1 Redukcja macierzy symetrycznej do postaci trojdiagonalnej

1.1 Algorytm Householdera

Algorytm Householdera redukuje macierz symetryczna $n \times n$ A do postaci trojdiagonalnej poprzez $n-2$ operacji. Kazda operacja anihiluje rzadana czesc kolumny oraz odpowiadajacego jej rzedu. Podstawa algorytm jest macierz P postaci

$$P = 1 - 2\frac{u \cdot u^T}{|u|^2} \tag{1}$$

gdzie u jest dowolnym rzeczywistym wektorem spelniajacym a $u \cdot u^T$ to iloczyn zewnetrzny wektorow czyli macierz. Macierz P jest ortogonalna poniewaz

$$\begin{aligned} P^2 &= (1 - 2\frac{u \cdot u^T}{|u|^2})(1 - 2\frac{u \cdot u^T}{|u|^2}) \\ &= 1 - 4\frac{u \cdot u^T}{|u|^2} + 4\frac{u \cdot (u^T \cdot u) \cdot u^T}{|u|^4} \\ &= 1 \end{aligned} \tag{2}$$

Czyli $P = P^{-1}$. Poniewaz rowniez $P^T = P$, wiec $P^T = P^{-1}$ co dowodzi ortogonalnosci.

Przypuscmy, ze x jest wektorem zbudowanym z pierwszej kolumny A. Wybieramy

$$u = x \mp |x| e^1 \tag{3}$$

gdzie e^1 to wektor jednostkowy $[1, 0, \cdots, 0]^T$. Wtedy

$$\begin{aligned} P \cdot x &= (1 - 2\frac{u \cdot u^T}{|u|^2})x = x - 2\frac{u}{|u|^2}(x \mp |x|e^1)^T x \\ &= x - \frac{2u(|x|^2 \mp |x|x_1)}{2|x|^2 \mp 2|x|x_1} = x - u = \pm|x|e^1 \end{aligned} \tag{4}$$

To pokazuje ze macierz Hauseholdera P dzialajac na dany wektor x zeruje wszystkie jego elementy poza pierwszym.

Aby zredukowac symetryczna macierz A do postaci trojdiagonalnej wybieramy jako wektor x dla pierwszej macierzy Householdera wektor zbudowany z $n-1$ dolnych elementow pierwszej kolumny A. Wtedy jej dolne $n-2$ elementow zostanie wyzerowanych

$$P_1 \cdot A = \left[\begin{array}{ccccc} 1 & | & 0 & \cdots & 0 \\ - & - & - & - & - \\ 0 & | & & & \\ \vdots & | & & P_1' & \\ 0 & | & & & \end{array}\right] \left[\begin{array}{ccccc} a_{11} & | & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ - & - & - & - & - \\ a_{21} & | & & & \\ \vdots & | & & & \\ a_{n1} & | & & & \end{array}\right]$$

$$= \left[\begin{array}{ccccc} a_{11} & | & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ - & - & - & - & - \\ k & | & & & \\ 0 & | & & nieistotne & \\ \vdots & | & & & \\ 0 & | & & & \end{array}\right]$$

gdzie P_1' to macierz Hauseholdera o rozmiarze $(n-1) \times (n-1)$ a powstale k to

$$k = P_1' \begin{pmatrix} a_{21} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{pmatrix} = \pm \left| \begin{pmatrix} a_{21} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{pmatrix} \right|$$

Pelna ortogonalna transformacja ma postac

$$A' = P \cdot A \cdot P = \left[\begin{array}{ccccc} a_{11} & | & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ - & - & - & - & - \\ k & | & & & \\ 0 & | & & nieistotne & \\ \vdots & | & & & \\ 0 & | & & & \end{array}\right] \left[\begin{array}{ccccc} 1 & | & 0 & \cdots & 0 \\ - & - & - & - & - \\ 0 & | & & & \\ \vdots & | & & P_1' & \\ 0 & | & & & \end{array}\right]$$

$$= \begin{bmatrix} a_{11} & | & k & 0 & \cdots & 0 \\ - & - & - & - & - & - \\ k & | & & & & \\ 0 & | & & & nieistotne & \\ \vdots & | & & & & \\ 0 & | & & & & \end{bmatrix}$$

Widac, ze P_1AP_1 zaczyna byc trojdiagonalne. Wykonujac w analogiczny sposob dalsze kroki iteracji po $n-2$ krokach dostaniemy macierz trojdiagonalna z macierza podobienstwa $Q = P_1 \cdots P_{n-2}$. Jezeli znajdziemy wektory wlasne macierzy A' przemnozenie ich przez Q da nam wektory wlasne A.

Zamiast mnozenia $P \cdot A \cdot P$ w rzeczywistosci wpierw znajduje sie wektor

$$p = 2\frac{A \cdot u}{|u|^2} \tag{5}$$

a nastepnie

$$\begin{aligned} A \cdot P &= A \cdot (1 - 2\frac{u \cdot u^T}{|u|^2}) & (6) \\ A' &= P \cdot A \cdot P = A - p \cdot u^T - u \cdot p^T + 2Ku \cdot u^T & (7) \end{aligned}$$

gdzie skalar K jest zdefiniowany jako

$$K = \frac{u^T \cdot p}{|u|^2} \tag{8}$$

Jezeli sie zapisze

$$q = p - Ku \tag{9}$$

otrzymuje sie

$$A' = A - q \cdot u^T - u \cdot q^T \tag{10}$$

co stanowi uzyteczna praktycznie formule.

2 Wektory i wartosci wlasne macierzy trojdiagonalnej

2.1 Algorytm QR i QL

Jest to metoda bardzo prosta od strony algorytmicznej lecz trudno wykazuje sie jej wlasnosci teoretyczne i numeryczne. Mozna ja stosowac rowniez dla macierzy pelnych. Wtedy jednak wymaga n^3 operacji na iteracje zas w przypadku macierzy trojdiagonalnych liczba ta maleje do n operacji na iteracje. Metoda opiera sie na:

Twierdzenie Schura

Dla dowolnej macierzy A istnieje taka unitarna macierz Q, ze

$$R = Q^{-1}AQ \tag{11}$$

jest macierza gorna trojkatna.

Wartosciami wlasnymi A sa zatem elementy diagonalne R. Macierzy Q nie da sie wyznaczyc przy pomocy skonczonej liczby dzialan arytmetycznych. Twierdzenie Schura sugeruje jednak mozliwosc budowy ciagu macierzy $\tilde{Q}_k$ takich, ze $\tilde{Q}_k^{-1}A\tilde{Q}_k$ daza do macierzy gornej trojkatnej, ktorej diagonalnymi elementami sa wartosci wlasne λ_i macierzy A. Mozna to uzyskac poprzez zdefiniowanie ciagu:

$$\begin{aligned} A_1 &= A \\ A_k &= Q_kR_k \quad k = 1, 2, \cdots \\ A_{k+1} &= R_kA_k \end{aligned} \tag{12}$$

Mozna zuwazyc, ze

$$A_{k+1} = Q_k^TQ_kR_kQ_k = Q_k^{-1} = \cdots = \tilde{Q}_k^{-1}A\tilde{Q}_k \tag{13}$$

gdzie

$$\tilde{Q}_k = Q_1 Q_2 \cdots Q_k \tag{14}$$

Wszystkie macierze A_k sa wiec podobne do A.
Jesli A ma n wartosci wlasnych o roznych modulach

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n| > 0 \tag{15}$$

to mozna pokazac, ze dla $i = 1, 2, \cdots n$ elementy $a_{ii}^{(k)}$ daza przy $k \to \inf$ do λ_i, zas dla $i > j$ elementy $a_{ij}^{(k)}$ sa zbiezne do zera. Dla dowolnych macierzy A konstruowany ciag A_k nie ma takich wlasnosci. Trudnosc stanowi rowniez wyznaczanie macierzy Q_k.

W przypadku macierzy trojdiagonalnej algorytm sprowadza sie do wymnazania A

$$A = \begin{bmatrix} a & b & \cdots \\ b & c & \cdots \\ \vdots & & \end{bmatrix}$$

przez macierze obrotu

$$\begin{bmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \cos\phi & \sin\phi \\ -\sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} cos & b(\cos^2\phi - \sin^2\phi) + (a-c)\sin\phi\cos\phi \\ b(\cos^2\phi - \sin^2\phi) + (a-c)\sin\phi\cos\phi & cos \end{bmatrix}$$

i dobieraniu ϕ tak aby elementy niediagonalne znikaly

$$\frac{\cos^2\phi - \sin^2\phi}{\sin\phi\cos\phi} = \frac{c-a}{b} \tag{16}$$

Ale

$$\frac{\cos^2\phi - \sin^2\phi}{\sin\phi\cos\phi} = \frac{1-\tan^2\phi}{2\tan\phi} = \Theta \tag{17}$$

gdzie oznaczylismy $\Theta = \frac{c-a}{b}$. Oznaczajac dalej $\tan\phi = t$ mamy

$$t^2 + 2\Theta t - 1 = 0 \tag{18}$$

Z wzorow Vieta widac, ze $t_1 t_2 = -1$, a zatem jeden z pierwiastkow spelnia $|t_i| < 1$. Ze wzgledow numerycznych bierzemy ten pierwiastek. Mamy

$$t_{1,2} = -\Theta \pm \sqrt{1+\Theta^2} \tag{19}$$

i poniewaz $t_1 t_2 = -1$ mamy rowniez

$$t_1 = \frac{-1}{-\Theta + \sqrt{1+\Theta^2}} \tag{20}$$

$$t_2 = \frac{-1}{-\Theta - \sqrt{1+\Theta^2}}$$

Aby uniknac odejmowania liczb zblizonych co do modulu w mianowniku bierzemy zawsze ten pierwiastek, w ktorym w mianowniku bedzie dodawanie. Daje to zawsze obrot o $\pi/4$

$$t = \frac{sgn(\Theta)}{|\Theta| + \sqrt{1+\Theta^2}} = \tan\phi \tag{21}$$

i ostatecznie

$$\begin{aligned} \cos\phi &= \frac{1}{\sqrt{1+t^2}} \\ \sin\phi &= t\cdot\cos\phi = \frac{t}{\sqrt{1+t^2}} \end{aligned} \tag{22}$$