

Komputerowa analiza zagadnień różniczkowych

3. Numeryczne zagadnienie własne

P. F. Góra

<http://th-www.if.uj.edu.pl/zfs/gora/>

semestr letni 2007/08

Wektory i wartości własne — definicje

Niech $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$. Jeżeli istnieje taki **niezerowy** wektor $\mathbf{x}_R \in \mathbb{C}^N$, że $\mathbf{A}\mathbf{x}_R = \lambda_R\mathbf{x}_R$, to λ_R nazywam prawostronną wartością własną macierzy \mathbf{A} , zaś wektor \mathbf{x}_R nazywam prawostronnym wektorem własnym macierzy \mathbf{A} do wartości własnej λ_R .

Niech $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$. Jeżeli istnieje taki **niezerowy** wektor $\mathbf{x}_L \in \mathbb{C}^N$, że $\mathbf{x}_L^\dagger \mathbf{A} = \lambda_L \mathbf{x}_L^\dagger$, to λ_L nazywam lewostronną wartością własną macierzy \mathbf{A} , zaś wektor \mathbf{x}_L nazywam lewostronnym wektorem własnym macierzy \mathbf{A} do wartości własnej λ_L .

Zbiór wszystkich prawostronnych (lewostronnych) wartości własnych macierzy nazywam prawostronnym (lewostronnym) widmem macierzy.

Twierdzenie: Lewostronne i prawostronne widma danej macierzy są identyczne.

Wobec powyższego twierdzenia, można mówić po prostu o *widmie macierzy*.

Uwaga: Definicję widma w przestrzeniach nieskończenie wymiarowych należy zmodyfikować!

Twierdzenie: Lewostronne i prawostronne wektory własne danej macierzy, odpowiadające *różnym* wartościom własnym, są ortogonalne.

Dwie macierze A , B nazywam **podobnymi**, jeśli istnieje taka macierz odwracalna S , że $A = S^{-1}BS$.

Twierdzenie: Widma macierzy podobnych są takie same.

Jeżeli macierz jest podobna do macierzy diagonalnej, macierz tę nazywam *diagonalizowalną*.

Uwaga: Nie każda macierz jest diagonalizowalna — na przykład macierz

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

nie jest diagonalizowalna.

Obserwacja: Jeśli macierz jest diagonalizowalna, jej postać diagonalna ma na głównej przekątnej wartości własne (i zera wszędzie poza tą przekątną).

Twierdzenie: Niech $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$ będzie pewną macierzą posiadającą N niezależnych prawostronnych wektorów własnych. Niech \mathbf{X} będzie macierzą, której kolumnami są te wektory. Wówczas $\mathbf{X}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{X}$ jest macierzą diagonalną.

Obserwacja: Diagonalizowalna macierz $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$ ma N niezależnych prawostronnych wektorów własnych.

Uwaga: Jeśli $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, macierz ta może mimo to mieć zespolone wartości własne.

Twierdzenie: Niech λ będzie wartością własną macierzy $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$. Wówczas λ spełnia równanie

$$\det [\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}] = 0. \quad (1)$$

Równanie (1) nazywa się **równaniem charakterystycznym** macierzy \mathbf{A} .

Dowód. Jeżeli λ jest wartością własną \mathbf{A} , musi istnieć wektor $\mathbf{x} \neq 0$ taki, że $\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$, a więc spełniający równanie

$$[\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}] \mathbf{x} = 0. \quad (2)$$

Równanie (2) może mieć nietrywialne rozwiązania tylko jeżeli zachodzi (1) — wiemy zaś, że równanie (2) ma nietrywialne rozwiązanie, jako że z definicji wartości własnej wynika, iż wektor \mathbf{x} , spełniający równanie (2), istnieje. \square

Obserwacja: Lewa strona równania charakterystycznego (1) jest wielomianem stopnia N w zmiennej λ .

Uwaga: Niekiedy wartości własne definiuje się jako pierwiastki równania charakterystycznego (1). **Moim zdaniem jest to podejście błędne.** (W skończeniowymiarowych przestrzeniach różnice ujawniają się dla macierzy niediagonalizowalnych.)

Twierdzenie: Niech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, przy czym $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$. Wówczas \mathbf{A} jest diagonalizowalna, jej wartości własne są rzeczywiste, a wektory własne do różnych wartości własnych są ortogonalne.

Obserwacja: Unormowane wektory własne *dowolnej* macierzy symetrycznej, rzeczywistej tworzą bazę ortonormalną w \mathbb{R}^N .

Metoda potęgowa — nie stosować, ale rozumieć

Niech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, przy czym $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$. Bierzemy dowolny $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$ i tworzymy przestrzeń

$$\mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{x}) = \text{span}\{\mathbf{x}, \mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{A}^2\mathbf{x}, \mathbf{A}^3\mathbf{x}, \dots\}. \quad (3)$$

Przestrzeń taką nazywam *przestrzenią Kryłowa*. Ilu wymiarowa jest ta przestrzeń? $\dim \mathcal{K} \leq N$. Ale czy zawsze osiągnany jest wymiar maksymalny? Nie. Jeśli $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, $\dim \mathcal{K} = 0$. **Jeśli \mathbf{x} jest wektorem własnym \mathbf{A} , $\dim \mathcal{K} = 1$.** W ogólności $\mathbf{A}^k \mathbf{x}$ dąży do jakiegoś wektora własnego \mathbf{A} lub do liniowej kombinacji (nie-wielu) wektorów własnych \mathbf{A} . Dlaczego?

Przypuśćmy, że największa (na moduł) wartość własna \mathbf{A} jest niezdegenerowana. Oznaczmy ją λ_1 . Zbiór wszystkich wartości własnych \mathbf{A} oznaczam $\{\lambda_i\}_{i=1}^N$, a odpowiadające im wektory własne oznaczam $\{\mathbf{u}_i\}_{i=1}^N$. Mamy

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^N \alpha_i \mathbf{u}_i \quad (4)$$

$$\mathbf{Ax} = \sum_{i=1}^N \alpha_i \mathbf{A} \mathbf{u}_i = \sum_{i=1}^N \alpha_i \lambda_i \mathbf{u}_i \quad (5a)$$

$$\mathbf{A}^k \mathbf{x} = \sum_{i=1}^N \alpha_i \lambda_i^k \mathbf{u}_i \quad (5b)$$

Jeśli $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \dots$, wynik iteracji (5) będzie dążył do wektora proporcjonalnego do \mathbf{u}_1 .

Otrzymujemy zatem następujący algorytm:

Metoda potęgowa:

$\mathbf{x}_0 = 0, \mathbf{x}_1$ dowolny, $\|\mathbf{x}_1\| = 1$

while $\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}\| > \varepsilon$

$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}_k$

$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{y}/\|\mathbf{y}\|$

$\lambda = \text{sgn}(\mathbf{x}_{k+1}^T \mathbf{x}_k) \|\mathbf{y}\|$

end

(6)

Kiedy metoda potęgowa zawodzi?

- gdy na moduł największa wartość własna jest zdegenerowana
- gdy największa wartość własna jest *na moduł* zdegenerowana (istnieją wartości własne $\pm\lambda_{\max}$)
- gdy trzeba szukać wektorów własnych do innej niż maksymalna (na moduł) wartości własnej
- nie działa dla macierzy niesymetrycznych

Odwrotna metoda potęgowa

Czasami zachodzi potrzeba znalezienia *najmniejszej* (na moduł) wartości własnej. Niech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, przy czym $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$ oraz $\det \mathbf{A} \neq 0$. Jeśli w algorytmie (6) obliczenie $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}_k$ zastąpimy rozwiązaniem równania $\mathbf{A}\mathbf{y} = \mathbf{x}_k$, metoda zbiegnie się do największej (na moduł) wartości własnej macierzy \mathbf{A}^{-1} , a więc do najmniejszej (na moduł) wartości własnej macierzy \mathbf{A} .

Wszystkie zastrzeżenia z poprzedniej strony stosują się ☹.

Druga wartość własna

Kiedy metoda potęgowa *nie* zbieganie się do największej (na moduł) wartości własnej? Gdy w rozkładzie (4) współczynnik przy wektorze własnym odpowiadającym tej wartości własnej znika. Widać zatem, że w metodzie potęgowej generowane wektory trzeba ortogonalizować do wektora odpowiadającego wiodącej wartości własnej. Niech \mathbf{u}_1 oznacza ten wektor własny.

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_0 &= \mathbf{0}, \tilde{\mathbf{x}}_1 \neq \mathbf{0} \text{ dowolny}, \mathbf{x}_1 = (\tilde{\mathbf{x}}_1 - \mathbf{u}_1^T \tilde{\mathbf{x}}_1 \mathbf{u}_1) / \|\tilde{\mathbf{x}}_1 - \mathbf{u}_1^T \tilde{\mathbf{x}}_1 \mathbf{u}_1\| \\ \mathbf{while} \quad &\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}\| > \varepsilon \\ &\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}_k \\ &\mathbf{y} = \mathbf{y} - \mathbf{u}_1^T \mathbf{y} \mathbf{u}_1 \\ &\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{y} / \|\mathbf{y}\| \\ &\lambda = \text{sgn}(\mathbf{x}_{k+1}^T \mathbf{x}_k) \|\mathbf{y}\| \\ \mathbf{end} \end{aligned} \tag{7}$$

Ortogonalizacja wewnątrz pętli potrzebna jest z uwagi na błędy zaokrąglenia. Konieczność ortogonalizacji *znacznie* podraża algorytm. Gdyby szukać trzeciej wartości własnej, trzeba ortogonalizować do \mathbf{u}_1 *oraz* \mathbf{u}_2 . I tak dalej.

Diagonalizacja poprzez ciąg ortogonalnych transformacji podobieństwa

Niech P_i , $i = 1, 2, \dots$ będą macierzami ortogonalnymi. Niech A będzie dowolną macierzą kwadratową o tym samym wymiarze. Tworzymy ciąg transformacji podobieństwa (a więc zachowujących widmo)

$$A \rightarrow P_1^T A P_1 \rightarrow P_2^T P_1^T A P_1 P_2 \rightarrow \dots \rightarrow P_M^T \dots P_2^T P_1^T A P_1 P_2 \dots P_M \quad (8)$$

Jeśli uda nam się dobrać macierze P_i tak, że macierz występująca po prawej stronie (8) jest diagonalna

$$A_{\text{diag}} = P_M^T \dots P_2^T P_1^T A P_1 P_2 \dots P_M \quad (9)$$

kolumny macierzy $P_1 P_2 \dots P_M$ są wektorami własnymi macierzy A (zobacz Twierdzenie na str. 5).

Otrzymujemy zatem algorytm generowania wektorów własnych

```
S = I  
for  $i = 1, M$   
    S = P $i$ S  
end
```

(10)

*Jeżeli potrzebne są same wartości własne, bez wektorów własnych, nie trzeba akumulować wykonywanych transformacji podobieństwa, czyli wykonywać iteracji (10), co, typowo, **znacznie** obniża koszt operacji.*

Uwaga: W arytmetyce dokładnej na ogół nie osiągamy macierzy diagonalnej w skończonym ciągu transformacji (8). W artytmetyce ze skończoną dokładnością przerywamy transformacje, gdy wszystkie wyrazy pozadiagonalne spadną poniżej pewnego progu.

Transformacja Householdera (I)

Niech $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^N$, $\|\mathbf{w}\| = 1$. Tworzę operator

$$\mathbf{P} = \mathbb{I} - 2\mathbf{w}\mathbf{w}^T. \quad (11)$$

Widać, że $\mathbf{P}^T = \mathbf{P}$. Ponadto

$$\mathbf{P}^2 = (\mathbb{I} - 2\mathbf{w}\mathbf{w}^T)(\mathbb{I} - 2\mathbf{w}\mathbf{w}^T) = \mathbb{I} - 4\mathbf{w}\mathbf{w}^T + 4\mathbf{w}\underbrace{\mathbf{w}^T\mathbf{w}}_{\mathbb{I}}\mathbf{w}^T = \mathbb{I} \quad (12)$$

A zatem operator (11) spełnia

$$\mathbf{P}^T = \mathbf{P} = \mathbf{P}^{-1}. \quad (13)$$

Operator (11) jest *ortogonalnym operatorem rzutowym*.

Niech teraz $\mathbf{x} \neq 0$, $\mathbf{x} \nparallel \hat{\mathbf{e}}_1$, gdzie $\hat{\mathbf{e}}_1$ jest pierwszym wersorem. Definiuję

$$\mathbf{P}_x = \mathbb{I} - 2 \frac{(\mathbf{x} \mp \|\mathbf{x}\| \hat{\mathbf{e}}_1) (\mathbf{x} \mp \|\mathbf{x}\| \hat{\mathbf{e}}_1)^T}{\|\mathbf{x} \mp \|\mathbf{x}\| \hat{\mathbf{e}}_1\|^2}. \quad (14)$$

Operator \mathbf{P}_x jest postaci (11). Zauważmy, że $\|\mathbf{x} \mp \|\mathbf{x}\| \hat{\mathbf{e}}_1\|^2 = \|\mathbf{x}\|^2 \mp 2\|\mathbf{x}\| \mathbf{x}^T \hat{\mathbf{e}}_1 + \|\mathbf{x}\|^2 \hat{\mathbf{e}}_1^T \hat{\mathbf{e}}_1 = 2(\|\mathbf{x}\|^2 \mp \|\mathbf{x}\| x_1)$, gdzie x_1 jest pierwszą składową wektora \mathbf{x} . Obliczam

$$\mathbf{P}_x \cdot \mathbf{x} = \mathbf{x} - \frac{(\mathbf{x} \mp \|\mathbf{x}\| \hat{\mathbf{e}}_1)^T \mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|^2 \mp \|\mathbf{x}\| x_1} (\mathbf{x} \mp \|\mathbf{x}\| \hat{\mathbf{e}}_1) = \mathbf{x} - (\mathbf{x} \mp \|\mathbf{x}\| \hat{\mathbf{e}}_1) = \pm \|\mathbf{x}\| \hat{\mathbf{e}}_1. \quad (15)$$

Operator (14) rzutuje ortogonalnie wektor \mathbf{x} na pierwszy wersor.

Rozkład QR

Niech $A_1 \in \mathbb{R}^{N \times N}$ i niech P_1 oznacza operator (14) zbudowany na pierwszej kolumnie macierzy A_1 . Widać, że

$$A_2 = P_1 A_1 = \begin{bmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \dots & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \dots & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \dots & \bullet & \bullet \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \bullet & \bullet & \dots & \bullet & \bullet \end{bmatrix}, \quad (16)$$

gdzie \bullet oznacza *jakąś* liczbę.

Kluczowe jest określenie kosztu operacji (16). *Wydaje się*, że ponieważ jest to mnożenie macierzowe, jego koszt wynosi $O(N^3)$. To jednak nieprawda: *Wiemy* jaki jest wynik działania P_1 na pierwszą kolumnę A_1 , natomiast ponieważ P_1 ma strukturę (11), wynik działania P_1 na kolejne kolumny A_1 można obliczyć w czasie liniowym (N — iloczyn skalarny plus odpowiednie ustawienie elementów), bez konieczności jawnej konstrukcji postaci macierzowej operatora P_1 . Ponieważ kolumn jest N , cały koszt operacji (16) wynosi $O(N^2)$, przy założeniu, że macierz A_1 jest pełna.

Zauważmy, że operator P_1 jest ortogonalny i symetryczny.

Zdefiniujmy teraz

$$\mathbf{P}_2 = \left[\begin{array}{c|ccc} 1 & 0 & \dots & 0 \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{\mathbf{P}}_2 & \\ 0 & & & \end{array} \right], \quad (17)$$

gdzie $\tilde{\mathbf{P}}_2$ jest operatorem (14) zbudowanym na *drugiej* kolumnie macierzy \mathbf{A}_2 , począwszy on *drugiego* wiersza: $\tilde{\mathbf{P}}_2 \in \mathbb{R}^{(N-1) \times (N-1)}$. \mathbf{P}_2 jest ortogonalny i symetryczny.

$$\mathbf{A}_3 = \mathbf{P}_2 \mathbf{A}_2 = \mathbf{P}_2 \mathbf{P}_1 \mathbf{A}_1 = \left[\begin{array}{c|ccc} 1 & 0 & \dots & 0 \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{\mathbf{P}}_2 & \\ 0 & & & \end{array} \right] \left[\begin{array}{cccccc} \bullet & \bullet & \bullet & \dots & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \dots & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \dots & \bullet & \bullet \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \bullet & \bullet & \dots & \bullet & \bullet \end{array} \right] = \left[\begin{array}{cccccc} \bullet & \bullet & \bullet & \dots & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \dots & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet & \dots & \bullet & \bullet \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \bullet & \dots & \bullet & \bullet \end{array} \right], \quad (18)$$

Teraz definiuję

$$\mathbf{P}_3 = \left[\begin{array}{cc|ccc} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \hline 0 & 0 & & & \\ \vdots & \vdots & & & \\ 0 & 0 & & \tilde{\mathbf{P}}_3 & \end{array} \right], \quad (19)$$

gdzie $\tilde{\mathbf{P}}_3$ jest operatorem (14) zbudowanym na *trzeciej* kolumnie macierzy \mathbf{A}_3 , począwszy od *trzeciego* wiersza: $\tilde{\mathbf{P}}_3 \in \mathbb{R}^{(N-2) \times (N-2)}$. \mathbf{P}_3 jest ortogonalny i symetryczny. I tak dalej. Postępując tak $(N - 1)$ razy, otrzymuję

$$\mathbf{P}_{N-1} \dots \mathbf{P}_2 \mathbf{P}_1 \mathbf{A} = \left[\begin{array}{cccccc} \bullet & \bullet & \bullet & \dots & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \dots & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet & \dots & \bullet & \bullet \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \bullet \end{array} \right]. \quad (20)$$

Macierz $\mathbf{P}_{N-1} \dots \mathbf{P}_2 \mathbf{P}_1$ jest ortogonalna, zatem $(\mathbf{P}_{N-1} \dots \mathbf{P}_2 \mathbf{P}_1)^{-1} = \mathbf{P}_1 \mathbf{P}_2 \dots \mathbf{P}_{N-1}$ też jest ortogonalna. Udowodniliśmy zatem następujące

Twierdzenie: Dla każdej macierzy $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ istnieje rozkład $\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{R}$, gdzie \mathbf{Q} jest macierzą ortogonalną, \mathbf{R} jest macierzą trójkątną górną. Rozkład ten nazywamy rozkładem QR .

Pokazaliśmy, że rozkładu QR można dokonać za pomocą transformacji Householdera — są także inne sposoby.

Koszt rozkładu QR

Pokazaliśmy, że jeden krok rozkładu QR pełnej macierzy kosztuje $O(N^2)$. Trzeba wykonać N kroków, zatem koszt całego rozkładu pełnej macierzy kosztuje $O(N^3)$. Koszt ten spada, jeśli macierz jest rzadka. **Koszt rozkładu QR wynosi**

- $O(N^3)$ dla macierzy pełnej
- $O(N^2)$ dla macierzy w postaci Hessenberga

“górna” macierz Hessenberga o wymiarach 5×5

$$\begin{bmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & 0 & \bullet & \bullet \end{bmatrix}$$

- $O(N)$ dla macierzy trójdzielnej

Algorytm QR

Niech macierz A ma rozkład QR postaci $A = QR$. Zauważmy, że iloczyn czynników Q, R wziętych w odwrotnej kolejności

$$RQ = Q^T A Q \quad (21)$$

jest ortogonalną transformacją podobieństwa macierzy A .

Zachodzi następujące

Twierdzenie: *Algorytm QR.* Niech $\mathbf{A} \equiv \mathbf{A}_0 \in \mathbb{R}^{N \times N}$. Niech $\mathbf{A}_i = \mathbf{Q}_i \mathbf{R}_i$ będzie rozkładem *QR*. Wówczas iteracja

$$\mathbf{A}_{i+1} = \mathbf{R}_i \mathbf{Q}_i \quad (22)$$

jest zbieżna do postaci trójkątnej górnej, przy czym na głównej diagonali pojawiają się wartości własne macierzy \mathbf{A} , z ewentualnymi blokami, odpowiadającymi zespolonym lub wielokrotnym wartościom własnym macierzy \mathbf{A} .

Dowód. Wykracza poza ramy tego wykładu. □

Obserwacja: Macierz diagonalna jest niezmiennicza w transformacji (22).

Obserwacja: Jeśli macierz \mathbf{A} jest symetryczna, algorytm QR jest zbieżny do postaci diagonalnej, z ewentualnymi blokami.

Transformacja Householdera (II) — trójdzielizacja

Niech $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T \in \mathbb{R}^{N \times N}$. Rozważamy transformację

$$\mathbf{A}_1 = \mathbf{P}_1 \mathbf{A} \mathbf{P}_1, \quad (23)$$

gdzie

$$\mathbf{P}_1 = \left[\begin{array}{c|ccc} 1 & 0 & \dots & 0 \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{\mathbf{P}}_1 & \\ 0 & & & \end{array} \right]. \quad (24)$$

Nie wolno tego pomylić z (17)! W tym wypadku $\tilde{\mathbf{P}}_1 \in \mathbb{R}^{(N-1) \times (N-1)}$ oznacza operator (14) zbudowany na pierwszej kolumnie \mathbf{A} *począwszy od drugiego wiersza* (pierwszego poddiagonalnego). \mathbf{P}_1 jest symetryczny i ortogonalny.

Otrzymujemy

$$\mathbf{A}_1 = \mathbf{P}_1 \mathbf{A} \mathbf{P}_1 = \begin{bmatrix} \bullet & \bullet & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \dots & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \dots & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \dots & \bullet \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \dots & \bullet \end{bmatrix} \quad (25)$$

W następnym kroku bierzemy

$$\mathbf{P}_2 = \left[\begin{array}{cc|ccc} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \hline 0 & 0 & & & \\ \vdots & \vdots & & \tilde{\mathbf{P}}_2 & \\ 0 & 0 & & & \end{array} \right], \quad (26)$$

gdzie $\tilde{\mathbf{P}}_2$ jest operatorem (14) zbudowanym na *drugiej* kolumnie macierzy \mathbf{A}_2 , począwszy od *trzeciego* (pierwszego poddiagonalnego) wiersza: $\tilde{\mathbf{P}}_2 \in \mathbb{R}^{(N-2) \times (N-2)}$. \mathbf{P}_2 jest ortogonalny i symetryczny.

Otrzymujemy

$$\mathbf{A}_2 = \mathbf{P}_2 \mathbf{A}_1 \mathbf{P}_2 = \begin{bmatrix} \bullet & \bullet & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \bullet & \bullet & \bullet & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \dots & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet & \bullet & \dots & \bullet \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \bullet & \bullet & \dots & \bullet \end{bmatrix} \quad (27)$$

I tak dalej. $N-2$ takich *ortogonalnych* transformacji podobieństwa sprowadza symetryczną macierz \mathbf{A} do postaci trójdzielnej. Koszt całego tego przedsięwzięcia jest rzędu $O(N^3)$.

Co z macierzami niesymetrycznymi?

Dla macierzy niesymetrycznych przedstawiony algorytm *nie* prowadzi do macierzy trójdzielnej, ale do postaci Hessenberga, która też jest bardziej przyjazna algorytmowi QR, niż macierz pełna.

Strategia postępowania

1. Sprowadź macierz do “prostej” postaci, dla której algorytm QR jest efektywny
 - dla macierzy symetrycznych, “prostą postacią” jest postać trójdzielna
 - dla macierzy niesymetrycznych, “prostą postacią” jest postać Hessenberga
2. szukaj wartości własnych (i wektorów, jeśli trzeba) za pomocą algorytmu QR.

Działa bezboleśnie dla macierzy $\sim 1000 \times 1000$. Dla macierzy $\sim 10^5 \times 10^5$ działa, ale już boleśnie. Dla macierzy większych (*macierzy monstrualnych*) w zasadzie działają tylko specjalne algorytmy dla macierzy rzadkich. Uwaga: na ogół nie trzeba poznawać *wszystkich* wartości własnych dużych macierzy, najczęściej wystarcza znajomość *kilkunastu* dominujących.

Wyznaczanie wektorów własnych znając przybliżone wartości własne

Niech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ *diagonalizowalna* i niech τ będzie (dobrym) przybliżeniem którejś z wartości własnych macierzy \mathbf{A} . Rozważmy równanie

$$(\mathbf{A} - \tau \mathbf{I}) \mathbf{y} = \mathbf{b}. \quad (28)$$

Gdyby $\mathbf{b} = \mathbf{0}$, τ zaś było dokładną wartością własną \mathbf{A} , rozwiązanie równania (28) byłoby wektorem własnym odpowiadającym τ . Przyjmijmy, że \mathbf{b} jest przypadkowym wektorem, takim, że $\|\mathbf{b}\| = 1$. τ jest *bliskie* jakiejś wartości własnej. Wówczas rozwiązanie (28) będzie *bliskie* odpowiedniego wektora własnego. Co więcej, jeśli procedurę tę przeiterujemy, to znaczy rozwiązania (28), znormalizowawszy, użyjemy jako prawej strony tego równania, uzyskamy jeszcze lepsze przybliżenie wektora własnego. Dlaczego?

Niech $\{\mathbf{u}_i\}_{i=1}^N$ będą wektorami własnymi \mathbf{A} . Niech wektory \mathbf{b} , \mathbf{y} z równania (28) mają następujące rozkłady w bazie tych wektorów własnych:

$$\mathbf{b} = \sum_{i=1}^N \beta_i \mathbf{u}_i, \quad \mathbf{y} = \sum_{i=1}^N \alpha_i \mathbf{u}_i. \quad (29)$$

Z równania (28) dostajemy

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i (\lambda_i - \tau) \mathbf{u}_i = \sum_{i=1}^N \beta_i \mathbf{u}_i, \quad (30)$$

a zatem, na mocy liniowej niezależności wektorów \mathbf{u}_i ,

$$\alpha_i = \frac{\beta_i}{\lambda_i - \tau}. \quad (31)$$

Otrzymujemy zatem

$$\mathbf{y} = \sum_{i=1}^N \frac{\beta_i}{\lambda_i - \tau} \mathbf{u}_i, \quad (32)$$

a po k -krotnym przeiterowaniu tej procedury,

$$\mathbf{y} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{i=1}^N \frac{\beta_i}{(\lambda_i - \tau)^k} \mathbf{u}_i, \quad (33)$$

gdzie \mathcal{N} jest czynnikiem normalizacyjnym. Widać, że jeżeli $\tau \simeq \lambda_j$, wyraz z \mathbf{u}_j będzie dominował w sumie (33) (por. metoda potęgowa).

Otrzymaliśmy zatem następujący algorytm:

$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, diagonalizowalna

\mathbf{y}_0 dowolny, $\|\mathbf{y}_0\| = 1$

do

$$(\mathbf{A} - \tau \mathbb{I}) \mathbf{z} = \mathbf{y}_k \tag{34}$$

$$\mathbf{y}_{k+1} = \mathbf{z} / \|\mathbf{z}\|$$

until $\|\mathbf{y}_{k+1} - \mathbf{y}_k\| < \varepsilon$

Uwagi:

1. τ musi być bliskie którejś z wartości własnych; jeśli τ zostało obliczone numerycznie, należy je traktować jako *bliskie*, ale nie dokładne.
2. Jeśli wartości własne \mathbf{A} leżą blisko siebie i τ leży blisko wielu różnych wartości własnych, zbieżność może być wolna.
3. Równanie liniowe w (34) należy rozwiązywać w precyzji podwyższonej w stosunku do tej, w jakiej chcemy otrzymać ostateczny wektor własny, gdyż równanie to może być bliskie równaniu **osobliwemu**. W kolejnych równaniach można używać tej samej faktoryzacji macierzy $\mathbf{A} - \tau \mathbb{I}$.