7.2 Rayleighova iteracija

Če inverzno iteracijo kombiniramo z Rayleighovim kvocientom, dobimo naslednji algoritem:

izberi $z_0 \neq 0$
$k = 0, 1, \ldots$
  $\sigma_k = \rho(z_k, A)$
  reši $(A - \sigma_k I)y_{k+1} = z_k$
  $z_{k+1} = \frac{y_{k+1}}{\|y_{k+1}\|_2}$

Namesto fiksnega premika σ pri inverzni iteraciji uporabljamo Rayleighov kvocient, ki je najboljši približek za lastno vrednost danega vektorja.

Metoda ni omejena le na simetrične matrike, lahko jo uporabimo tudi za nesimetrične. Pokazati se da, da je konvergenca Rayleighove iteracije v bližini enostavne lastne vrednosti kvadratična, v primeru simetrične matrike pa celo kubična.

Lema 7.7 *Naj bo normiran vektor z_0 približek za lastni vektor x_1. Če za simetrično matriko A z lastnimi vrednostmi $|\lambda_n| \leq \cdots \leq |\lambda_2| < |\lambda_1|$ izvedemo en korak potenčne metode z začetnim vektorjem z_0, potem velja*

$$\|z_1 \pm x_1\|_2 \leq \frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|}\|z_0 - x_1\|_2,$$

kjer predznak $\pm$ izberemo tako, da je norma razlike manjša.

Dokaz. Brez škode za splošnost lahko predpostavimo, da je $\lambda_1 > 0$. Če vektor z_0 razvijemo po lastnih vektorjih, dobimo $z_0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i x_i$, kjer je $\alpha_1 \approx 1$. Od tod sledi $z_1 = \sum_{i=1}^n \beta_i x_i$, kjer je

$$\beta_1 = \frac{\alpha_1 \lambda_1}{\left(\sum_{i=1}^n \alpha_i^2 \lambda_i^2\right)^{1/2}} = \frac{1}{\left(1 + \sum_{i=2}^n \left(\frac{\alpha_i}{\alpha_1}\right)^2 \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^2\right)^{1/2}}.$$

Velja $\|z_0 - x_1\|_2^2 = 2(1 - \alpha_1)$ in podobno $\|z_1 \pm x_1\|_2^2 = 2(1 - \beta_1)$. Sedaj lahko ocenimo

$$\beta_1 \approx 1 - \frac{1}{2}\sum_{i=2}^n \left(\frac{\alpha_i}{\alpha_1}\right)^2 \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^2,$$

torej

$$1 - \beta_1 \approx \frac{1}{2}\sum_{i=2}^n \left(\frac{\alpha_i}{\alpha_1}\right)^2 \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^2 \leq \frac{1}{2}\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^2 \sum_{i=2}^n \alpha_i^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^2 (1 - \alpha_1^2).$$

Tako dobimo

$$\|z_1 \pm x_1\|_2^2 = 2(1 - \beta_1) \leq \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^2 (1 + \alpha_1)(1 - \alpha_1) \leq \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^2 2(1 - \alpha_1) = \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^2 \|z_0 - x_1\|_2^2$$

in lema je dokazana. ∎

Posledica 7.8 *Naj bo A simetrična matrika in* $|\lambda_i - \sigma| \ll |\lambda_j - \sigma|$ *za* $j \neq i$, $j = 1, \ldots, n$. *Če izvedemo en korak inverzne iteracije z začetnim vektorjem* z_0, *potem velja*

$$\|z_1 - x_i\|_2 = \mathcal{O}(|\lambda_i - \sigma| \cdot \|z_0 - x_1\|_2).$$

Lema 7.9 *Naj bo A simetrična matrika in naj bo normiran vektor z približek za lastni vektor* x_k. *Potem velja*

$$|\lambda_k - \rho(z, A)| \leq 2\|A\|_2 \|z - x_k\|_2.$$

Dokaz. Brez škode za splošnost lahko predpostavimo, da je $k = 1$. Če vektor z razvijemo po lastnih vektorjih kot $z = \sum_{i=1}^n \alpha_i x_i$, potem je $\|z - x_1\|_2^2 = 2(1 - \alpha_1)$. Za razliko Rayleighovega kvocienta dobimo

$$\lambda_1 - \rho(z, A) = \lambda_1 \sum_{i=1}^n \alpha_i^2 - \sum_{i=1}^n \lambda_i \alpha_i^2 = \sum_{i=2}^n (\lambda_1 - \lambda_i)\alpha_i^2$$

in ocenimo

$$|\lambda_1 - \rho(z, A)| \leq 2\|A\|_2 \sum_{i=2}^n \alpha_i^2 = 2\|A\|_2(1 - \alpha_1^2) \leq 4\|A\|_2(1 - \alpha_1) = 2\|A\|_2\|z - x_1\|_2^2.$$ ■

Izrek 7.10 *Naj bo A simetrična matrika. Potem ima Rayleighova iteracija v bližini enostavne lastne vrednosti kubični red konvergence.*

Dokaz. Naj Rayleighova iteracija konvergira k enostavni lastni vrednosti λ_k s pripadajočim lastnim vektorjem x_k. Po enem koraku Rayleighove iteracije po posledici 7.8 velja

$$\|z_1 - x_k\|_2 = \mathcal{O}(|\lambda_k - \sigma_0| \cdot \|z_0 - x_k\|_2).$$

Ker po lemi 7.9 velja tudi

$$|\lambda_k - \rho(z_0, A)| \leq 2\|A\|_2 \|z_0 - x_k\|_2,$$

oceni skupaj data $\|z_1 - x_k\|_2 = \mathcal{O}(\|z_0 - x_k\|_2^3)$ in konvergenca je res kubična. ■

Zgled 7.1 *Naj bo* $A = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}$, $\lambda_1 > \lambda_2$ *in* $z_r = \begin{bmatrix} c_r \\ s_r \end{bmatrix}$, $\|z_r\|_2^2 = c_r^2 + s_r^2 = 1$. *Pri enem koraku Rayleighove iteracije dobimo*

$$\sigma_r = z_r^T A z_r = c_r^2 \lambda_1 + s_r^2 \lambda_2.$$

Iz sistema

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 - c_r^2\lambda_1 - s_r^2\lambda_2 & 0 \\ 0 & \lambda_2 - c_r^2\lambda_1 - s_r^2\lambda_2 \end{bmatrix} y_{r+1} = z_r$$

dobimo

$$y_{r+1} = \frac{1}{(\lambda_1 - \lambda_2)c_r^2 s_r^2} \begin{bmatrix} c_r^3 \\ -s_r^3 \end{bmatrix},$$

od tod pa

$$z_{r+1} = \frac{1}{\sqrt{c_r^6 + s_r^6}} \begin{bmatrix} c_r^3 \\ -s_r^3 \end{bmatrix}.$$

Od tod v primeru $s_r \neq c_r$ *sledi kubična konvergenca proti* e_1 *oziroma* e_2. □

7.3 QR iteracija za simetrični lastni problem

V primeru simetrične matrike je zgornja Hessenbergova matrika tridiagonalna. Za redukcijo na tridiagonalno obliko sicer zaradi simetrije porabimo približno polovico toliko operacij kot za nesimetrično matriko, a to še vedno pomeni $\mathcal{O}(n^3)$ operacij. Med samo QR iteracijo pa je razlika večja. Zaradi tridiagonalne oblike lahko en korak QR iteracije sedaj izvedemo z zahtevnostjo $\mathcal{O}(n)$, medtem ko imamo pri zgornji Hessenbergovi obliki, ki nastopa pri nesimetričnem primeru, $\mathcal{O}(n^2)$ operacij.

Pri QR iteraciji torej najprej poiščemo ortogonalno matriko Q, da je $T = QAQ^T$ tridiagonalna, potem pa delamo QR z enojnim premikom:

$T_0 = T$
$k = 0, 1, \ldots$
  izberi premik σ_k
  $T_k - \sigma_k I = Q_k R_k$ (izračunaj QR razcep)
  $T_{k+1} = R_k Q_k + \sigma_k I$

Naj bo

$$T_k = \begin{bmatrix} a_1^{(k)} & b_1^{(k)} & & & \\ b_1^{(k)} & a_2^{(k)} & b_2^{(k)} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & b_{n-2}^{(k)} & a_{n-1}^{(k)} & b_{n-1}^{(k)} \\ & & & b_{n-1}^{(k)} & a_n^{(k)} \end{bmatrix}.$$

Kako izberemo premik:

- *Rayleighov premik*: vzamemo $\sigma_k = a_n^{(k)} = \rho(e_n, T_k)$. V tem primeru imamo za skoraj vse matrike zagotovljeno kubično konvergenco, a vseeno obstajajo primeri, ko metoda ne konvergira, če začetni približek ni dovolj dober.

  Zgled 7.2 *Primer matrike, za katero QR iteracija z Rayleighovim premikom ne konvergira, je* $T_0 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$. *V tem primeru je* $\sigma_0 = 0$ *in* $T_1 = T_0$. □

  Kubično konvergenco v bližini enostavnih lastnih vrednosti nam zagotavlja izrek 7.11, ki povezuje Rayleighovo iteracijo in QR iteracijo.

- *Wilkinsonov premik*: za σ_k vzamemo tisto lastno vrednost matrike $\begin{bmatrix} a_{n-1}^{(k)} & b_{n-1}^{(k)} \\ b_{n-1}^{(k)} & a_n^{(k)} \end{bmatrix}$, ki je bližja $a_n^{(k)}$. Sedaj imamo za vse matrike dokazano vsaj linearno konvergenco, v praksi pa imamo za skoraj vse matrike kubično konvergenco (a brez dokaza).

Izrek 7.11 *Če je T simetrična in delamo QR iteracijo z Rayleighovimi premiki, potem so premiki σ_k enaki Rayleighovim kvocientom, ki jih dobimo pri Rayleighovi iteraciji za matriko T, če za začetni vektor vzamemo $z_0 = e_n$.*

Dokaz. Najprej vpeljemo matrike $\overline{Q}_k = Q_0 Q_1 \cdots Q_k$ in $\overline{R}_k = R_k R_{k-1} \cdots R_0$, kjer so Q_i in R_i matrike iz QR iteracije. Pokažimo, da za vsak $k \geq 0$ velja

a) $T_{k+1} = \overline{Q}_k^T T \overline{Q}_k$,

b) $(T - \sigma_0 I) \cdots (T - \sigma_k I) = \overline{Q}_k \overline{R}_k$.

Točka a) sledi iz zveze $T_{k+1} = Q_k^T T_k Q_k$.

Pri točki b) uporabimo indukcijo. Za $k = 0$ očitno velja, saj je $T_0 - \sigma_0 I = Q_0 R_0$. Pokažimo, da če velja za $k-1$, potem velja tudi za $k \geq 1$. Res, produkt $\overline{Q}_k \overline{R}_k$ lahko pišemo kot

$$\begin{aligned}
\overline{Q}_k \overline{R}_k &= \overline{Q}_{k-1} Q_k R_k \overline{R}_{k-1} = \overline{Q}_{k-1}(T_k - \sigma_k I)\overline{R}_{k-1} \\
&= \overline{Q}_{k-1}\overline{Q}_{k-1}^T (T - \sigma_k I)\overline{Q}_{k-1}\overline{R}_{k-1} = (T - \sigma_k I)\overline{Q}_{k-1}\overline{R}_{k-1} \\
&= (T - \sigma_0 I) \cdots (T - \sigma_{k-1} I)(T - \sigma_k I).
\end{aligned}$$

Pri izpeljavi smo upoštevali točko a) in dejstvo, da matrike oblike $T - \sigma_i I$ med seboj komutirajo.

Sedaj lahko dokažemo, da za vsak k velja $\rho(e_n, T_k) = \rho(z_k, T)$. To je očitno res za $k = 0$. Vektor z_{k+1} iz Rayleighove iteracije zadošča enačbi $(T - \sigma_k I) z_{k+1} = \alpha_k z_k$, kjer skalar α_k izberemo tako, da bo $\|z_{k+1}\|_2 = 1$. Od tod rekurzivno sledi

$$(T - \sigma_0 I) \cdots (T - \sigma_k I) z_{k+1} = \beta_k e_n$$

za primerno izbran skalar β_k. Po točki b) to lahko zapišemo kot

$$\overline{R}_k^T \overline{Q}_k^T z_{k+1} = \beta_k e_n,$$

kjer smo upoštevali, da zaradi simetrije matrike T velja $\overline{Q}_k \overline{R}_k = \overline{R}_k^T \overline{Q}_k^T$. To pa pomeni, da je

$$z_{k+1} = \beta_k \overline{Q}_k \overline{R}_k^{-T} e_n.$$

Ker je matrika $\overline{R}_k^{-T}$ spodnja trikotna, ima vektor $\overline{R}_k^{-T} e_n$ smer e_n, od koder sledi $z_{k+1} = \overline{Q}_k e_n$. Od tod iz točke a) sledi

$$\rho(z_{k+1}, T) = \rho(\overline{Q}_k e_n, T) = \rho(e_n, \overline{Q}_k^T T \overline{Q}_k) = \rho(e_n, T_{k+1})$$

in izrek je dokazan. ■

7.4 Sturmovo zaporedje

Naj bo

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