11. Posplošeni problemi lastnih vrednosti

Dani sta kvadratni $n \times n$ matriki A in B.

Množico vseh matrik oblike $A - \lambda B$, kjer je $\lambda \in \mathbb{C}$, imenujemo *matrični šop* in označimo z (A, B) ali $A - \lambda B$.

Karakteristični polinom matričnega šopa (A, B) je $p(\lambda) = \det(A - \lambda B)$. Če polinom p ni identično enak 0, je matrični šop *regularen*, sicer pa *singularen*.

Če je matrični šop (A, B) regularen in je

$$Ax = \lambda Bx$$

za $x \neq 0$, potem pravimo, da je λ *(končna) lastna vrednost* in x *(desni) lastni vektor*. Podobno je $y \neq 0$ *levi lastni vektor* za λ, če je $y^H A = \lambda y^H B$.

Problemu iskanja lastnih vrednosti matričnega šopa pravimo *posplošeni problem lastnih vrednosti (GEP)*.

Splošen regularen matrični šop

Naj bo (A, B) regularen matrični šop. Potem:

- Končne lastne vrednosti šopa (A, B) so ničle karakterističnega polinoma $p(\lambda) = \det(A - \lambda B)$, ki je stopnje $m \leq n$.
- V primeru $m < n$ ima šop še lastno vrednost ∞ z večkratnostjo $n - m$.

Zgled: V primeru

$$A - \lambda B = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 0 \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} 2 & & \\ & 0 & \\ & & 1 \end{bmatrix}$$

dobimo $p(\lambda) = (2\lambda - 1)\lambda$, torej so lastne vrednosti

$$\lambda_1 = 1/2, \quad \lambda_2 = 0, \quad \lambda_3 = \infty.$$

Neskončne lastne vrednosti se pojavijo natanko takrat, ko je matrika B singularna. Vsak vektor iz $\ker(B)$ je desni lastni vektor za lastno vrednost ∞.

Ekvivalentni matrični šopi

Izrek 1. *Za regularen matrični šop (A, B) velja:*

1) *Če je B nesingularna, so vse lastne vrednosti šopa (A, B) končne in enake lastnim vrednostim $B^{-1}A$ ali AB^{-1}.*
2) *Če je B singularna, ima šop (A, B) lastno vrednost ∞ z večkratnostjo $n - \mathrm{rang}(B)$.*
3) *Če je A nesingularna, so lastne vrednosti šopa (A, B) recipročne lastne vrednosti $A^{-1}B$ oziroma BA^{-1}, kjer lastna vrednost 0 ustreza neskončni lastni vrednosti (A, B).*

Če sta matriki U in V nesingularni, sta šopa (A, B) in (UAV, UBV) *ekvivalentna*.

Izrek 2. *Ekvivalentna regularna matrična šopa (A, B) in (UAV, UBV) imata enake lastne vrednosti. Velja:*

- *x je lastni vektor za (A, B) $\Leftrightarrow$ $V^{-1}x$ je lastni vektor za (UAV, UBV),*
- *y je levi lastni vektor za (A, B) $\Leftrightarrow$ $U^{-H}x$ je levi lastni vektor za (UAV, UBV).*

Posplošena Schurova forma

Izrek 3. *Za regularen matrični šop $A - \lambda B$ obstajata unitarni matriki Q in Z, da je*

$$Q^H(A - \lambda B)Z = S - \lambda T,$$

kjer sta S in T zgoraj trikotni matriki.

Lastne vrednosti so potem kvocienti $\lambda_i = t_{ii}/s_{ii}$ za $s_{ii} \neq 0$ in ∞ v primeru $s_{ii} = 0$.

Situacija $s_{ii} = t_{ii} = 0$ je možna le, če je šop (A, B) singularen.

Če sta matriki A in B realni, potem obstaja realna posplošena Schurova forma, kjer sta matriki Q in Z ortogonalni, S je kvazi zgornja trikotna, T pa zgornja trikotna matrika.

Direktne metode za posplošene probleme lastnih vrednosti

Za numerično računanje posplošene Schurove forme imamo na voljo QZ algoritem, ki je izpeljanka QR metode za nesimetričen problem lastnih vrednosti.

(v bistvu izvajamo implicitno QR metodo na matriki $C = AB^{-1}$)

Najprej šop (A, B) z ortogonalnimi ekvivalentnimi transformacijami reduciramo na šop

$$(\widetilde{A}, \widetilde{B}) = (\widetilde{Q}A\widetilde{Z}, \widetilde{Q}B\widetilde{Z}),$$

kjer je prva matrika zgornja Hessenbergova, druga pa zgornja trikotna.

Definiten primer

Dan je posplošen problem lastnih vrednosti $Ax = \lambda Bx$, kjer je A simetrična in B simetrična pozitivno definitna.

Če je B nesingularna, lahko sicer res rešujemo ekvivalenten navaden problem lastnih vrednosti $B^{-1}Ax = \lambda x$, a s tem izgubimo simetrično stukturo.

Če uporabimo razcep Choleskega $B = VV^T$ matrike B, dobimo

$$\begin{aligned} Ax &= \lambda VV^T x \\ V^{-1}Ax &= \lambda V^T x \\ V^{-1}AV^{-T}V^T x &= \lambda V^T x \end{aligned}$$

To je simetričen problem lastnih vrednosti $Cy = \lambda y$ za $C = V^{-1}AV^{-T}$ in $y = V^T x$.

Posledica: v primeru $A = A^T$ in B s.p.d. ima šop (A, B) realne lastne vrednosti.

Velike in razpršene matrike

Kaj lahko naredimo v primeru, ko sta matriki A in B veliki in razpršeni?

V tem primeru lahko tudi tu uporabimo ustrezno prilagojene iterativne metode.

Tako npr. inverzna iteracija poteka na naslednji način:

izberi začetni vektor q_0
$k = 1, 2, \ldots$
  reši $(A - \sigma B)z_k = Bq_{k-1}$
  $q_k = z_k / \|z_k\|$

V primeru, ko je B nesingularna, je to ekvivalentno inverzni iteraciji za $B^{-1}A$.

Arnoldijeva metoda za $B^{-1}A$

Če je B nesingularna, lahko uporabimo Arnoldijevo metodo na $B^{-1}A$.

V vsakem koraku moramo izračunati produkt z matriko $B^{-1}A$. To naredimo tako, da množimo z A in rešimo sistem z B, kjer uporabimo npr. LU razcep matrike B.

Sistem z matriko B moramo rešiti natančno!

Če sta matriki A in B simetrični in B še pozitivno definitna, se splača uporabiti transformacijo na matriko $C = V^{-1}AV^{-T}$, kjer je $B = VV^T$ razcep Choleskega. Na ta način ohranimo simetrijo in lahko uporabimo Lanczosevo metodo. Množenje z matriko C izvedemo tako, da enkrat množimo z A in rešimo dva trikotna sistema z V in V^T.

Ritzeve vrednosti za GEP

Za GEP $Ax = \lambda Bx$ iščemo približek za lastni par (θ, u), kjer je u iz danega podprostora $\mathcal{U}_k$ in θ blizu podane ciljne vrednosti $\tau \in \mathbb{C}$. Iz standardnega Ritz–Galerkinovega pogoja

$$r := Au - \theta Bu \perp \mathcal{U}_k$$

dobimo

$$U_k^* A U_k c = \theta\, U_k^* B U_k c,$$

kjer stolpci U_k tvorijo ortonormirano bazo za $\mathcal{U}_k$ in $c \in \mathbb{C}^k$.

Za notranje lastne vrednosti, je tudi v primeru, ko za Ritzevo vrednost velja $\theta \approx \tau$, ostanek $\|r\|$ lahko velik in približek za lastni vektor slab. Kot rešitev vpeljemo harmonične Ritzeve vrednosti.

Če je $A - \tau B$ nesingularna, si pomagamo s spektralno transformacijo

$$(A - \tau B)^{-1} Bx = (\lambda - \tau)^{-1} x.$$

Notranje lastne vrednosti $\lambda \approx \tau$ so zunanje lastne vrednosti $(A - \tau B)^{-1} B$.

Shift-and-invert Arnoldi

Kadar je matrika B singularna ali zelo občutljiva, lahko uporabimo premik.

Če je σ takšen skalar, da je matrika $A - \sigma B$ nesingularna, potem je originalni GEP

$$Ax = \lambda Bx$$

ekvivalenten

$$Cx = \mu x,$$

kjer je

$$C = (A - \sigma B)^{-1} B, \quad \mu = \frac{1}{\lambda - \sigma}.$$

Če uporabimo Arnoldija na matriki C, moramo v vsakem koraku izračunati produkt z matriko C, kjer si pomagamo z LU razcepom matrike $A - \sigma B$.

Če sta A in B simetrični in je $A - \sigma B$ pozitivno definitna, lahko uporabimo Lanczosev algoritem in si pomagamo z razcepom Choleskega $A - \sigma B = V V^T$.

Glede na to, da moramo pri GEP v vsakem primeru reševati sistem, se skoraj vedno uporablja shift-and-invert, razen če je sistem z $A - \sigma B$ veliko težje rešiti kot sistem z matriko B.

Racionalni Krilov (Ruhe (1994))

Racionalni Krilov je podoben shift-and-invert Arnoldiju, le da premik σ ni fiksen in ga med iteracijo lahko spreminjamo.

izberi začetni vektor v_1, začetni premik σ_1 in $t_1 = e_1$

$j = 1, 2, \ldots$

izračunaj vektor za nadaljevanje $V_j t_j$

izračunaj $r = (A - \sigma_j B)^{-1} B V_j t_j$

ortogonaliziraj $r = r - V_j h_j$, kjer je $h_j = V_j^H r$

$h_{j+1,j} = \|r\|$

$v_{j+1} = (1/h_{j+1,j}) r$

izračunaj približke za lastne pare $(\lambda_i^{(j)}, s_i^{(j)})$ *in testiraj konvergenco*

določi nov premik σ_{j+1} in t_{j+1}

Racionalni Krilov

Dobimo:

$$AV_{j+1}H_{j+1,j} = BV_{j+1}K_{j+1,j},$$

kjer sta H in K zgornji Hessenbergovi, pri čemer je

$$K_{j+1,j} = H_{j+1,j}\text{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_j) + T_{j+1,j},$$

kjer je $T_{j+1,j}$ zgornja trikotna.

Približke za lastne pare dobimo iz

$$K_{jj}s = \theta H_{kk}s,$$

približek za lastni vektor je $x = V_{j+1}H_{j+1,1}s$.

Za ostanek velja

$$r = Ax - \theta Bx = (\sigma_j - \theta)h_{j+1,1}s_jBv_{j+1}.$$

Racionalni Krilov

Vsakič ko spremenimo premik σ_j, moramo izračunati novo LU faktorizacijo matrike $A - \sigma_j B$. Zaradi tega ponavadi naredimo nekaj korakov z istim premikom, potem pa se premaknemo na novega.

Zakaj se imenuje racionalni Krilov?

Če delamo navadnega Arnoldija, so elementi podprostora Krilova oblike $p_j(A)v_1$.

Pri shift-and-invert Arnoldiju namesto polinomov nastopajo racionalne funkcije oblike $p_j(t)/(t-\sigma)^j$, kjer je σ premik.

Pri racionalnem Krilovu, kjer so premiki lahko različni, pa na koncu dobimo $p_j(t)/q_j(t)$, kjer je $q(t) = (t-\sigma_1)\cdots(t-\sigma_j)$.

Kako izberemo t_j. Ena možnost je., da dokler se premik ne spremeni, uporabljamo $t_j = e_1$, ko pa se spremeni, vzamemo $t_j = e_{j-1}$ in ga spet fiksiramo, dokler se premik ponovno ne spremeni.

Jacobi-Davidson (Fokkema, Sleijpen, van der Vorst (1998))

Za reševanje posplošenega problema lastnih vrednosti lahko uporabimo tudi J-D metodo. Prednost te metode je, da ni potrebno natančno rešiti linearnega sistema (npr. z matriko B), temveč lahko pri reševanju korekcijske enačbe uporabimo iterativno metodo.

Delamo s homogeno obliko

$$(\beta A - \alpha B)x = 0,$$

kjer par $(\alpha, \beta) \neq (0, 0)$ predstavlja lastno vrednost $\lambda = \alpha/\beta$.

Računamo t.i. *delno posplošeno Schurovo formo*

$$AQ_k = Z_k R_k^A, \qquad BQ_k = Z_k R_k^B,$$

kjer sta R_k^A in R_k^B zgornji trikotni $k \times k$, Q_k in Z_k pa imata k ortonormiranih stolpcev.

Harmonične Ritzeve vrednosti za GEP

Da se izognemo računanju z $(A - \tau B)^{-1}$ vpeljemo Petrov–Galerkinov pogoj

$$(A - \tau B)^{-1} Bu - (\theta - \tau)^{-1} u \perp (A - \tau B)^* (A - \tau B)\, \mathcal{U}_k,$$

oziroma ekvivalentno

$$Au - \theta Bu = (A - \tau B)u - (\theta - \tau) Bu \perp (A - \tau B)\, \mathcal{U}_k,$$

kar nas pripelje do projiciranega problema

$$U_k^* (A - \tau B)^* (A - \tau B) U_k c = (\theta - \tau)\, U_k^* (A - \tau B)^* B U_k c.$$

Velja:

- metoda izloči točne lastne vektorje iz iskalnega podprostora,
- harmonični par (θ, u) zadošča (Stewart (2001))

$$\|Au - \tau Bu\| \leq |\theta - \tau| \cdot \|Bu\| \leq |\theta - \tau| \cdot \|BU_k\|,$$

torej je povsem smiselno izbrati harmonično Ritzevo vrednosti, ki je najbližja τ.