych kolumn posiada postać Hessenberga

$$A_{i-1} = \left[ \begin{array}{cccccc|c|cccc} * & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & * & * & \cdot & \cdot & \cdot & * \\ * & \cdot & & & & \cdot & \cdot & & & \cdot & \\ & \cdot & \cdot & & & \cdot & \cdot & & & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot & & \cdot & \cdot & & & \cdot & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & & & \cdot & \\ 0 & & & * & * & * & \cdot & \cdot & \cdot & * & \\ \hline 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & * & * & \cdot & \cdot & \cdot & * \\ \hline & & & & & & \cdot & & & \cdot & \\ & & & & & & \cdot & & & \cdot & \\ & & & & & & \cdot & & & \cdot & \\ 0 & & & & & & * & \cdot & \cdot & \cdot & * \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c|c|c} B_{i-1} & \mathbf{d} & \hat{A}_{i-1} \\ \hline \mathbf{c} & \delta_i & \mathbf{b} \\ \hline 0 & \mathbf{a} & \tilde{A}_{i-1} \end{array} \right] \quad \mathbf{a} = \left[ \begin{array}{c} \alpha_{i+1,i} \\ \vdots \\ \alpha_{ni} \end{array} \right]$$



Dokonujemy przekształcenia

$$A_i = P_i^{-1} A_{i-1} P_i$$

macierz przekształcenia jest zdefiniowana w poniższy sposób

$$P_i = \pi_{r,i+1} G_{i+1}$$

$$P_i^{-1} = G_{i+1}^{-1} \pi_{r,i+1}^{-1}$$

$$r \geq i + 1$$

Macierz przekształcenia  $P_i$  nie zmienia postaci Hessenberga w  $(i-1)$  pierwszych kolumnach. Zmienia natomiast kolumnę  $i$ -tą tj. zeruje elementy w tej kolumnie od  $i+2$  do  $n$ .

$$P_i^{-1} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{d} \\ \delta_i \\ \mathbf{a} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{d} \\ \delta_i \\ \bar{\mathbf{a}} \end{bmatrix}$$

$$\bar{\mathbf{a}} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Aby określić które wiersze należy zamienić wierszami, najpierw trzeba określić element o największym module w  $\mathbf{a}$

$$|\alpha_{ri}| = \max_{i+1 \leq j \leq n} |\alpha_{ji}|, \quad r \geq i + 1$$

Po wyznaczeniu wartości  $r$  zamieniamy miejscami wiersze ( $r \leftrightarrow i+1$ ) oraz kolumny ( $r \leftrightarrow i+1$ ) w  $A_{i-1}$

$$A' = \pi_{r,i+1}^{-1} A_{i-1} \pi_{r,i+1} = [\alpha'_{jk}]$$

Dzięki temu element o największym module w wektorze  $\mathbf{a}$  znajduje się teraz na jego pierwszym miejscu.

Jak określić  $G_{j+1}$ ?

Warunek: trzeba wyzerować wszystkie elementy w  $\mathbf{a}$  poza jego pierwszym elementem

$$l_{j,i+1} = \begin{cases} \frac{\alpha'_{ji}}{\alpha'_{i+1,i}} & \alpha_{i+1,i} \neq 0 \\ 0 & \alpha_{i+1,i} = 0 \end{cases}$$

$$j = i + 2, i + 3, \dots, n$$

Przeprowadzając drugi etap przekształcenia

$$A_i = G_{i+1}^{-1} A' G_{i+1} = P_i^{-1} A_{i-1} P_i$$

Dostajemy macierz Hessenberga w  $i$  kolumnach macierzy  $A_i$ .

Uwagi:

- 1) Po  $n-2$  iteracjach macierz  $A$  zostaje przekształcona do postaci Hessenberga (górnej).
- 2) Metoda eliminacji Gaussa jest stabilna numerycznie i wymaga wykonania

$$M = \frac{2}{3}n^3 + O(n^2)$$

operacji mnożenia

- 3) Redukcję macierzy do postaci Hessenberga można przeprowadzić także przy użyciu metody Householdera lub Givensa  
W metodzie Givensa trzeba wykonać

$$M = \frac{10}{3}n^3 + O(n^2)$$

a w metodzie Householdera

$$M = \frac{5}{3}n^3 + O(n^2)$$

operacji mnożenia

Ze względu na błędy numeryczne, w obu metodach macierz Hessenberga jest macierzą podobną do  $A+E$

$$\|E_{Givens}\| \leq k_1 \varepsilon n^{3/2} \|A\|, \quad k_1 \sim 1$$

$$\|E_{Householder}\| \leq k_2 \varepsilon n^2 \|A\|, \quad k_2 \sim 1$$

## Wyznaczanie wartości własnych macierzy

### Wyznaczanie wartości własnych macierzy trójdzielnej hermitowskiej metodą bisekcji

Po zredukowaniu macierzy A do postaci

$$J = \begin{bmatrix} \delta_1 & \bar{\gamma}_2 & & 0 \\ \gamma_2 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \bar{\gamma}_n \\ 0 & & \gamma_n & \delta_n \end{bmatrix}$$

chcemy znaleźć sposób na wyznaczenie wartości własnych J.

Jeśli warunek

$$\gamma_i \neq 0, \quad i = 2, \dots, n$$

to macierz jest **nieredukowalna**.

W przeciwnym wypadku można ją zapisać w postaci

$$J = \begin{bmatrix} J_1 & & & 0 \\ & J_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & J_k \end{bmatrix}$$

Macierze  $J_i, \quad k = 1, \dots, k$

są nieredukowalne. Ponadto widmo wartości własnych J pokrywa się z widmem macierzy nieredukowalnych  $J_i$ , można więc badać je osobno.

Szukamy wielomianu charakterystycznego  $J_i$ :  $W(\lambda)$  rozwijając wyznacznik względem kolejnych kolumn macierzy

$$\omega_i(\lambda) = \det(J_i - \lambda I)$$

$$\omega_0(\lambda) = 1$$

$$\omega_1(\lambda) = \delta_1 - \lambda$$

$$\dots \quad \dots \quad \dots$$

$$\omega_i(\lambda) = (\delta_i - \lambda)\omega_{i-1}(\lambda) - |\gamma_i|^2\omega_{i-2}(\lambda)$$

$$i = 2, 3, \dots, n$$

$$W(\lambda) = \omega_n(\lambda)$$

Macierz jest hermitowska więc

$$\delta_i, |\gamma_i|^2 \in R$$

Do znalezienia wartości własnych można wykorzystać metodę bisekcji.

Sposób postępowania:

- 1) wybieramy dowolną liczbę  $\lambda$  i obliczamy wartość wielomianu charakterystycznego rekurencyjnie
- 2) następnie korzystamy z poniższych twierdzeń:

**Tw.** Jeżeli elementy  $\gamma_2, \gamma_3, \dots, \gamma_n$  (pozadiagonalne) są niezerowe, to wartości własne macierzy  $J$  są pojedyncze.

**Tw.** Jeżeli elementy  $\gamma_2, \gamma_3, \dots, \gamma_n$  (pozadiagonalne) są niezerowe, to ciąg wartości  $\omega_0(\lambda), \omega_1(\lambda), \dots, \omega_n(\lambda)$  spełnia warunki:

a) jeżeli  $\omega_i(\lambda)=0$  dla pewnego  $i < n$ , to

$$\omega_{i-1}(\lambda)\omega_{i+1}(\lambda) < 0$$

b) jeżeli  $\omega_n(\lambda)=\omega(\lambda)$  jest różne od 0, to liczba zmian znaków sąsiednich liczb

$$\omega_0(\lambda), \omega_1(\lambda), \dots, \omega_n(\lambda)$$

jest równa liczbie wartości własnych macierzy  $J$  mniejszych od  $\lambda$ .

c) Jeżeli  $\omega_n(\lambda)=0$ , to  $\lambda$  jest wartością własną macierzy  $J$ , a ponadto jest tyle wartości własnych mniejszych niż  $\lambda$ , ile nastąpiło zmian znaków w ciągu  $\omega_0(\lambda), \omega_1(\lambda), \dots, \omega_{n-1}(\lambda)$

Metoda bisekcji jest bardzo dokładna. Wadą jest uzyskiwanie dużych wartości ciągu:  $\omega_0(\lambda), \omega_1(\lambda), \dots, \omega_n(\lambda)$ , jeśli  $\lambda$  znacznie różni się od wartości własnych  $J$ . Zaletą natomiast możliwość obliczenia wartości własnej o określonym indeksie  $k$ . Liczba iteracji potrzebna do wyznaczenia  $\lambda_k$  wynosi:

$$IT = \log_2 \frac{\beta_0 - \alpha_0}{\rho}$$

$\alpha_0, \beta_0$  – przedział poszukiwań wartości własnej,  
 $\rho$  – dokładność wyznaczenia wartości własnej

### Wektory własne

Znając wartość własną macierzy  $J$  wektor własny wyznaczamy według wzorów:

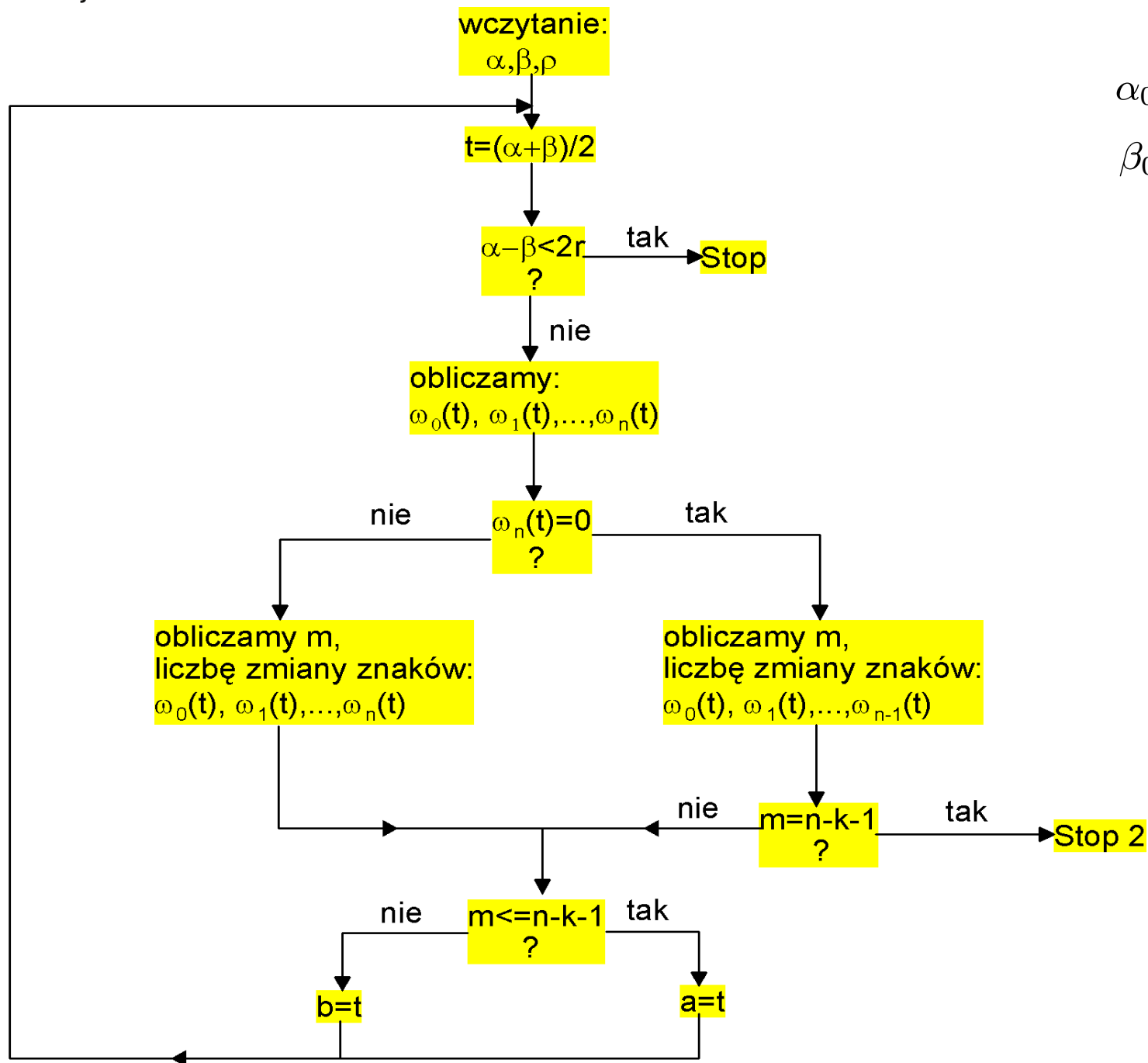
$$x_1 = 1$$

$$x_2 = \frac{\lambda - \delta_1}{\gamma_2}$$

$$x_{i+1} = \frac{(\lambda - \delta_i)x_i - \gamma_i x_{i-1}}{\gamma_{i+1}}, \quad i = 2, 3, \dots, n-1$$

gdzie:  $\delta_i$  – elementy diagonalne  $J$   
 $\gamma_i$  – elementy pozadiagonalne  $J$

Algorytm poszukiwania **k-tej** wartości własnych metodą bisekcji



$$\alpha_0 = -\|J\|$$

$$\beta_0 = \|J\|$$

## Wyznaczanie wartości własnych metodą LR

W metodzie tej iteracyjnie przekształcamy macierz A uzyskując ciąg

$$A = A_1 \rightarrow A_2 \rightarrow A_3 \rightarrow \dots \rightarrow A_m$$

W którym ostatni element stanowi macierz trójkątna górna (Hessenberga). Elementy diagonalne macierzy  $A_m$  stanowią natomiast ciąg wartości własnych macierzy A czyli

$$\lim_{i \rightarrow \infty} a_{jj}^{(i)} = \lambda_j$$

W każdej iteracji wyznaczamy rozkład  $A_i$  na iloczyn macierzy trójkątnej dolnej L z jedynkami na diagonalu oraz macierzy trójkątnej górnej R:

$$A_i = L_i R_i$$

Przekształcamy macierz w następujący sposób

$$A_{i+1} = L_{i+1} R_{i+1} = R_i L_i$$

Macierze  $A_i$  oraz  $A_{i+1}$  są podobne

$$A_i = L_i R_i, \quad L_i^{-1} A_i = R_i, \quad A_i R_i^{-1} = L_i$$

$$A_{i+1} = R_i L_i = L_i^{-1} A L_i = R_i A R_i^{-1}$$

Wadą jest to że rozkład  $L_i R_i$  może nie istnieć lub może istnieć ale jego znalezienie jest źle uwarunkowane. W obu przypadkach algorytm przerywa działanie.

## Wyznaczanie wartości własnych metodą QR

Metoda wywodzi się z metody LR, przy czym macierz L zastąpiono **macierzą ortogonalną** Q przez co metoda jest stabilna numerycznie.

$$A_1 = A$$

$$A_i = Q_i R_i \quad Q^H Q = I$$

$$A_{i+1} = R_i Q_i$$

gdzie:  $R_i$  jest macierzą trójkątną górną, a  $Q_i$  jest macierzą ortogonalną

W metodzie QR otrzymujemy ciąg macierzy

$$A = A_1 \rightarrow A_2 \rightarrow A_3 \rightarrow \dots \rightarrow A_m$$

Macierze te są do siebie podobne więc mają te same wartości własne. Jeśli m jest duże wówczas spodziewamy się że na diagonalu  $A_m$  będą znajdować się wartości własne A.

**Tw.** Jeżeli macierz A jest symetryczna i dodatnio określona, to algorytm QR generuje ciąg macierzy  $A^{(1)}, A^{(2)}, \dots$  zbieżny do macierzy diagonalnej.

Wadą metody QR jest wolna zbieżność dla macierzy pełnych. Metoda jest szybkozbieżna dla macierzy trójdzielnych i macierzy Hessenberga.

## Algorytm QR dla macierzy Hessenberga.

Macierzą (górną) Hessenberga jest macierz, którą można zapisać w postaci:

$$H = T + U$$

Każda macierz kwadratowa jest ortogonalnie podobna do macierzy Hessenberga, więc ma ona to samo widmo wartości własnych co macierz H.

Wyznaczamy ciąg macierzy:

$$H_i = Q_i R_i$$

$$H_{i+1} = R_i Q_i, \quad i = 1, 2, 3, \dots$$

Wszystkie  $H_i$  są macierzami Hessenberga

$$H_{i+1} = Q_i^T H_i Q_i$$

wobec czego wszystkie macierze  $H_i$ ,  $i=1,2,3,\dots$  są podobne. Elementy na diagonalu kolejnych  $H_i$  dążą do wartości własnych macierzy  $H_1=H$ .

Jeżeli macierz H ma pojedyncze wartości własne takie, że są pomiędzy nimi pary sprzężone o identycznych modułach, to nie wszystkie elementy poddiagonalne dążą do 0. W granicy otrzymuje się macierz:

$$H_\infty = \begin{bmatrix} * & * & \cdot & \cdot & \cdot \\ * & * & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & * & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \end{bmatrix}$$

**gwiazdki** - elementy ustalone

**kropki** - elementy, których wartości mogą się zmieniać.

Wartości własne leżą wtedy bezpośrednio na diagonalu lub są wartościami własnymi macierzy 2x2 leżących na diagonalu.

Wadą metody może być powolna zbieżność. Zwiększenie wydajności uzyskuje się dokonując przesunięcia widma wartości własnych

$$H_i - k_i I = Q_i R_i$$

$$H_{i+1} = R_i Q_i + k_i I$$

Wartość  $k_i$  wybiera się jako równe otrzymanym już wartościom własnym

$$k_i = a_{nn}^i$$

lub wartości  $k_i$  oraz  $k_{i+1}$  jako równe wartościom własnym macierzy 2x2 znajdujących się w prawym dolnym rogu macierzy  $H_i$ .

## Metoda Householdera rozkładu QR

Definiujemy macierz Householdera w postaci

$$H = I - \frac{1}{\tau} \mathbf{u} \mathbf{u}^H$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{z} - \alpha \|\mathbf{z}\|_2 \mathbf{e}_1$$

$$\alpha = \pm 1 = -\text{sign}(z_1)$$

$$\mathbf{z} = [z_1, z_2, \dots, z_n]^T$$

$$\mathbf{e}_1 = [1, 0, \dots, 0]^T$$

$$\tau = \|\mathbf{z}\|_2 (\|\mathbf{z}\|_2 - \alpha)$$

która ma własność

$$H\mathbf{z} = \alpha \|\mathbf{z}\|_2 [1, 0, 0, \dots, 0]^T$$

Macierz Householdera posłuży do znalezienia rozkładu QR.

Określamy ciąg macierzy  $P^{(1)}, P^{(2)}, P^{(3)}, \dots, P^{(n-1)}$  przy pomocy których definiujemy macierz  $R$  (górną trójkatną):

$$P^{(n-1)} P^{(n-2)} \dots P^{(1)} A = R$$

Zakładamy

$$P^{(1)} = H^{(1)}$$

Macierz  $H^{(1)}$  jest macierzą Householdera sprowadzającą pierwszą kolumnę macierzy  $A$  ( $a^{(1)}_1$ ) do postaci:

$$\alpha^{(1)} \|a^{(1)}_1\|_2 [1, 0, 0, \dots, 0]_{1 \times n}^T$$

Przez  $P^{(2)}$  oznaczamy

$$P^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 & \vdots & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \vdots & H^{(2)} \end{bmatrix}$$

Macierz  $H^{(2)}$  sprowadza pierwszą kolumnę macierzy o wymiarze  $(n-1) \times (n-1)$  utworzonej z wierszy i kolumn o numerach 2,3,4,...,n macierzy  $P^{(1)}A$  ( $a^{(2)}_1$ ) do postaci

$$\alpha^{(2)} \|a^{(2)}_1\|_2 [1, 0, 0, \dots, 0]_{1 \times (n-1)}^T$$

Postępujemy w ten sposób otrzymując kolejno  $P^{(3)}, P^{(4)}$ , itd.



Macierz  $P^{(n-1)}$  ma postać

$$P^{(n-1)} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & H^{(n-1)} \end{bmatrix}$$

A macierz  $H^{(n-1)}$  ma wymiar  $2 \times 2$ .

Po wyznaczeniu wszystkich macierzy  $P^{(i)}$ , rozkład  $A=QR$  wyznaczamy według wzorów

$$Q = P^{(1)} P^{(2)} P^{(3)} \dots P^{(n-1)}$$

$$R = Q^T A$$

Liczba operacji potrzebnych do uzyskania rozkładu Householdera wynosi

a) mnożenie

$$M = \frac{2}{3}n^3 + 2n^2 - \frac{2}{3}n - 2$$

b) dodawanie

$$D = \frac{2}{3}n^3 + \frac{10}{3}n - 4$$

c) pierwiastkowanie

$$p = n - 1$$

Uwagi:

- 1) inne metody pozwalające uzyskać rozkład QR to metoda Grama-Schmidta i Givensa
- 2) jeśli macierz  $A$  jest symetryczna to rozkład QR zachowuje jej symetrię natomiast rozkład LR nie
- 3) jeśli macierz  $A$  jest symetryczna i dodatniookreślona to można stosować rozkład  $LL^T$  wówczas algorytm LR zachowuje symetrię macierzy  $A$
- 4) metoda szybka dla macierzy Hessenberga i trójdzielnej

### Wyznaczanie wektorów własnych dla rozkładu QR

Uwaga: **nie zakładamy postaci macierzy pierwotnej  $A$**

W metodzie QR dostajemy ciąg przekształceń

$$A_i = Q_i R_i \rightarrow Q_i^{-1} A_i = R_i$$

$$A_{i+1} = R_i Q_i = Q_i^{-1} A Q_i = Q_{i+1} R_{i+1}$$

$$Q_{i+1}^{-1} Q_i^{-1} A Q_i = R_{i+1}$$

$$A_{i+2} = R_{i+1} Q_{i+1} = Q_{i+1}^{-1} Q_i^{-1} A Q_i Q_{i+1}$$

co można uogólnić

$$A_{k+1} = Q_k^{-1} Q_{k-1}^{-1} \dots Q_1^{-1} A Q_1 Q_2 \dots Q_k \quad 33$$

Oznaczmy

$$P = P_k = Q_1 Q_2 \dots Q_k$$

$$P^{-1} = P_k^{-1} = Q_k^{-1} Q_{k-1}^{-1} \dots Q_1^{-1}$$

Wówczas można bezpośrednio pokazać że

$$P^{-1}AP = A_{k+1} = H$$

Macierz  $A_{k+1}$  jest macierzą trójkątną górną z wartościami własnymi na diagonalu. Wektor własny  $\mathbf{x}^{(i)}$  tej macierzy (**H**) przynależy do wartości własnej

$$\lambda_i = h_{ii}$$

wyznacza się według poniższych wzorów

$$\begin{aligned} x_j^{(i)} &= 0, \quad j = n, n-1, \dots, i+1 \\ x_i^{(i)} &= 1 \\ x_j^{(i)} &= -\frac{\sum_{k=j+1}^i h_{jk} x_k^{(i)}}{h_{jj} - h_{ii}}, \quad j = i-1, i-2, \dots, 1 \end{aligned}$$

Mając wyznaczone wektory własne macierzy H możemy obliczyć wektory własne macierzy pierwotnej A

$$P^{-1}AP = H$$

$$H\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

$$P^{-1}AP\mathbf{x} = H\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

$$A(P\mathbf{x}) = \lambda P\mathbf{x}$$

$$\mathbf{y} = P\mathbf{x}$$

$$A\mathbf{y} = \lambda\mathbf{y}$$

## Uogólniony problem własny

Uogólniony problem własny definiujemy następująco

$$Ax = \lambda Bx$$

gdzie: A i B są macierzami kwadratowymi.

Najprościej byłoby przekształcić powyższe równanie tak aby przeprowadzić je do zwykłego problemu własnego tj.

$$B^{-1}Ax = Cx = \lambda x$$

Problemem pozostaje jednak jak znaleźć  $B^{-1}$ ?  
W przypadku, gdy B oraz A są macierzami symetrycznymi możemy posłużyć się rozkładem  $LL^T$

$$B = LL^T$$

$$BB^{-1} = I = LL^T(L^T)^{-1}L^{-1}$$
$$B^{-1} = (L^T)^{-1}L^{-1}$$

wówczas wykorzystując rozkład  $LL^T$  można znaleźć macierz podobną do  $B^{-1}A$

$$\begin{aligned} L^T(B^{-1}A)(L^T)^{-1} &= L^T(L^T)^{-1}L^{-1}A(L^{-1})^T \\ &= L^{-1}A(L^{-1})^T \\ &= G \end{aligned}$$

Dzięki temu przekształceniu, macierz G jest symetryczna jak A i posiada identyczne widmo wartości własnych (ale inne wektory własne).

$$Gy = \lambda y$$

Jak znaleźć G?

Najpierw należy znaleźć macierz F

$$F = A(L^{-1})^T$$

rozwiązując układ równań

$$FL^T = A$$

a następnie wyznaczamy G

$$G = L^{-1}F$$

rozwiązując układ równań

$$LG = F$$

Rozkład  $LL^T$  wymaga wykonania  $n^3/6$  mnożeń a wyznaczenie macierzy G  $(2/3)n^3$ . Macierz G jest symetryczna więc w celu wyznaczenia jej wartości i wektorów własnych korzystamy z metod przeznaczonych dla tej klasy macierzy.

Wektory własne macierzy A wyznaczamy przekształcając wektory macierzy G lub rozwiązując układ

$$L^T x = y$$