# Metody numeryczne I

## *Zagadnienia własne*

Janusz Szwabiński

szwabin@ift.uni.wroc.pl



## Zagadnienia własne

1. Pojęcia podstawowe
2. Zaburzenia wartości i wektorów własnych
3. Wartości własne macierzy hermitowskiej
4. Metody ogólne dla macierzy o elementach rzeczywistych
5. GNU Scientific Library (GSL)



## Zagadnienie własne

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

$\lambda$ - wartość własna

$x$ - wektor własny



## Pojęcia podstawowe

**Twierdzenie** Liczba $\lambda$ jest wartością własną macierzy $\mathbf{A}$ wtedy i tylko wtedy, jeśli jest pierwiastkiem wielomianu charakterystycznego

$$w_n(\lambda) = \det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})$$

macierzy $\mathbf{A}$.

**Definicja** Wektory i wartości własne macierzy transponowanej $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ nazywamy odpowiednio lewostronnymi wektorami i lewostronnymi wartościami własnymi macierzy $\mathbf{A}$.

**Definicja** Pierwiastki $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ wielomianu charakterystycznego (z uwzględnieniem ewentualnych wielokrotności tych pierwiastków) nazywamy widmem macierzy $\mathbf{A}_{n\times n}$. Zbiór liczb $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ oznaczamy przez $\mathrm{Sp}(\mathbf{A})$.

**Twierdzenie** Niech $\lambda_L$ i $\lambda_P$ będą odpowiednio lewostronną wartością własną i wartością własną macierzy $\mathbf{A}$, a $x_L$ i $x_P$ odpowiadającymi tym wartościom lewostronnym wektorem własnym i wektorem własnym. Jeżeli $\lambda_l \neq \lambda_P$, to wektory $x_L$ i $x_P$ są ortogonalne, czyli

$$\langle x_l, x_P \rangle = 0.$$



**Twierdzenie** Jeżeli $p(t)$ jest wielomianem zmiennej $t$, a liczby $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ tworzą widmo macierzy $\mathbf{A}_{n\times n}$, to widmem macierzy $p(\mathbf{A})$ są liczby $p(\lambda_1), \ldots, p(\lambda_n)$. Wektory własne macierzy $\mathbf{A}$ są wektorami własnymi macierzy $p(\mathbf{A})$.

**Twierdzenie** (Cayleya–Hamiltona) Jeżeli $w_n(\lambda)$ jest wielomianem charakterystycznym macierzy $\mathbf{A}$, to $w_n(\mathbf{A})$ jest macierzą zerową.

**Definicja** Mówimy, że macierze $\mathbf{A}$ i $\mathbf{B}$ są podobne, jeśli istnieje taka nieosobliwa macierz $\mathbf{P}$, zwana macierzą podobieństwa, że

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P} = \mathbf{B}.$$



**Twierdzenie** Jeżeli macierze $\mathbf{A}$ i $\mathbf{B}$ są podobne, to

$$\mathrm{Sp}(\mathbf{A}) = \mathrm{Sp}(\mathbf{B}).$$

**Definicja** Macierz $\mathbf{A}$ nazywamy unitarną, jeśli

$$\mathbf{A}^{\dagger}\mathbf{A} = \mathbf{I}.$$

**Definicja** Macierz $\mathrm{B}$ nazywamy ortogonalną, jeśli

$$\mathrm{B}^{\mathrm{T}}\mathrm{B} = \mathbf{I}.$$



**Twierdzenie** Wartości własne macierzy symetrycznej $\mathbf{A}$ i jej wektory własne są rzeczywiste.

**Twierdzenie** Każda macierz jest unitarnie podobna do macierzy trójkątnej.

**Definicja** Macierz kwadratową $k \times k$ postaci

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \lambda & 1 & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ 0 & & & \lambda \end{pmatrix}$$

nazywamy klatką Jordana rzędu $k$. Liczba $\lambda$ może być zespolona.



**Twierdzenie** Dla każdej macierzy $\mathbf{A}$ istnieją takie macierze $\mathbf{P}$, że

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{J}_1 & & & 0 \\ & \mathbf{J}_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \mathbf{J}_r \end{pmatrix},$$

gdzie macierze $\mathbf{J}_1, \ldots \mathbf{J}_r$ są klatkami Jordana. Powyższą postać nazywamy postacią kanoniczną Jordana macierzy $\mathbf{A}$.



**Twierdzenie** (Schura) Suma kwadratów modułów wartości własnych jest ograniczona od góry przez kwadrat normy euklidesowej, tzn.

$$\sum_{i=1}^{n} |\lambda_i|^2 \leq \|\mathbf{A}\|_E^2.$$

**Twierdzenie** Dodanie do macierzy $\mathbf{A}$ macierzy jednostkowej pomnożonej przez skalar przesuwa widmo macierzy, gdyż dla dowolnej liczby $c$ mamy

$$\mathrm{Sp}(\mathbf{A} + c\mathbf{I}) = \mathrm{Sp}(\mathbf{A}) + c,$$

gdzie $\mathrm{Sp}(\mathbf{A}) + c$ oznacza zbiór liczb $\lambda_1 + c, \ldots, \lambda_n + c$.



**Twierdzenie** (Gershgorina)

(a) Jeśli $\mathbf{C}_i$ oznaczają koła domknięte na płaszczyźnie zespolonej o środkach w punktach $a_{ii}$ i promieniach równych sumie modułów elementów z danego wiersza spoza diagonali, tzn.

$$\mathbf{C}_i = \{z : |z - a_{ii}| \leq \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}|\},$$

to

$$\mathrm{Sp}(\mathbf{A}) \subset \bigcup_{i=1}^{n} \mathbf{C}_i.$$

**Twierdzenie** (ciąg dalszy)

(b) Jeżeli $k$ kół $\mathbf{C}_i$ tworzy zbiór rozłączny z pozostałymi kołami, to w zbiorze tym leży dokładnie $k$ wartości własnych macierzy $\mathbf{A}$.

**Twierdzenie** Jeżeli elementy macierzy $\mathbf{A}$ są niemniejsze niż elementy macierzy $\mathbf{B}$, to $\rho(\mathbf{A}) \geq \rho(\mathbf{B})$.



## Zaburzenia wartości własnych

$$\mathbf{A}x = \lambda x \quad \rightarrow \quad \bar{\mathbf{A}}x = \bar{\lambda}x$$

$$\begin{aligned} \bar{\lambda} &= \lambda + \delta\lambda \\ \bar{\mathbf{A}} &= \mathbf{A} + \delta\mathbf{A} \end{aligned}$$

Metoda stabilna numerycznie:

- zastępcze zaburzenie $\delta\mathbf{A}$ dąży do zera przy zwiększeniu dokładności obliczeń,
- $\delta\mathbf{A} \rightarrow 0$ pociąga za sobą $\delta\lambda \rightarrow 0$



**Definicja** Odległością liczby $z$ od zbioru $\mathrm{Sp}(\mathbf{A}) = \{\lambda_1, \ldots, \lambda_n\}$ nazywamy liczbę

$$\mathrm{dist}(z, \mathrm{Sp}(\mathbf{A})) = \min_{i=1,\ldots,n} |z - \lambda_i|.$$

**Definicja** Odległością zbiorów spektralnych $\mathrm{Sp}(\mathbf{A})$ i $\mathrm{Sp}(\mathbf{B})$ dwóch macierzy $\mathbf{A}_{n\times n}$ i $\mathbf{B}_{n\times n}$ nazywamy liczbę

$$\min_p \max_{i=1,\ldots,n} |\lambda_i - \gamma_i^{(p)}|,$$

gdzie $\lambda_i$ są kolejnymi elementami uporządkowanego zbioru $\mathrm{Sp}(\mathbf{A})$, a $\gamma_i^{(p)}$ - kolejnymi wartościami własnymi ze zbioru $\mathrm{Sp}(\mathbf{B})$, które ustawiono w innym porządku, oznaczonym indeksem $p$. Odległość tą będziemy oznaczać przez

$$\|\mathrm{Sp}(\mathbf{A}) - \mathrm{Sp}(\mathbf{B})\|_\infty.$$



**Twierdzenie** Jeżeli zaburzenie $\delta\mathbf{A}$ elementów macierzy $\mathbf{A}$ dąży do zera, to $\mathrm{Sp}(\mathbf{A} + \delta\mathbf{A})$ dąży do $\mathrm{Sp}(\mathbf{A})$ w tym sensie, że

$$\|\mathrm{Sp}(\mathbf{A}) - \mathrm{Sp}(\mathbf{A} + \delta\mathbf{A})\|_\infty \rightarrow 0.$$

**Twierdzenie** (Bauera–Fikego) Jeżeli macierz $\mathbf{A}$ jest podobna do macierzy diagonalnej $\mathbf{D}$, tzn. istnieje nieosobliwa macierz podobieństwa taka, że

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P} = \mathbf{D},$$

to dla dowolnej wartości własnej $\gamma$ macierzy $\mathbf{A} + \delta\mathbf{A}$ obowiązuje oszacowanie

$$\mathrm{dist}(\gamma, \mathrm{Sp}(\mathbf{A})) \leq \alpha,$$

gdzie

$$\alpha = \|\mathbf{P}^{-1}\|_2 \|\mathbf{P}\|_2 \|\delta\mathbf{A}\|_2.$$



Macierz $\mathbf{A}$ jest symetryczna:

$\Rightarrow$ $\mathbf{P}$ jest ortogonalna

$\Rightarrow$ $\|\mathbf{P}^{-1}\|_2 \|\mathbf{P}\|_2 = 1$

$\Rightarrow$ zagadnienie własne jest zawsze zadaniem dobrze uwarunkowanym



**Twierdzenie** Jeżeli $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P} = \mathbf{J}$ oraz $\gamma \in \mathrm{Sp}(\mathbf{A} + \delta\mathbf{A})$, to dla dowolnego zaburzenia $\delta\mathbf{A}$ jest spełnione oszacowanie

$$\mathrm{dist}(\gamma, \mathrm{Sp}(\mathbf{A})) \leq k \max(\alpha, \sqrt[k]{\alpha}),$$

gdzie $k$ to maksymalny rząd klatek Jordana w postaci kanonicznej macierzy, natomiast $\alpha$ zdefiniowane jest jak wyżej.



## Zaburzenia wektorów własnych

$$\begin{aligned} \mathbf{A}x_i &= \lambda_i x_i \\ (\mathbf{A} + \delta\mathbf{A})y_i &= \gamma_i y_i \end{aligned}$$

**Definicja** Niech $\mathbb{X}_i$ oznacza podprzestrzeń własną macierzy $\mathbf{A}$ odpowiadającą wartości własnej $\lambda_i$. Załóżmy, że $\|y_i\|_2 = 1$. Miarą zaburzenia wektora własnego $y_i$ (będącego wektorem własnym macierzy $\mathbf{A} + \delta\mathbf{A}$) względem wektorów własnych macierzy $\mathbf{A}$ odpowiadających wartości własnej $\lambda_i$ nazywamy liczbę

$$\rho(y_i, x_i) = \min_{x \in \mathbb{X}_i} \|y_i - x\|_2.$$

**Twierdzenie** Jeżeli macierz $\mathbf{A}$ jest symetryczna oraz wartość własna $\lambda_i$ jest odległa od różnych od niej wartości własnych macierzy $\mathbf{A}$ o $d > 0$, to dla zaburzeń $\delta\mathbf{A}$ takich, że

$$\|\delta\mathbf{A}\|_2 \leq d,$$

wektor własny $y_i$ macierzy $\mathbf{A} + \delta\mathbf{A}$ odpowiadający wartości własnej $\gamma_i$ jest obliczony z zaburzeniem

$$\rho(y_i, x_i) \leq \frac{\|\delta\mathbf{A}\|_2}{d - \|\delta\mathbf{A}\|_2}.$$



Niech

$\bar{\lambda}$ - obliczona wartość własna

$\bar{x}$ - obliczony wektor własny

oraz

$$\|\bar{x}\|_2 = 1, \quad r = \mathbf{A}\bar{x} - \bar{\lambda}\bar{x}$$

($r$ obliczamy dokładnie!)



**Twierdzenie** (Wilkinsona) Jeżeli macierz $\mathbf{A}$ jest symetryczna oraz $\|r\|_2 = \rho$, to w przedziale $\langle\bar{\lambda} - \rho, \bar{\lambda} + \rho\rangle$ znajduje się co najmniej jedna wartość własna macierzy $\mathbf{A}$. Jeżeli wartości własne macierzy $\mathbf{A}$ znajdujące się poza tym przedziałem są odległe od liczby $\bar{\lambda}$ co najmniej o $d > \rho$, to

$$\bar{\rho}(\bar{x}, x) \leq \frac{\rho}{d},$$

gdzie $\bar{\rho}(\bar{x}, x)$ jest błędem wektora własnego $\bar{x}$, obliczonym zgodnie z definicją, tzn. $\bar{\rho}(\bar{x}, x) = \min_{x \in \mathbb{X}} \|\bar{x} - x\|_2$, a $\mathbb{X}$ jest podprzestrzenią rozpiętą na wektorach własnych macierzy $\mathbf{A}$, odpowiadających wartościom własnym z przedziału $\langle\bar{\lambda} - \rho, \bar{\lambda} + \rho\rangle$.



## Zagadnienie własne macierzy hermitowskiej

$$\mathbf{A}^{\dagger} = \mathbf{A}$$

Własności:

1. wszystkie wartości własne są rzeczywiste,
2. wektory własne można sprowadzić do postaci ortogonalnej,
3. macierz hermitowską można sprowadzić do macierzy diagonalnej o tych samych wartościach własnych za pomocą przekształcenia przez podobieństwo z macierzą unitarną

Niech

$$\mathbf{A} = \mathbf{B} + i\mathbf{C}, \quad \mathbf{B} \text{ i } \mathbf{C} \text{ - macierze rzeczywiste}$$

$\Rightarrow$ $\mathbf{B}$ jest symetryczna

$\Rightarrow$ $\mathbf{C}$ jest skośnosymetryczna

$$\begin{aligned} B_{ij} &= B_{ji} \\ C_{ij} &= -C_{ji} \end{aligned}$$



Podobnie, dla wektora własnego:

$$x = y + iz$$

$\Rightarrow$ zagadnienie własne ma postać:

$$(\mathbf{B} + i\mathbf{C})(y + iz) = \lambda(y + iz)$$

czyli

$$\begin{pmatrix} \mathbf{B} & -\mathbf{C} \\ \mathbf{C} & \mathbf{B} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow$ zagadnienie własne macierzy hermitowskiej równoważne zagadnieniu własnemu symetrycznej macierzy rzeczywistej



## Symetryczne macierze rzeczywiste

Sposób postępowania:

1. przekształcenie macierzy symetrycznej przez podobieństwo z macierzą ortogonalną do macierzy trójdiagonalnej,
2. rozwiązanie zagadnienia własnego dla macierzy trójdiagonalnej

Przekształcenie zachowuje wartości własne ...

$\Rightarrow$ wartości własne są takie same dla macierzy trójdiagonalnej i macierzy wyjściowej

$\Rightarrow$ wektory własne obu macierzy związane za pomocą ortogonalnej macierzy przekształcenia



## Wartości własne macierzy trójdiagonalnej

$$\mathrm{T} = \begin{pmatrix} b_1 & a_2 & & & 0 \\ a_2 & b_2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & b_{n-1} & a_n \\ 0 & & & a_n & b_n \end{pmatrix}$$

Wielomian charakterystyczny $w_n(\lambda)$:

$$\begin{aligned} w_0(\lambda) &= 1 \\ w_1(\lambda) &= b_1 - \lambda \\ w_i(\lambda) &= (b_i - \lambda) w_{i-1}(\lambda) - a_i^2 w_{i-2}(\lambda) \end{aligned}$$

**Twierdzenie** Jeżeli elementy $a_2, \ldots, a_n$ są niezerowe, to wartości własne macierzy $\mathbf{T}$ są pojedyncze.

**Twierdzenie** Wszystkie pierwiastki równania $w_n(\lambda) = 0$ leżą w przedziale $\langle -\|\mathbf{T}\|_\infty, \|\mathbf{T}\|_\infty \rangle$. Przy tym

$$\|\mathbf{T}\|_\infty = \max\left\{ \sum_{j=1}^{n} |T_{ij}| \right\}.$$



**Twierdzenie** Jeżeli elementy $a_2, \ldots, a_n$ są niezerowe, to ciąg wartości $w_0(\lambda), \ldots, w_n(\lambda)$ spełnia warunki:

1. jeżeli $w_i(\lambda) = 0$ dla pewnego $i < n$, to
$$w_{i-1}(\lambda) w_{i+1}(\lambda) < 0,$$
2. jeżeli $w_n(\lambda) \neq 0$, to liczba zmian znaków sąsiednich liczb $w_0(\lambda), \ldots, w_n(\lambda)$ jest równa liczbie wartości własnych macierzy $\mathbf{T}$ mniejszych od $\lambda$,
3. jeżeli $w_n(\lambda) = 0$, to $\lambda$ jest wartością własną macierzy $\mathbf{T}$, a ponadto jest tyle wartości własnych mniejszych od $\lambda$, ile nastąpiło zmian znaków w ciągu $w_0(\lambda), \ldots, w_{n-1}(\lambda)$.



Metoda bisekcji:

1. obliczamy normę macierzy,
2. połowimy przedział $\langle -\|\mathbf{T}\|_\infty, \|\mathbf{T}\|_\infty \rangle$ i wyznaczamy znaki wielomianów $w_i(0)$
3. dzielimy przedziały $\langle -\|\mathbf{T}\|_\infty, 0\rangle$ i $\langle 0, \|\mathbf{T}\|_\infty \rangle$ na pół i badamy znaki wielomianów w każdym punkcie podziału;
4. postępowanie kontynuujemy do momentu, aż każda wartość własna będzie umiejscowiona w oddzielnym przedziale o długości $\frac{\|\mathbf{T}\|_\infty}{2^{l-1}}$, gdzie $l$ to liczba kroków



Własności metody:

- dokładność wyznaczonej wartości własnej nie zależy w istotny sposób od wartości liczb $w_0(\lambda), \ldots, w_n(\lambda)$
- jeśli wykonaliśmy $m$ podziałów, to odległość środka ostatniego przedziału od $\lambda_k$ można szacować jako
$$|t - \lambda_k| < (2,06\epsilon + 2^{-m})\|\mathbf{T}\|_\infty$$

## Wektory własne macierzy trójdiagonalnej

Jeśli $a_i \neq 0$ dla każdego $i$:

$$\begin{aligned} x_1 &= 1 \\ x_2 &= \frac{\lambda - b_1}{a_2} \\ x_{i+1} &= \frac{(\lambda - b_i)x_i - a_i x_{i-1}}{a_{i+1}}, \quad i = 2, 3, \ldots, n-1. \end{aligned}$$

W przeciwnym razie

- dzielimy $\mathbf{T}$ na trójdiagonalne bloki z $a_i \neq 0$
- wartości własne bloków są wartościami własnymi $\mathbf{T}$
- wektory własne bloków po uzupełnieniu zerami są wektorami własnymi macierzy $\mathbf{T}$



## Trójdiagonalizacja macierzy symetrycznej

Metoda Householdera:

- niech

$$\mathbf{P}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \mathbf{H}^{(1)} \end{pmatrix}$$

gdzie $\mathbf{H}^{(1)}$ sprowadza wektor $z^{(1)} = (a_{21}, \ldots, a_{n1})^{\mathrm{T}}$ do postaci

$$\alpha^{(1)} \|z^{(1)}\|_2 (1, 0, \ldots, 0)^{\mathrm{T}}_{1\times(n-1)}$$



- obliczamy macierz

$$\mathbf{M}^{(2)} = \mathbf{P}^{(1)}\mathbf{A}\mathbf{P}^{(1)} = \begin{pmatrix} b_1 & a_1 & 0 & & \ldots & 0 \\ a_1 & & & & & \\ 0 & & \mathbf{A}^{(2)}_{(n-1)\times(n-1)} & & & \\ \vdots & & & & & \\ 0 & & & & & \end{pmatrix}$$



- określamy macierz

$$\mathbf{P}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \\ 0 & 1 & \\ & & \mathbf{H}^{(2)} \end{pmatrix}$$

gdzie $\mathbf{H}^{(2)}$ sprowadza wektor $z^{(2)} = (a^{(2)}_{21}, \ldots, a^{(2)}_{(n-1)1})^{\mathrm{T}}$ do postaci

$$\alpha^{(2)} \|z^{(2)}\|_2 (1, 0, \ldots, 0)^{\mathrm{T}}_{1\times(n-2)}$$

- obliczamy macierz

$$\mathbf{M}^{(3)} = \mathbf{P}^{(2)}\mathbf{M}^{(2)}\mathbf{P}^{(2)} = \begin{pmatrix} b_1 & a_1 & 0 & \dots & 0 \\ a_1 & b_2 & a_2 & \dots & 0 \\ 0 & a_2 & & & \\ \vdots & \vdots & & \mathbf{A}^{(3)}_{(n-2)\times(n-2)} & \\ 0 & 0 & & & \end{pmatrix}$$

Po $(n-2)$ takich przekształceniach uzyskamy poszukiwaną macierz trójdiagonalną

$$\mathbf{M}^{(n-2)} = \mathbf{T}$$



Konkretna postać macierzy ortogonalnych:

$$\mathbf{P}^{(k)} = \mathbf{I} - \frac{1}{\eta^{(k)}} w^{(k)} (w^{(k)})^{\mathrm{T}}$$

przy czym

$$w_l^{(k)} = \begin{cases} 0, & l \leq k \\ A_{k,k+1}^{(k-1)} + \alpha^{(k)}, & l = k+1 \\ A_{kl}^{(k-1)}, & l \geq k+2 \end{cases}$$

oraz

$$\alpha^{(k)} = \pm \sqrt{\sum_{l=k+1}^{n} \left[A_{kl}^{(k-1)}\right]^2}, \quad \eta^{(k)} = \alpha^{(k)} \left[\alpha^{(k)} + A_{k,k+1}^{(k-1)}\right]$$



**Przykład**

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 4 \\ 3 & 1 & 2 \\ 4 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

Obliczamy

$$\alpha^{(1)} = \sqrt{\sum_{l=2}^{3} A_{1l}^2} = 5, \quad \eta^{(1)} = \alpha^{(1)}(\alpha^{(1)} + A_{12}) = 40$$

oraz

$$w_1^{(1)} = 0, \quad w_2^{(1)} = A_{21} + \alpha^{(1)} = 8, \quad w_3^{(1)} = A_{31} = 4$$



Stąd

$$\mathbf{P}^{(1)} = \mathbf{I} - \frac{1}{\eta^{(1)}} w^{(1)} (w^{(1)})^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ 0 & -\frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix}$$

co prowadzi do

$$\mathbf{P}^{(1)}\mathbf{A}\mathbf{P}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & -5 & 0 \\ -5 & \frac{73}{25} & \frac{14}{25} \\ 0 & \frac{14}{25} & -\frac{23}{25} \end{pmatrix}$$

$$\|\mathbf{T} - \tilde{\mathbf{T}}\|_E \leq 2k_1 n^2 \epsilon (1 + k_1 \epsilon n)^{2n} \|\mathbf{A}\|_E$$

$\tilde{\mathbf{T}}$ - dokładna macierz trójdiagonalna

$k_1$ - stała zależna od sposobu zaokrąglania

Liczba działań

- $M = \frac{2}{3}n^3 + O(n^2)$ mnożeń
- $D = \frac{2}{3}n^3 + O(n^2)$ dodawań
- $P = n - 2$ pierwiastkowań



## Metoda Kryłowa

**Przykład**

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1,00 & 0,01 \\ 0,01 & 1,00 \end{pmatrix}$$

Macierz jest symetryczna - zagadnienie własne jest na pewno dobrze uwarunkowane:

$$\lambda_1 = 1,01, \quad \lambda_2 = 0,99$$

Jeśli

$$\delta\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \epsilon_2 \\ \epsilon_3 & \epsilon_4 \end{pmatrix}$$

a $\lambda_1(\epsilon)$ jest większą z wartości własnych macierzy $\mathbf{A} + \delta\mathbf{A}$, to



$$\lambda_1(\epsilon) = 1,01 - \frac{1}{2}\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3 - \frac{1}{2}\epsilon_4 + O(\max\{|\epsilon_1|, |\epsilon_2|, |\epsilon_3|, |\epsilon_4|\}).$$

Jeśli jednak wyznaczymy wielomian charakterystyczny macierzy $\mathbf{A}$,

$$w_2(\lambda) = \lambda^2 - 2\lambda + 0,9999,$$

to większy z pierwiastków równania

$$\lambda^2 + (-2 + \delta_1)\lambda + (0,9999 + \delta_2) = 0$$

spełnia warunek

$$\lambda_1(\delta) = 1,01 - 50,5\delta_1 - 50\delta_2 + O(\max\{|\delta_1|, |\delta_2|\})$$



## Metoda potęgowa

1. Dla $i = 0$ , wybieramy dowolny wektor $x_0$ taki, że $\|x_0\|_\infty = 1$. Ustalamy maks. liczbę iteracji $IMAX$.
2. Obliczamy
$$v_{i+1} = \mathbf{A}x_i, \quad m_{i+1} = \|v_{i+1}\|_\infty$$
Jeżeli $m_{i+1} = 0$, przerywamy obliczenia, jeśli nie, to
$$x_{i+1} = \frac{v_{i+1}}{m_{i+1}}$$
3. Jeśli $i + 1 \geq IMAX$, przerywamy obliczenia. W przeciwnym razie zwiększamy $i$ o jeden i wracamy do punktu 2.

Ciąg wektorów $x_0, x_2, \ldots, x_{2j}, \ldots$ jest zbieżny do wektora $x$

$\Rightarrow$ ciąg wartości $m_1, m_3, \ldots$ jest zbieżny do $m$

Jeśli

$$\|x_{2j+2} - x_{2j}\| \to 0,$$

to

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

W przeciwnym razie

$$\|x_{2j+2} - x_{2j}\| \to 2, \quad \mathbf{A}x = -mx$$



Niech

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P} = \mathbf{D}$$

przy czym

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{pmatrix}$$



**Twierdzenie** Jeśli wśród wartości własnych $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ macierzy $\mathbf{A}$ nie ma różnych wartości własnych o równych modułach (tzn. nie można wskazać takich $\lambda_i \neq \lambda_j$, że $|\lambda_i| = |\lambda_j|$), to przy dowolnym wyborze wektora startowego $x_0$ ciąg wektorów $x_0, x_2, \ldots$ jest zbieżny (zakładamy przy tym, że działania są wykonywane dokładnie).



## Algorytm $QR$ dla macierzy Hessenberga

**Definicja** Górną macierzą Hessenberga nazywamy macierz

$$\mathbf{H} = \mathbf{T} + \mathbf{U},$$

gdzie $\mathbf{T}$ jest macierzą trójdiagonalną, a $\mathbf{U}$ - macierzą trójkątną górną.

**Twierdzenie** Każdą macierz kwadratową $\mathbf{A}$ można przedstawić w postaci iloczynu macierzy ortogonalnej $\mathbf{Q}$ i macierzy trójkątnej górnej $\mathbf{R}$,

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{R}.$$

Określamy ciąg macierzy

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}^{(1)},\ \mathbf{H}^{(2)}, \ldots$$

w następujący sposób:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{(i)} &= \mathbf{Q}^{(i)}\mathbf{R}^{(i)}, \\ \mathbf{H}^{(i+1)} &= \mathbf{R}^{(i)}\mathbf{Q}^{(i)} \end{aligned}$$

dla $i = 1, 2, \ldots$



- ⇒ wszystkie macierze $\mathbf{Q}^{(i)}$ oraz $\mathbf{H}^{(i)}$, $i = 1, 2, \ldots$ są macierzami Hessenberga
- ⇒ jeśli wartości własne macierzy $\mathbf{H}$ są rzeczywiste i różne (także co do modułu), wówczas elementy pod diagonalą macierzy $\mathbf{H}^{(i)}$ zanikają i macierze te upodobniają się do macierzy trójkątnej
- ⇒ wszystkie macierze $\mathbf{H}^{(i)}$ są podobne, ponieważ

$$\mathbf{H}^{(i+1)} = \left(\mathbf{Q}^{(i)}\right)^{\mathrm{T}} \mathbf{H}^{(i)}\mathbf{Q}^{(i)},$$

- ⇒ elementy na diagonali są zbieżne do wartości własnych macierzy $\mathbf{H}$



Jeżeli macierz $\mathbf{H}$ ma pojedyncze wartości własne $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ takie, że są między nimi pary sprzężone, to nie wszystkie elementy pod diagonalą macierzy $\mathbf{H}^{(i)}$ dążą do zera, lecz

$$h^{(i)}_{j,j-1} h^{(i)}_{j+1,j} \xrightarrow{i\to\infty} 0.$$

Wówczas w granicy otrzymamy np. macierz

$$\mathbf{H}^{(\infty)} = \begin{pmatrix} * & * & \cdot & \cdot & \cdot \\ * & * & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & * & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \end{pmatrix}$$



Uwaga:

- W przypadku ogólnym $\mathbf{H}^{(i)}$ nie musi dążyć do postaci trójkątnej lub prawie trójkątnej.
- Jeżeli zbieżność jest wolna, można zastosować przesunięcie wartości własnych w następujący sposób:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{(i)} - k_i\mathbf{I} &= \mathbf{Q}^{(i)}\mathbf{R}^{(i)}, \\ \mathbf{H}^{(i+1)} &= \mathbf{R}^{(i)}\mathbf{Q}^{(i)} + k_i\mathbf{I}. \end{aligned}$$

Dzięki odpowiedniemu dobraniu przesunięcia $k_i$ można uzyskać dużo szybszą zbieżność elementów macierzy $\mathbf{H}^{(i)}$.

## Sprowadzanie macierzy do postaci Hessenberga

- metoda Givensa
- metoda Householdera
- metoda eliminacji Gaussa



Na macierzy $\mathbf{A}_{n\times n}$ dokonujemy $(n-2)$ przekształceń, uzyskując kolejno macierze

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^{(1)},\ \mathbf{A}^{(2)},\ \ldots,\ \mathbf{A}^{(n-2)} = \mathbf{H},$$

gdzie $\mathbf{H}$ jest poszukiwaną macierzą Hessenberga

Załóżmy, że mamy już wyznaczoną macierz $\mathbf{A}^{(i)}$, której $(i-1)$ początkowych kolumn jest równe $(i-1)$ kolumnom macierzy $\mathbf{H}$:



1. Wybieramy element o największym module spośród $a^{(i)}_{i+1,i}$, $\ldots$, $a^{(i)}_{n,i}$. Jeśli są same elementy zerowe, to przyjmujemy $\mathbf{A}^{(i)} = \mathbf{A}^{(i+1)}$ i przystępujemy do wyznaczenia kolejnej macierzy. Gdy element o maksymalnym module znajduje się w $k$–tym wierszu ($k \geq i$), przestawiamy wiersze i kolumny o numerach $k$ oraz $i+1$.



2. Obliczamy mnożniki

$$m^{(i)}_j = \frac{a^{(i)}_{j,i}}{a^{(i)}_{i+1,i}},\quad j = i+2,\ i+3,\ \ldots,\ n.$$

3. Od $j$–tego wiersza odejmujemy $(i+1)$–szy wiersz pomnożony przez $m^{(i)}_j$ oraz do $(i+1)$–szej kolumny dodajemy $j$-tą kolumnę pomnożoną przez $m^{(i)}_j$, $j = i+2,\ldots,n$. Uzyskana macierz $\mathbf{A}^{(i+1)}$ jest podobna do $\mathbf{A}^{(i)}$, a elementy $a^{(i+1)}_{i+2,i}$, $a^{(i+1)}_{i+3,i}$, $\ldots$, $a^{(i+1)}_{n,i}$ są równe zeru, co powoduje, że $i$–ta kolumna macierzy $\mathbf{A}^{(i+1)}$ jest równa $i$–tej kolumnie macierzy $\mathbf{H}$.

## Rozkład macierzy na iloczyn $\mathrm{QR}$

**Twierdzenie** Każdą macierz $\mathbf{A}_{m\times n}$, $m \le n$ posiadającą $k \le n$ liniowo niezależnych kolumn można przedstawić w postaci iloczynu

$$\mathbf{A} = \mathbf{QR},$$

gdzie $\mathbf{Q}_{m\times k}$ jest macierzą ortogonalną, a $\mathbf{R}_{k\times n}$ jest macierzą trapezoidalną górną.

**Definicja** Macierz $\mathbf{R}$ nazywamy trapezoidalną górną, jeżeli wszystkie elementy tej macierzy znajdujące się pod diagonalą są równe zeru,

$$r_{ij} = 0, \quad i > j.$$



Ortogonalizacja Grama–Schmidta:

$\mathbf{A}^{(1)}$, $\mathbf{A}^{(2)}$, $\ldots$, $\mathbf{A}^{(n)}$ - macierze złożone z 1, 2, $\ldots$, n początkowych kolumn macierzy $\mathbf{A}$

Zakładamy, że kolumna $a_1$ niezerowa:

$$\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{Q}^{(1)}\mathbf{R}^{(1)},$$

gdzie

$$\mathbf{Q}^{(1)} = \left[\frac{a_1}{\|a_1\|_2}\right], \quad \mathbf{R}^{(1)} = [\|a_1\|_2]$$



Jeżeli wyznaczyliśmy już rozkład $\mathbf{A}^{(i)} = \mathbf{Q}^{(i)}\mathbf{R}^{(i)}$, to dla macierzy

$$\mathbf{A}^{(i+1)} = \left[\mathbf{A}^{(i)} a_{i+1}\right]$$

mamy

$$\mathbf{A}^{(i+1)} = \mathbf{Q}^{(i+1)}\mathbf{R}^{(i+1)},$$

gdzie

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}^{(i+1)} &= \left[\mathbf{Q}^{(i)} q_{i+1}\right] \\ \mathbf{R}^{(i+1)} &= \begin{bmatrix} \mathbf{R}^{(i)} & r_{i+1} \\ 0 & s_{i+1} \end{bmatrix} \end{aligned}$$



Wektory $q_{i+1}$ i $r_{i+1}$, oraz liczba $s_{i+1}$ dane są wzorami:

$$\begin{aligned} r_{i+1} &= \left(\mathbf{Q}^{(i)}\right)^{\mathrm{T}} a_{i+1} \\ p_{i+1} &= a_{i+1} - \mathbf{Q}^{(i)} r_{i+1} \\ s_{i+1} &= \|p_{i+1}\|_2, \end{aligned}$$

oraz, jeżeli $s_{i+1} = 0$, to

$$\mathbf{Q}^{(i+1)} = \mathbf{Q}^{(i)},$$

w przeciwnym razie

$$q_{i+1} = \frac{p_{i+1}}{s_{i+1}}, \quad i = 1, 2, \ldots, n-1$$

Nakład obliczeń:

- $M = n^3 + n$ mnożenia
- $D = n^3 - \frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n$ dodawania
- $P = n$ pierwiastkowania



## Wektory własne w metodzie QR

Dla danej macierzy $\mathbf{A}$

- wyznaczamy najpierw macierz $\mathbf{P}$ taką, że

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P} = \mathbf{H}$$

- wyznaczamy ciąg macierzy $\mathbf{H}^{(i)}$
- równocześnie z macierzą

$$\mathbf{H}^{(i+1)} = \left(\mathbf{Q}^{(i)}\right)^{\mathrm{T}} \mathbf{H}^{(i)}\mathbf{Q}^{(i)}$$

wyznaczamy macierz pomocniczą

$$\mathbf{Z}^{(i+1)} = \mathbf{Z}^{(i)}\mathbf{Q}^{(i)}, \quad \mathbf{Z}^{(1)} = \mathbf{P}$$



Gdy macierz $\mathbf{H}^{(N)}$ jest dostatecznie bliska macierzy trójkątnej górnej, obliczamy jej wektory własne ze wzoru:

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

Wektory własne macierzy $\mathbf{A}$ będą dane wzorem

$$y^{(k)} = Z^{(N)} x^{(k)}$$



## GNU Scientific Library

Zasoby w sieci:

`http://www.gnu.org/software/gsl`

Użycie:

- `#include <gsl/gsl_math.h>`
- `gcc -o test test.c -L/usr/lib -lgsl -lgslcblas`

## GSL - Wektory

Alokacja:

- `gsl_vector * gsl_vector_alloc(size_t n)`
- `gsl_vector * gsl_vector_calloc(size_t n)`
- `void gsl_vector_free(gsl_vector * v)`

Dostęp do elementów:

- `double gsl_vector_get(const gsl_vector * v, size_t i)`
- `void gsl_vector_set(gsl_vector * v, size_t i, double x)`



## GSL - Macierze

Alokacja:

- `gsl_matrix * gsl_matrix_alloc(size_t n1, size_t n2)`
- `gsl_matrix * gsl_matrix_calloc(size_t n1, size_t n2)`
- `void gsl_matrix_free(gsl_matrix * m)`

Dostęp do elementów macierzy

- ```
  double gsl_matrix_get(const gsl_matrix * m,
           size_t i, size_t j)
  ```
- ```
  void gsl_matrix_set(gsl_matrix * m,
           size_t i, size_t j, double x)
  ```



## GSL - trójdiagonalizacja i rozkład QR

- ```
  int gsl_linalg_symmtd_decomp(gsl_matrix * A,
          gsl_vector * tau)
  ```
- ```
  int gsl_linalg_symmtd_unpack_T(const gsl_matrix * A,
          gsl_vector * diag, gsl_vector * subdiag)
  ```
- `int gsl_linalg_QR_decomp(gsl_matrix * A, gsl_vector * tau)`