Wstęp do metod numerycznych

5a. Rezolwenta

Uogólnione wartości własne

P. F. Góra

https://zfs.fais.uj.edu.pl/pawel_gora

2025

Rezolwenta

Niech $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N\times N}$ i niech pewna liczba $\xi \in \mathbb{C}$ **nie** należy do widma $\mathbf{A}$. Wynika stąd, że $\det(\mathbf{A} - \xi\mathbb{I}) \neq 0$. Macierz $\mathbf{Z} = (\mathbf{A} - \xi\mathbb{I})^{-1}$ nazywam rezolwentą macierzy $\mathbf{A}$. (Rezolwenta jest funkcją argumentu ξ.) Niech λ i $\mathbf{u}$ będą wartością własną i odpowiadającym jej wektorem własnym $\mathbf{A}$:

$$\mathbf{A}\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}\,. \tag{1a}$$

Z (1a) wynika ($\xi \neq \lambda$)

$$\begin{aligned} \mathbf{A}\mathbf{u} - \xi\mathbf{u} &= \lambda\mathbf{u} - \xi\mathbf{u} && \text{(1b)} \\ (\mathbf{A} - \xi\mathbb{I})\mathbf{u} &= (\lambda - \xi)\mathbf{u} && \text{(1c)} \\ \frac{1}{\lambda - \xi}\mathbf{u} &= (\mathbf{A} - \xi\mathbb{I})^{-1}\mathbf{u} = \mathbf{Z}\mathbf{u}\,. && \text{(1d)} \end{aligned}$$

Ostatnie równanie oznacza, że $\mathbf{u}$ jest wektorem własnym rezolwenty do wartości własnej $(\lambda - \xi)^{-1}$.

Transformacja Möbiusa

Algorytmy znajdywania wartości własnych *dużych* macierzy są na ogół szybko zbieżne do wartości skrajnych, izolowanych. Często znajomość takich wartości własnych wystarcza nam ze względów praktycznych. Jeżeli jednak chcemy dokładnie obliczyć dwie zbliżone wartości własne, leżące gdzieś "w środku" widma, zbieżność może być bardzo wolna. Można ją przyspieszyć za pomocą transformacji Möbiusa.

Niech $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$ będą dwoma wektorami własnymi pewnej macierzy $\mathbf{A}$, zaś λ_1, λ_2 będą odpowiadającymi im wartościami własnymi, przy czym $\exists\tau\colon \lambda_1 = \tau + \varepsilon_1, \lambda_2 = \tau + \varepsilon_2$, $|\varepsilon_{1,2}| \ll 1$ oraz τ *nie* jest wartością własną $\mathbf{A}$. Rozważmy rezolwentę $(\mathbf{A} - \tau\mathbb{I})^{-1}$. Wektory $\mathbf{u}_{1,2}$ są jej wektorami własnymi do wartości własnych $(\tau + \varepsilon_{1,2} - \tau)^{-1} = \varepsilon_{1,2}^{-1}$. Różnica tych wartości własnych wynosi $\left|\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1\varepsilon_2}\right|$, co jest liczbą dużą, gdyż $\varepsilon_{1,2}$ są małe. Widzimy, że zbliżone wartości własne macierzy odpowiadają dobrze rozseparowanym wartościom własnym rezolwenty, wektory własne zaś są takie same.

Dobre rozseparowanie wartości własnych rezolwenty powinno sprawić, że procedura poszukiwania tych wartości własnych powinna być szybko zbieżna, co zrekompensuje koszt obliczania samej rezolwenty. Dodatkowym ułatwieniem jest fakt, że przy obliczaniu rezolwenty (ściślej: wyników działania rezolwenty na jakieś wektory), możemy cały czas korzystać z tej samej faktoryzacji.

Uogólnione zagadnienie własne

Zagadnienie własne oznacza analizę macierzy postaci $\mathbf{A} - \lambda\mathbb{I}$. Jeśli macierz jednostkową zastąpimy jakąś inną macierzą, otrzymamy $\mathbf{A} - \lambda\mathbf{B}$, co prowadzi do uogólnionego zagadnienia własnego:

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{B}\mathbf{x}\,, \tag{2}$$

gdzie $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{N\times N}$. Liczby λ nazywamy uogólnionymi wartościami własnymi, a wektory $\mathbf{x}$ uogólnionymi wektorami własnymi. Zagadnienia tego typu pojawiają się przy rozwiązywaniu pewnych problemów fizycznych.

Załóżmy dodatkowo, że $\mathbf{B}$ jest symetryczna i dodatnio określona. Wówczas istnieje faktoryzacja Cholesky'ego $\mathbf{B} = \mathbf{C}\mathbf{C}^T$.

Problem (2) mogę zapisać jako

$$\begin{aligned} \mathbf{C}^{-1}\mathbf{A}\left(\mathbf{C}^T\right)^{-1}\mathbf{C}^T\mathbf{x} &= \lambda\mathbf{C}^T\mathbf{x} && \text{(3a)} \\ \tilde{\mathbf{A}}\mathbf{y} &= \lambda\mathbf{y}\,, && \text{(3b)} \end{aligned}$$

gdzie $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{A}\left(\mathbf{C}^T\right)^{-1}$, $\mathbf{y} = \mathbf{C}^T\mathbf{x}$. Jak widać, uogólniony problem własny (2) jest równoważny "zwykłemu" problemowi własnemu (3b). Ponadto, jeżeli $\mathbf{A}$ jest symetryczna (i dodatnio określona), także $\tilde{\mathbf{A}}$ jest symetryczna (i dodatnio określona). Aby numerycznie rozwiązać problem własny (3b), należy znaleźć $\mathbf{C}^{-1}$ — jest to jedna z niewielu sytuacji, w których odwrotność jakiejś macierzy trzeba znaleźć *explicite*. Skądinąd odwrotność macierzy trójkątnej znajduje się stosunkowo szybko.

Niech $\tilde{\mathbf{A}}$ będzie symetryczna i dodatnio określona i niech $\lambda_1 \neq \lambda_2$. Wówczas odpowiednie wektory własne są prostopadłe, $\mathbf{y}_1^T\mathbf{y}_2 = 0$. Mamy

$$0 = \mathbf{y}_1^T\mathbf{y}_2 = \left(\mathbf{C}^T\mathbf{x}_1\right)^T\mathbf{C}^T\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1^T\mathbf{C}\mathbf{C}^T\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1^T\mathbf{B}\mathbf{x}_2\,. \tag{4}$$

Jak widzimy, w przypadku macierzy symetrycznych uogólnione wektory własne odpowiadające różnym uogólnionym wartościom własnym są sprzężone względem macierzy $\mathbf{B}$, przy dodatkowym założeniu, że $\mathbf{B}$ jest dodatnio określona. Można również powiedzieć, że uogólnione wektory własne są ortogonalne względem iloczynu skalarnego generowanego przez symetryczną i dodatnio określoną macierz $\mathbf{B}$. Uogólnione wektory własne także stanowią bazę w przestrzeni $\mathbb{R}^N$, nieortogonalną względem “naturalnego” iloczynu skalarnego.

