Problem lastnih vrednosti

Uvod

- Naj bo $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Paru $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}$, $\boldsymbol{x} \neq \mathbf{0}$, $\lambda \in \mathbb{C}$ rečemo lastni par za A ,če je
$$A\,\boldsymbol{x} = \lambda\,\boldsymbol{x}.$$
Skalar λ je lastna vrednost, vektor $\boldsymbol{x}$ pa (desni) lastni vektor.
- Neničelni vektor $\boldsymbol{y}$ je levi lastni vektor, če je
$$\boldsymbol{y}^H A = \lambda\,\boldsymbol{y}^H,$$
kjer je ^{H} Hermitsko transponiranje (konjugiranje in navadno transponiranje).
- Dovolj je obravnavati problem desnih lastnih vektorjev.

Lema

Levi in desni lastni vektorji matrike A, ki pripadajo različnim lastnim vrednostim, so ortogonalni.

- Iskanje lastnih vrednosti preko karakterističnega polinoma $\det(A - \lambda I)$ ni dober pristop.
- Poznamo različne stabilne algoritme za računanje lastnih vrednosti in lastnih vektorjev. Izbor algoritma je odvisen od tega, kaj želimo izračunati:
  - Ali je matrika majhna in polna, ali velika in razpršena?
  - Ali je matrika simetrična (hermitska)?
  - Ali potrebujemo vse lastne vrednosti?
  - Ali poleg lastnih vrednosti potrebujemo tudi lastne vektorje?

Izrek

Za vsako matriko A obstajata unitarna matrika U in zgornja trikotna matrika T, da je $U^H A U = T$ (Schurova forma).

Izrek

Za vsako realno matriko A obstajata ortogonalna matrika Q in kvazi zgornja trikotna matrika T, da je $Q^T A Q = T$.

Opomba

Matrika T je kvazi zgornja trikotna v smislu, da ima samo na nekaterih diagonalnih mestih bloke 2×2, sicer pa je prava zgornja trikotna (ti bloki ustrezajo kompleksnim lastnim vrednostim).

Potenčna metoda

- Izberimo normirani vektor $\mathbf{z}_0$ in generirajmo

$$\mathbf{y}_{k+1} = A\,\mathbf{z}_k, \quad \mathbf{z}_{k+1} = \frac{1}{\|\mathbf{y}_{k+1}\|}\mathbf{y}_{k+1}, \quad k = 0, 1, \ldots$$

- Dobimo zaporedje normiranih vektorjev, za katere se izkaže, da pogosto konvergirajo k lastnemu vektorju matrike A.

Izrek

Naj bo λ_1 dominantna lastna vrednost matrike A, torej

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_n|.$$

Če $\mathbf{z}_0$ ni lastni vektor za kakšno od lastnih vrednosti λ_j, $j > 1$, potem zaporedje vektorjev $\mathbf{z}_k$ po smeri konvergira k lastnemu vektorju, ki pripada λ_1.

Opomba

Metodo lahko predelamo tudi za primere:

- $|\lambda_1| = |\lambda_2| > |\lambda_3| \geq \cdots \geq |\lambda_n||$ *in* $\lambda_1 = -\lambda_2$.
- $|\lambda_1| = |\lambda_2| > |\lambda_3| \geq \cdots \geq |\lambda_n||$ *in* $\lambda_1 = \overline{\lambda_2}$.

- Kako končati iteracijo? Pogoj zaustavljanja

$$\|\mathbf{z}_{k+1} - \mathbf{z}_k\| \leq \varepsilon$$

  ni dober, ker zapordje konvergira le po smeri.

- Izkaže se, da pomembno vlogo pri pogoju zaustavitve igra Rayleighov kvocient

$$\rho(\mathbf{x}, A) = \frac{\mathbf{x}^H A \, \mathbf{x}}{\mathbf{x}^H \mathbf{x}}.$$

- Iteracijo ustavimo, ko je

$$\|A\,\mathbf{z}_k - \rho_k\,\mathbf{z}_k\| \leq \varepsilon,$$

  kjer je

$$\rho_k := \rho(\mathbf{z}_k, A).$$

- Hitrost konvergene je linearna. Odvisna je od razmerja $|\lambda_2|/|\lambda_1|$. Čim bližje je razmerje 0, tem hitrejša je konvergenca.
- Ko poiščemo dominantno lastno verdnost λ_1, lahko problem reduciramo na iskanje naslednjih lastnih vrednosti (po velikosti).

- Hotelingova redukcija za $A = A^T$. Definiramo

$$B := A - \lambda_1 \boldsymbol{x}_1 \boldsymbol{x}_1^\top .$$

kjer je $(\lambda_1, \boldsymbol{x}_1)$, $\|\boldsymbol{x}_1\|_2 = 1$, dominantni lastni par za A. Velja: $B\,\boldsymbol{x}_1 = \mathbf{0}$ in $B\,\boldsymbol{x}_k = \lambda_k\,\boldsymbol{x}_k$, $k \neq 1$. Potenčna metoda na B nam sedaj da drugo dominantno lastno vrednost matrike A. Pri tem matrike B ne izračunamo eksplicitno, saj je

$$B\,\boldsymbol{z} = A\,\boldsymbol{z} - \lambda_1(\boldsymbol{x}_1^\top \boldsymbol{z})\boldsymbol{x}_1.$$

- Householderjeva redukcija za splošno matriko.
  Poiščemo ortogonalno matriko Q, da je $Q\,\boldsymbol{x}_1 = k\,\boldsymbol{e}_1$ (Householderjevo zrcaljenje).
  Matrika $B = Q\,A\,Q^\top$ ima obliko

$$B = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \boldsymbol{b}^\top \\ \boldsymbol{0} & C \end{bmatrix}.$$

  Lastne vrednosti matrike C pa se ujemajo s preostalimi lastnimi vrednostmi matrike A.

Inverzna iteracija

- Največja lastna vrednost matrike A je hkrati najmanjša lastna vrednost matrike A^{-1}.
- Če iščemo najmanjšo lastno vrednost, lahko torej uporabimo potenčno metodo na matriki A^{-1}.
- Namesto množenja $\boldsymbol{y}_{k+1} = A^{-1}\boldsymbol{z}_k$ seveda rešujemo sistem $A\,\boldsymbol{y}_{k+1} = \boldsymbol{z}_k$.
- Vemo, da je Rayleighov kvocient najboljši približek za lastno vrednost, če poznamo približek za lastni vektor.
- Kaj pa obratno? Denimo, da je σ približek za lastno vrednost. Kako izračunati pripadajoči lastni vektor?
- Rešitev: Izvajamo inverzno iteracijo na matriki $A - \sigma\, I$.
- Če je σ točna lastna vrednost, pričakujemo težave, a v praksi nas iz tega spet rešijo numerične napake.

QR iteracija

- QR iteracija je trenutno najboljša numerična metoda za izračun vseh lastnih vrednosti splošne nesimetrične matrike.
- Osnovna varianta metode je

$$
\begin{aligned}
&A_0 = A\\
&k = 0, 1, \ldots\\
&\quad A_k = Q_k R_k \ (\text{QR razcep})\\
&\quad A_{k+1} = R_k Q_k
\end{aligned}
$$

Lema

Če ima matrika A lastne vrednosti s paroma različnimi absolutnimi vrednostmi, potem zaporedje matrik A_k konvergira proti Schurovi formi.

- Za uporabno verzijo QR iteracije potrebujemo nekaj izboljšav:
  - Matriko A najprej reduciramo na zgornjo Hessenbergovo z ortogonalnimi podobnostnimi transformacijami (Householder ali Givens).
  - QR iteracijo potem uporabimo na zgornji Hessenbergovi obliki, saj velja spodnja trditev:

Lema

Če je A zgornja Hessenbergova, se njena oblika med QR iteracijo ohranja.

- Ker je hitrost konvergence odvisna od razmerja med lastnimi vrednostmi, metodo izboljšamo s premiki.

Metode za simetrične matrike

- Za simetrične matrike poznamo posebne metode, ki izkoriščajo simetrijo in lastnosti simetričnih matrik.
- Večina temelji na dejstvu, da se da simetrično matriko ortogonalno podobno pretvoriti na simetrično tridiagonalno matriko (za simetrične matrike je zgornja Hessenebergova oblika v resnici tridiagonalna).
- Zato lahko predpostavimo, da je matrika A že simetrična tridiagonalna.
- Uporabimo lahko kar QR iteracijo s premikom.
- Sturmovo zaporedje.
- Jacobijeva matoda.

Sturmovo zaporedje

- Naj bo

$$T = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ b_1 & a_2 & b_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & b_{n-2} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & b_{n-1} & a_n \end{bmatrix}$$

  ireducibilna ($b_i \neq 0, i = 1, 2, \ldots, n-1$) tridiagonalna simetrična matrika.

- Naj bo T_r vodilna $r \times r$ podmatrika matrike T in

$$f_r(\lambda) = \det(T_r - \lambda\, I).$$

  Velja

$$f_{r+1}(\lambda) = (a_{r+1} - \lambda)\, f_r(\lambda) - b_r^2\, f_{r-1}(\lambda),$$

  kjer je $f_0(\lambda) = 1,\ f_1(\lambda) = a_1 - \lambda$.

Izrek

Polinomi f_r, $r = 0, 1, \ldots, n$, *tvorijo Sturmovo zaporedje, kar pomeni, da zanje velja:*

1. $f_0(\lambda) \neq 0$, *za vsak* λ.
2. *Če je* $f_r(\lambda_0) = 0$ *za* $r < n$, *potem je* $f_{r-1}(\lambda_0) f_{r+1}(\lambda_0) < 0$.
3. *Če je* $f_n(\lambda_0) = 0$, *potem je* $f_{n-1}(\lambda_0) f_n'(\lambda_0) < 0$.

Posledica

Ireducibilna tridiagonalna simetrična matrika ima enostavne lastne vrednosti.

- Pri fiksem λ_0 označimo z $u(\lambda_0)$ število ujemanj predznakov v zaporedju števil $f_r(\lambda_0)$, $r = 0, 1, \ldots, n$. Pri tem vsako notranjo ničlo štejemo za eno ujemanje, ničlo na koncu pa ne.

Lema

Število $u(\lambda_0)$ je enako številu lastnih vrednosti matrike T, ki so strogo večje od λ_0.

- Sedaj lahko k-to lastno vrednost po velikosti poiščemo z bisekcijo.
- Število λ_k je namreč približek za k-to lastno vrednost, če je $u(\lambda_k - \varepsilon) = k$ in $u(\lambda_k + \varepsilon) = k - 1$.
- Metoda je torej še posebej primerna za iskanje natančno določene lastne vrednosti (recimo tretje po velikosti).

Jacobijeva iteracija

- Matrike ne reduciramo na tridagonalno obliko.
- Z množenji z Givensovimi rotacijami z leve in desne jo poskušamo spremeniti v diagonalno.
- Če želimo v matriki A uničiti element na mestu (p,q), poiščemo givensovo rotacijo

$$R = \begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix},$$

da bo

$$R^\top \begin{bmatrix} a_{pp} & a_{pq} \\ a_{pq} & a_{qq} \end{bmatrix} R = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}.$$

- Izkaže se, da je

$$c = \sqrt{\frac{1}{1+t^2}}, \quad s = c\,t,$$

kjer je

$$t = \frac{\operatorname{sign}(\tau)}{|\tau| + \sqrt{1+\tau^2}}, \quad \tau = \frac{a_{pp} - a_{qq}}{2\,a_{pq}}.$$

Definicija

Za matriko $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ definiramo

$$\operatorname{off}(A) = \sqrt{\sum_{\substack{j,k=1\\ j\neq k}}^{n} |a_{jk}|^2}.$$

Vrednost $\operatorname{off}(A)$ je Frobeniusova norma matrike A brez diagonale.

Lema

Če je matrika A' dobljena iz A z enim korakom Jacobijeve metode na elementu (p,q), je

$$\mathrm{off}(A')^2 = \mathrm{off}(A)^2 - 2\,a_{pq}^2.$$

- Z vsako Jacobijevo rotacijo se torej $\mathrm{off}(A)$ zmanjša. Postopek ponavljamo, dokler ni $\mathrm{off}(A) \leq \varepsilon$.
- Variante:
  - Klasična varianta: uničujemo po absolutni vrednosti največji izvendiagonalni element.
  - Ciklična varianta: vedno uničujemo v enakem vrstnem redu vse elemente izven diagonale.
  - Pragovna varianta: vedno uničujemo v enakem vrstnem redu, a le elemente, ki po absolutni vrednosti presegajo neko predpisano (majhno) mejo.