Problem svojstvenih vrijednosti

3. dio kolegija Numeričke metode financijske matematike

Nela Bosner

Problem svojstvenih vrijednosti

Primjer

Pretpostavimo da korporacije mogu biti u jednom od n mogućih kreditnih razreda ("credit rating"), i da one mogu preći iz jednog razreda u bilo koji drugi u diskretnim jedinicam vremena, recimo svake godine.

- *Neka je a_{ij} vjerojatnost da korporacija prijeđe u razred i sljedeće godine, ako se trenutno nalazi u razredu j.*
- *Pretpostavimo da je ovaj sustav zapravo* ***Markovljev lanac****, tj. da vjerojatnosti prelaska ovise samo o trenutnom razredu, a ne o prošlim razredima.*

Svojstva matrice $A = [a_{ij}]$:

- $0 \leq a_{ij} \leq 1$, *jer se radi o vjerojatnostima.*
- $\sum_i a_{ij} = 1$, *za svako j, budući da sustav uvijek mora preći u neki novi razred.*
- *Kvadratna matrica $A = [a_{ij}]$ ima nenegativne elemente, i suma elemenata svakog stupca je 1.*

Primjer (nastavak)

Pretpostavimo da imamo velik skup korporacija, i neka u_j predstavlja udio u tom skupu onih korporacija, koje su u razredu j u početnom trenutku, uz svojstva $0 \leq u_j \leq 1$ i $\sum_j u_j = 1$. Vektor $u = [u_j]$ nazivamo vektorom gustoće.

- *Ako je skup dovoljno velik, i ako se prelazak iz razreda u razred svake korporacije odvija neovisno o drugima, tada se udio korporacija u skupu svih korporacija koje će se nakon jedne godine nalaziti u razredu i, označen sa v_i, dobiva kao*

$$v_i = \sum_j a_{ij} u_j, \qquad ili \qquad v = Au.$$

- *Primijetimo da je $v = [v_i]$ isto vektor gustoće.*

$$\sum_i v_i = \sum_i \sum_j a_{ij} u_j = \sum_j \left(\sum_i a_{ij} \right) u_j = \sum_j u_j = 1.$$

Primjer (nastavak)

- *Općenito, ako sa $u^{(k)}$ označimo vektor gustoće nakon k koraka, tada*

$$u^{(k)} = Au^{(k-1)} = A^k u^{(0)}.$$

- *Prema tome dugoročno ponašanje gustoće ovisi o svojstvima visokih potencija matrice A.*
- *Prema gornjim pretpostavkama, moguće je procijeniti vjerojatnosti prelaska na osnovu povijesnih podataka.*
- *U sljedećoj tablici nalaze se vjerojatnosti prelaska izraženi u postocima, za jednu godinu, objavljeni u Credit Metrics za 2001. godinu.*

Primjer (nastavak)

Konačni razred	*Početni razred* AAA	AA	A	BBB	BB	B	CCC	D
AAA	90.81	0.70	0.09	0.02	0.03	0	0.22	0
AA	8.33	90.65	2.27	0.33	0.14	0.11	0	0
A	0.68	7.79	91.05	5.95	0.67	0.24	0.22	0
BBB	0.06	0.64	5.52	86.93	7.73	0.43	1.30	0
BB	0.12	0.06	0.74	5.30	80.53	6.48	2.38	0
B	0	0.14	0.26	1.17	8.84	83.46	11.24	0
CCC	0	0.02	0.01	0.12	1.00	4.07	64.86	0
D	0	0	0.06	0.18	1.06	5.20	19.79	100

Primjer (nastavak)

- *Sada se postavlja pitanje što se događa kad* $k \to \infty$*?*
- *Da li se sustav smiruje u ravnotežnom stanju?*
- *Ako postoji ravnotežno stanje* $u^{(\infty)} = \bar{u}$*, tada mora vrijediti*
$$A\bar{u} = \bar{u},$$
tako da se ono ne mijenja u nadolazećim godinama.
- *Dakle,* $\bar{u}$ *mora biti svojstveni vektor matrice* A *koji pripada svojstvenoj vrijednosti jednakoj 1.*
- *Ako pogledamo tablicu, također je jasno da je jedan takav svojstveni vektor jednak* $[0, \ldots, 0, 1]^T$*, tj. ako su svi u razredu* D *tada svi i ostaju u tom razredu.*
- *To nužno ne mora značiti, da svi teže ka razredu* D*.*

Primjer (nastavak)

- *Pretpostavimo da A ima n linearno nezavisnih svojstvenih vektora $v_1, \ldots, v_n$ i n svojstvenih vrijednosti $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$, i pretpostavimo da je v_1 svojstveni vektor koji pripada svojstvenoj vrijednosti $\lambda_1 = 1$.*
- *Tada $u^{(k)}$ možemo raspisati po komponentama u smjerovima $v_1, \ldots, v_n$ kao*

$$u^{(k)} = \nu_1^{(k)} v_1 + \cdots + \nu_n^{(k)} v_n.$$

- *Imamo*

$$u^{(k+1)} = Au^{(k)} = \sum_{j=1}^{n} \nu_j^{(k)} Av_j = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j \nu_j^{(k)} v_j.$$

- *Prema tome dobiva se da je $\nu_j^{(k+1)} = \lambda_j \nu_j^{(k)}$, odnosno*

$$\nu_j^{(k)} = \lambda_j^k \nu_j^{(0)}.$$

Primjer (nastavak)

- *Komponenta vektora u smjeru j-tog svojstvenog vektora ili raste ili trne eksponencijalno kad $k \to \infty$, ovisno o tome da li je odgovarajuća svojstvena vrijednost veća ili manja od 1 po apsolutnoj vrijednosti.*
- *Jasno je da niti jedna svojstvena vrijednost od A ne može biti veća od 1 po apsolutnoj vrijednosti,*
  - *jer da to nije tako, apsolutna vrijednost od u bi rasla eksponencijalno,*
  - *što je u suprotnosti sa činjenicom da je suma svih komponenti od u jednaka 1.*
- *Mi znamo da postoji najmanje jedna svojstvena vrijednost jednaka 1.*
- *Prema tome, ako su sve ostale svojstvene vrijednosti po apsolutnoj vrijednosti manje od 1, tada će njihove komponente utrnuti, i dugoročno gledano razred kojem će svi težiti je razred D.*

Primjer (nastavak)

- *MATLAB funkcija koja rješava ovaj konkretan primjer nalazi se u M-fileu*

  `primjer_sv_vrij_kredit.m`

  a matrica A je spremljena u datoteku

  `kreditni_razredi_A.mat`

  na adresi

  http://www.math.hr/~nela/nmfm.html
- *Izračunajte svojstvene vrijednosti i svojstvene vektore matrice A pomoću MATLAB-ove funkcije* `eig()` *i provjerite dobivene rezultate.*

Napomena

- *Vidimo da je, prema očekivanom 1 najveća svojstvena vrijednost.*
- *Prva sljedeća svojstvena vrijednost je oko 0.988, što je vrlo blizu 1, i koja ukazuje da će konvergencija prema ravnotežnom stanju biti vrlo spora.*
- *Njen svojstveni vektor, osim zadnje komponente, ima najveće komponente u 3. i 4. koordinati.*
- *Zbog toga 3. i 4. koordinate od u najsporije padaju.*

Definicija

Neka je $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$. Skalar $\lambda \in \mathbb{C}$ zove se svojstvena vrijednost matrice A, ako postoji vektor $x \in \mathbb{C}^n$, $x \neq 0$ takav da je

$$Ax = \lambda x.$$

Takav vektor x zove se svojstveni vektor od A, koji pripada svojstvenoj vrijednosti λ.

- Ukoliko za matricu $A = [a_1 \;\; \ldots \;\; a_n]$ možemo napisati da je $A = SDS^{-1}$, za neku regularnu matricu $S = [s_1 \;\; \ldots \;\; s_n]$, i $D = \operatorname{diag}(d_1, \ldots, d_n)$ dijagonalnu matricu tada vrijedi:

$$AS = SD \quad \Rightarrow \quad As_i = d_i s_i \; i = 1, \ldots, n.$$

- Dakle, u tom slučaju dijagonalni elementi matrice D predstavljaju svojstvene vrijednosti matrice A, a stupci matrice S predstavljaju svojstvene vektore matrice A.

Definicija

Matrica $A = [a_{ij}] \in \mathbb{C}^{n \times n}$ *je*

- *normalna ako je* $A^* A = AA^*$,
- *hermitska ako je* $A^* = A$,
- *hermitska pozitivno definitna ako je* $A^* = A$ *i* $x^* Ax > 0$ *za svaki* $x \neq 0$,
- *lijevo stohastička ako je* $a_{ij} \geq 0$ *i ako vrijedi*

$$\sum_i a_{ij} = 1, \quad \text{za } j = 1, \ldots, n.$$

Teorem

- *Ako je* $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ *normalna matrica, onda postoji unitarna matrica* $U \in \mathbb{C}^{n\times n}$ *i dijagonalna matrica* $\Lambda = diag(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$, *takve da je*

$$A = U\Lambda U^*.$$

- *Ako je* $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ *hermitska matrica, onda postoji unitarna matrica* $U \in \mathbb{C}^{n\times n}$ *i dijagonalna matrica* $\Lambda = diag(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$, *pri čemu su* $\lambda_i \in \mathbb{R}$ *za* $i = 1, \dots, n$, *takve da je*

$$A = U\Lambda U^*.$$

- *Ako je* $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ *hermitska pozitivno definitna matrica, onda vrijedi* $\lambda_i > 0$ *za* $i = 1, \dots, n$.

Teorem (Perron–Frobenius)

Ako je $A = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ matrica takva da su $a_{ij} \geq 0$ za $i, j = 1, \ldots, n$, tada je

- $\rho(A)$ *svojstvena vrijednost od* A,
- *i postoji vektor* $v = [v_j]$ *takav da su* $v_j \geq 0$ *za* $j = 1, \ldots, n$, $\|v\|_2 = 1$ *i vrijedi da je*

$$Av = \rho(A)v.$$

Tvrdnja teorema vrijedi i za stohastičke matrice.

Metoda potencija

- Iz prethodnog primjera vidjeli smo da smo uzastopnom primjenom matrice A na neki vektor dobili aproksimaciju svojstvenog vektora.
- Radilo se o svojestvenom vektoru koji odgovara svojstvenoj vrijednosti sa najvećom apsolutnom vrijednošću.
- Dakle, riječ je o primjeni potencije matrice A na vektor.
- Metoda potencija je najjednostavnija metoda za računanje svojstvenih vrijednosti i vektora.
- S obzirom da vektori $A^k x$ mogu jako narasti ili postati jako mali, potrebno je normiranje: $A^k x / \|A^k x\|$.

Algoritam (Metoda potencija)

x_0 *zadan sa* $\|x_0\|_2 = 1$;
$k = 0$;
while $\sim$*kriterij_zaustavljanja*

$$y_{k+1} = Ax_k;$$
$$x_{k+1} = \frac{y_{k+1}}{\|y_{k+1}\|_2};$$
$$k = k + 1;$$

end

- Postavlja sa pitanje, kada ova iterativna metoda konvergira i kako brzo.
- S obzirom da svakoj jednostrukoj svojstvenoj vrijednosti pripada cijeli jednodimenzionalan svojstveni potprostor, prirodnije je kao mjeru konvergencije promatrati kut između potprostora.

Konvergencija metode potencija

Teorem

Neka je $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ dijagonalizabilna matrica, čije su svojstvene vrijednosti λ_i $i = 1, \ldots, n$ uređene na način

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

neka su svojstveni vektori definirani kao

$$Av_i = \lambda_i v_i, \qquad \|v_i\|_2 = 1,\ i = 1, \ldots, n.$$

Pretpostavimo da zapis od x_0 u bazi svojstvenih vektora ima netrivijalnu komponentu u smjeru v_1, tada niz x_k linearno konvergira ka

$$\lim_{k\to\infty} x_k = v_1,$$

Teorem (nastavak)

a konvergencija ovisi o izrazu

$$\left(\frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|}\right)^k,$$

tj. kako se brzo taj izraz približava nuli.

Napomena

Iz prethodnog teorema vidimo da ako je jedinstvena dominantna vrijednost dobro izolirana od ostatka spektra, tada će metoda potencija brzo konvergirati. U suprotnom, konvergencija je spora.

Dokaz.

- Budući da je A dijagonalizabilna, tada je $A = V \Lambda V^{-1}$ gdje je $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$ i $V = [\; v_1 \quad \cdots \quad v_n \;]$ regularna matrica svojstvenih vektora.
- Prema tome $\{v_1, \ldots, v_n\}$ čini bazu prostora.
- Napišimo vektor x_0 u toj bazi:

$$x_0 = \xi_1 v_1 + \sum_{i=2}^{n} \xi_i v_i.$$

$\square$

Dokaz (nastavak).

- Budući da je prema pretpostavci teorema $\xi_1 \neq 0$, možemo napisati

$$\begin{aligned} A^k x_0 =& \xi_1 \lambda_1^k v_1 + \sum_{i=2}^{n} \xi_i \lambda_i^k v_i \\ =& \xi_1 \lambda_1^k \left(v_1 + \sum_{i=2}^{n} \frac{\xi_i}{\xi_1} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k v_i \right). \end{aligned}$$

- Zbog toga što je $x_k \in \text{span}\{A^k x_0\}$ kut izmedju potprostora razapetih sa v_1 i x_k je jednak kutu između potprostora razapetih sa v_1 i $A^k x_0$. (Kut između potprostora je definiran na segmentu $[0, \pi/2]$.)

$\square$

Dokaz (nastavak).

- Vrijedi,

$$\cos(\angle(x_k, v_1)) = \cos(\angle(A^k x_0, v_1)) = \frac{|v_1^* A^k x_0|}{\|A^k x_0\|_2}$$

$$= \frac{|\xi_1 \lambda_1^k| \left| 1 + \sum_{i=2}^n \frac{\xi_i}{\xi_1} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k v_1^* v_i \right|}{|\xi_1 \lambda_1^k| \left\| v_1 + \sum_{i=2}^n \frac{\xi_i}{\xi_1} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k v_i \right\|_2}$$

odakle je zbog $\frac{|\lambda_i|}{|\lambda_1|} < 1$ za $i = 2, \ldots, n$ $\lim_{k\to\infty} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k = 0$,

$$\lim_{k\to\infty} \cos(\angle(x_k, v_1)) = 1 \implies \lim_{k\to\infty} \angle(x_k, v_1) = 0.$$

- Dakle, možemo zaključiti da x_k konvergira ka jediničnom svojstvenom vektoru od λ_1.

- Kada zaustaviti iteracije?
- Pretpostavimo da smo izračunali aproksimaciju svojstvenog vektora w i aproksimaciju svojstvene vrijednosti μ matrice A, tada je razumna ocjena aproksimacije dana normom reziduala

$$r = Aw - \mu w.$$

- Ako imamo samo aproksimaciju svojstvenog vektora w, kao u slučaju metode potencija, zanima nas koji μ daje najmanju normu reziduala $\|r\|_2$.
- Za $w \neq 0$ definiramo **Rayleighev kvocijent**

$$\varrho = \varrho(A, w) = \frac{w^* A w}{w^* w},$$

i promatramo pripadni rezidual

$$r_\varrho = Aw - \varrho w.$$

- Vrijedi sljedeće:
  1. r_ϱ je okomit na w:
  $$w^* r_\varrho = w^* A w - \frac{w^* A w}{w^* w} w^* w = 0.$$
  2. r_ϱ ima najmanju normu od svih reziduala sa vektorom w, pa je ϱ najbolja aproksimacija svojstvene vrijednosti:
  $$\begin{aligned} \|r\|_2^2 &= \|Aw - \mu w\|_2^2 = \|Aw - \varrho w + \varrho w - \mu w\|_2^2 \\ &= \|r_\varrho + (\varrho - \mu) w\|_2^2 \quad (w^* r_\varrho = 0 \ \Rightarrow) \\ &= \|r_\varrho\|_2^2 + |\varrho - \mu|^2 \|w\|_2^2 \geq \|r_\varrho\|_2^2. \end{aligned}$$
- Primijetimo da ukoliko je $w = v_i$ svojstveni vektor tada je
$$\varrho = \frac{v_i^* A v_i}{v_i^* v_i} = \frac{\lambda_i v_i^* v_i}{v_i^* v_i} = \lambda_i,$$
odnosno, Rayleighev kvocijent je jednak svojstvenoj vrijednosti λ_i.

- Promatrajmo sada matricu $A - \frac{r_\varrho}{w^* w} w^*$.
- Za nju vrijedi sljedeće:

$$\begin{aligned}\left(A - \frac{r_\varrho}{w^* w} w^*\right) w &= Aw - \frac{w^* w}{w^* w} r_\varrho = Aw - r_\varrho \\ &= Aw - Aw + \varrho w = \varrho w,\end{aligned}$$

  odnosno (ϱ, w) je njen svojstveni par.
- Ako dalje definiramo

$$\delta A = -\frac{r_\varrho}{w^* w} w^*,$$

  tada je njena norma jednaka

$$\|\delta A\|_2 = \left\| -\frac{r_\varrho w^*}{w^* w} \right\|_2 = \frac{\|r_\varrho\|_2 \|w\|_2}{\|w\|_2^2} = \frac{\|r_\varrho\|_2}{\|w\|_2}.$$

- Na ova razmatranja možemo primijeniti sljedeći teorem.

Teorem (Bauer–Fike)

Neka je A dijagonalizabilna, $A = V\Lambda V^{-1}$. Ako je μ svojstvena vrijednost matrice $A + \delta A$ onda je

$$\min_{i=1\ldots,n} |\lambda_i - \mu| \leq \|V\|_p \|V^{-1}\|_p \|\delta A\|_p, \quad p = 1, 2, \infty.$$

Korolar

Neka je A dijagonalizabilna, $A = V\Lambda V^{-1}$ i $\|w\|_2 = 1$, i neka je $\varrho = w^* A w$ Rayleighev kvocijent sa pripadnim rezidualom $r_\varrho = Aw - \varrho w$. Tada je

$$\min_{i=1\ldots,n} |\lambda_i - \varrho| \leq \|V\|_2 \|V^{-1}\|_2 \|r_\varrho\|_2.$$

- Odavde vidimo da je uvjet $\|r_\varrho\|_2 < tol$ dobar kriterij zaustavljanja metode potencija, naročito za normalne matrice jer inače ograda ovisi i o $\kappa_2(V)$.

Inverzne iteracije

- Metoda potencija je računala svojstveni vektor koji pripada najvećoj po modulu svojstvenoj vrijednosti.
- A što ako želimo izračunati neki drugi svojstveni vektor?
- Primijetimo sljedeće:
  1. $Av_i = \lambda_i v_i$, tj. $\lambda_i \in \sigma(A)$.
  2. Pomnožimo prethodnu jednakost sa A^{-1} slijeva i dobit ćemo
  $$A^{-1} v_i = \frac{1}{\lambda_i} v_i, \text{ tj. } \frac{1}{\lambda_i} \in \sigma(A^{-1}).$$
  3. $(A - \mu I)v_i = (\lambda_i - \mu)v_i$, tj. $\lambda_i - \mu \in \sigma(A - \mu I)$.
  4. Iz prethodne jednakosti ponovo slijedi
  $$(A - \mu I)^{-1} v_i = \frac{1}{\lambda_i - \mu} v_i, \text{ tj. } \frac{1}{\lambda_i - \mu} \in \sigma\left((A - \mu I)^{-1}\right).$$

i u svim slučajevima imamo isti svojstveni vektor.

- Neka je A dijagonalizabilna matrica kojoj su svojstvene vrijednosti uređene na način

$$|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_{n-1}| > |\lambda_n| > 0,$$

pri čemu je najmanja po modulu svojstvena vrijednost različita od nule i dobro odvojena od preostalih svojstvenih vrijednosti.

- Ako metodu potencija primijenimo sada na A^{-1} koja ima svojstvene vrijednosti uređene na način

$$\left|\frac{1}{\lambda_n}\right| > \left|\frac{1}{\lambda_{n-1}}\right| \geq \left|\frac{1}{\lambda_2}\right| \geq \left|\frac{1}{\lambda_1}\right|,$$

onda će ona konvergirati ka svojstvenom vektoru koji pripada $\left|\frac{1}{\lambda_n}\right|$, a to je v_n.

- Ovim postupkom dobit ćemo svojstveni vektor koji pripada najmanjoj po modulu svojstvenoj vrijednosti od A.
- Zbog korištenja inverza matrice A^{-1} u ovoj metodi ona se zove **inverzne iteracije**.
- U svakoj iteraciji inverznih iteracija računamo $y_{k+1} = A^{-1}x_k$, odnosno rješavamo linearni sustav $Ay_{k+1} = x_k$.
- Brzina konvergencije je određena kvocijentom

$$\frac{|\lambda_{n-1}^{-1}|}{|\lambda_n^{-1}|} = \frac{|\lambda_n|}{|\lambda_{n-1}|}.$$

- Budući da u svakoj iteraciji moramo rješavati linearni sustav, što poskupljuje svaku iteraciju, postavlja se pitanje možemo li konvergenciju nekako ubrzati?
- Možemo li na taj način izračunati i ostale svojstvene vektore koji ne pripadaju λ_1 ili λ_n?

- Odgovor na ova pitanja je primjena inverznih iteracija na matricu $A - \mu I$, pri čemu je μ pogodno odabrani skalar.
- Ako je μ puno bliži svojstvenoj vrijednosti λ_n od bilo koje druge svojstvene vrijednosti, tada je brzina konvergencije određena kvocijentom

$$\frac{|\lambda_n - \mu|}{|\lambda_{n-1} - \mu|},$$

koji može biti puno manji od $\frac{|\lambda_n|}{|\lambda_{n-1}|}$.
- Ako je μ puno bliži nekoj drugoj svojstvenoj vrijednosti λ_i od bilo koje druge svojstvene vrijednosti, onda je $\lambda_i - \mu$ najmanja svojstvena vrijednost od $A - \mu I$ i inverzne iteracije će konvergirati ka svojstvenom vektoru v_i koji pripada λ_i.

- Brzina konvergencije određena je tada kvocijentom

$$\frac{|\lambda_i - \mu|}{\min_{j \neq i}\{|\lambda_j - \mu|\}}.$$

Algoritam (Inverzne iteracije)

μ *zadan;*
x_0 *zadan sa* $\|x_0\|_2 = 1$;
$k = 0$;
while $\sim$*kriterij_zaustavljanja*
  riješi sustav $(A - \mu I)y_{k+1} = x_k$;
  $x_{k+1} = \frac{y_{k+1}}{\|y_{k+1}\|_2}$;
  $k = k + 1$;
end

Eventualni problemi:

- Kako izabrati μ?
- Ako je μ vrlo blizu svojstvene vrijednosti, tada je $A - \mu I$ blizu singularne matrice i rješavanje linearnog sustava s tom matricom je loše uvjetovan problem.

Zadaci

Zadatak

U MATLAB-u napišite M-file funkciju `metoda_potencija()` *koja implementira metodu potencija. Funkcija neka ima ulazne parametre*

- *matricu* A
- *početnu iteraciju* x_0
- *toleranciju* tol *na normu reziduala* $\|r_\varrho\|_2$

Kriterij zaustavljanja je $\|Ax_k - (x_k^T A x_k)x_k\|_2 \leq tol$*. Funkcija neka vraća*

- *aproksimaciju svojstvenog vektora* x_k
- *broj iteracija* k *potrebnih za dostizanje aproksimativnog vektora tražene točnosti*
- *vektor duljine* $k+1$ *sa normama reziduala za svaku iteraciju* $i = 0, \ldots, k$

Zadatak

Primijenite svoju funkciju `metoda_potencija()` *na matricu A iz zadatka o kreditnim razredima, s ulaznim parametrima*

- $x_0 = [\ 1 \quad 0 \quad \cdots \quad 0\ ]^T$
- $tol = 10^{-5}$

Nacrtajte norme reziduala u logaritamskoj skali. Koliko je iteracija potrebno? Koliki je kvocijent $|\lambda_2|/|\lambda_1|$*? Kakav je ispao* x_k *i koliki je Rayleighev kvocijent* $x_k^T A x_k$*?*

Zadatak

U MATLAB-u napišite M-file funkciju `inverzne_iteracije()` *koja implementira inverzne iteracije. Funkcija neka ima ulazne parametre*

- *matricu* A
- *početnu iteraciju* x_0
- *skalar mi*
- *toleranciju tol na normu reziduala* $\|r_\varrho\|_2$

Kriterij zaustavljanja je $\|Ax_k - (x_k^T A x_k)x_k\|_2 \leq tol$. *Rješavanje sustava sa matricom* $A - \mu I$ *implementirajte tako da prije iteriranja izračunate njenu LU faktorizaciju s pivotiranjem* $P(A - \mu I) = LU$ *pomoću MATLAB-ove funkcije* `lu()`. *Slijedi da je*

$$(A - \mu I)^{-1} = U^{-1} L^{-1} P.$$

Zadatak (nastavak)

Dakle, u svakoj iteraciji primjenite $y_{k+1} = U^{-1}L^{-1}Px_k$ *i umjesto rješavanja linearnog sustava rješavate trokutaste sustave s matricama L i U (supstitucije u naprijed i u nazad). Funkcija neka vraća*

- *aproksimaciju svojstvenog vektora* x_k
- *broj iteracija k potrebnih za dostizanje aproksimativnog vektora tražene točnosti*
- *vektor duljine* $k+1$ *sa normama reziduala za svaku iteraciju* $i = 0, \ldots, k$

Zadatak

Primijenite svoju funkciju `inverzne_iteracije()` *na matricu A iz zadatka o kreditnim razredima, s ulaznim parametrima*

- $x_0 = [\begin{array}{cccc} 1 & 0 & \cdots & 0 \end{array}]^T$
- $\mu = 1.001$
- $tol = 10^{-5}$

Nacrtajte norme reziduala u logaritamskoj skali. Koliko je sada iteracija potrebno? Koliki je kvocijent $|\lambda_1 - \mu|/|\lambda_2 - \mu|$*? Kakav je ispao* x_k *i koliki je Rayleighev kvocijent* $x_k^T A x_k$*?*

Schurova dekompozicija

- U finacijama često se pojavljuje problem pronalaženja svih svojstvenih vrijednosti i svojstvenih vektora matrice kovarijance.
- Matricu A želimo faktorizirati na način da iz njenih faktora lako možemo očitati njene svojstvene vrijednosti.
- Npr. za regularnu matricu S matrica $B = S^{-1}AS$ je slična matrici A, i njene svojstvene vrijednosti su jednake svojstvenim vrijednostima od A:

$$Bx = \lambda x \Longrightarrow SBx = \lambda Sx \; ({\scriptstyle SB=AS}) \Longrightarrow ASx = \lambda Sx.$$

- Bilo bi poželjno da se svojstvene vrijednosti matrice B lako nađu.
- Još je poželjnije da se matrica S lako invertira, kao npr. ortogonalne matrice za koje je $S^{-1} = S^T$.
- Sljedeći teorem pokazuje da Schurova dekompozicija objedinjuje ova poželjna svojstva.

Teorem (Schurova dekompozicija)

Neka je $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ i neka su $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ svojstvene vrijednosti od A u proizvoljnom poretku. Tada postoji

- *unitarna matrica U i*
- *gornje trokutasta matrica $T = [t_{ij}]$*

takve da je

$$A = UTU^*, \quad i \quad t_{ii} = \lambda_i, \ i = 1, \ldots, n.$$

Ako je $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ i ako su sve svojstvene vrijednosti od A realne, onda je T također realna i U se može odabrati da bude ortogonalna.

Definicija

Dekompoziciju $A = UTU^*$ zovemo Schurova dekompozicija od A, a matrica T zove se Schurova forma od A.

Dokaz.

Dokaz se provodi matematičkom indukcijom po n.

Baza $n = 1$ i $A = 1 \cdot A \cdot 1^*$, pri čemu skalar A možemo smatrati degeneriranom 1×1 gornje trokutastom matricom, a 1 je unitarna 1×1 matrica.

Korak Neka je $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ i pretpostavimo da tvrdnja teorema vrijedi za svaku $(n-1) \times (n-1)$ matricu.

- Promatramo svojstvenu vrijednost λ_1 i pripadni svojstveni vektor u_1 tako da je

$$Au_1 = \lambda_1 u_1, \qquad \|u_1\|_2 = 1.$$

- Skup $\{u_1\}$ nadopunimo sa $\{u_2, \ldots, u_n\}$ do ortonormirane baze u $\mathbb{C}^n$.

Dokaz (nastavak).

- Definirajmo ortonormiranu matricu $V_2 = \begin{bmatrix} u_2 & \cdots & u_n \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{n\times(n-1)}$.
- Tada je matrica $U_1 = \begin{bmatrix} u_1 & V_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ unitarna matrica za koju vrijedi

$$U_1^* A U_1 = \begin{bmatrix} u_1^* \\ V_2^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Au_1 & AV_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1^* \\ V_2^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 u_1 & AV_2 \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} \lambda_1 & u_1^* AV_2 \\ 0 & A_2 \end{bmatrix}, \quad A_2 = V_2^* A V_2 \in \mathbb{C}^{(n-1)\times(n-1)}.$$

- Iz činjenice da je

$$\det(A - \lambda I_n) = (\lambda_1 - \lambda) \cdot \det(A_2 - \lambda I_{n-1}),$$

slijedi da su $\lambda_2, \ldots, \lambda_n$ svojstvene vrijednosti od A_2.

Dokaz (nastavak).

- Po pretpostavci indukcije postoji unitarna matrica $U_2 \in \mathbb{C}^{(n-1)\times(n-1)}$ i gornje trokutasta matrica $T_2 \in \mathbb{C}^{(n-1)\times(n-1)}$ sa $\lambda_2, \dots, \lambda_n$ na dijagonali, takve da

$$A_2 = U_2 T_2 U_2^*.$$

- Definirajmo sada

$$U = U_1 \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{n\times n},$$

za koju vrijedi sljedeće

$$U^* U = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_2^* \end{bmatrix} U_1^* U_1 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_2^* U_2 \end{bmatrix} = I_n,$$

Dokaz (nastavak).

pa je U unitarna matrica sa svojstvom

$$
\begin{aligned}
U^*AU &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_2^* \end{bmatrix} U_1^*AU_1 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_2 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_2^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & u_1^*AV_2 \\ 0 & A_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_2 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \lambda_1 & u_1^*AV_2U_2 \\ 0 & U_2^*A_2U_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & u_1^*AV_2U_2 \\ 0 & T_2 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \lambda_1 & & u_1^*AV_2U_2 & & \\ 0 & \lambda_2 & * & \cdots & * \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \cdots & * \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & * \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix} = T
\end{aligned}
$$

Napomena

- *Konstrukcija opisana u dokazu prethodnog teorema nije jako praktična jer direktno koristi svojstvene vrijednosti i vektore.*
- *Numeričko računanje Schurove dekompozicije svodi se na beskonačan niz transformacija sličnosti koje sustavno reduciraju elemente ispod glavne dijagonale i osiguravaju trokutastu formu tek u limesu.*

Korolar

Trokutasta matrica T u Schurovoj dekompoziciji $A = UTU^*$ je dijagonalna ako i samo ako je matrica A normalna. Specijalno vrijede sljedeći spektralni teoremi:

- *Schurova forma hermitske matrice je realna dijagonalna matrica.*
- *Schurova forma antihermitske matrice je dijagonalna sa čisto imaginarnim dijagonalnim elementima.*
- *Schurova forma unitarne matrice je dijagonalna sa $|\lambda_i| = 1$ $i = 1, \ldots, n$.*

Dokaz.

- Neka je $AA^* = A^*A$ i $A = UTU^*$.
- Budući da je T unitarno slična matrici A, ona nasljedjuje njena svojstva poput normalnosti, hermitičnosti, antihermitičnosti i unitarnosti:
  - A je normalna

$$TT^* = U^*AUU^*A^*U = U^*AA^*U = U^*A^*AU = U^*A^*UU^*AU = T^*T$$

  - A je hermitska

$$T^* = U^*A^*U = U^*AU = T$$

  - A je antihermitska

$$T^* = U^*A^*U = -U^*AU = -T$$

  - A je unitarna

$$T^*T = U^*A^*UU^*AU = U^*A^*AU = U^*U = I$$

Dokaz (nastavak).

- Dakle, T je gornje trokutasta i $TT^* = T^*T$ pa moramo još provjeriti da je T zaista dijagonalna.
- Dokazujemo matematičkom indukcijom po n.

Baza $n = 1$ pa je tvrdnja trivijalna (skalar možemo shvatiti i kao trokutastu i kao dijagonalnu matricu).

Korak Neka je $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ i pretpostavimo da tvrdnja teorema vrijedi za svaku $(n-1)\times(n-1)$ matricu.

- Prikažimo matricu T kao

$$T = \begin{bmatrix} t_{11} & t_2^* \\ 0 & T_2 \end{bmatrix},$$

pri čemu je $T_2 \in \mathbb{C}^{(n-1)\times(n-1)}$ gornje trokutasta.

Dokaz (nastavak).

- Vrijedi

$$T^*T = \begin{bmatrix} \bar{t}_{11} & 0 \\ t_2 & T_2^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{11} & t_2^* \\ 0 & T_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} |t_{11}|^2 & \bar{t}_{11} t_2^* \\ t_{11} t_2 & t_2 t_2^* + T_2^* T_2 \end{bmatrix}$$

$$TT^* = \begin{bmatrix} t_{11} & t_2^* \\ 0 & T_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{t}_{11} & 0 \\ t_2 & T_2^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} |t_{11}|^2 + t_2^* t_2 & t_2^* T_2^* \\ T_2 t_2 & T_2 T_2^* \end{bmatrix}$$

- Iz jednakosti $TT^* = T^*T$ slijedi
  - $|t_{11}|^2 = |t_{11}|^2 + t_2^* t_2$ odakle zaključujemo da je $t_2^* t_2 = \|t_2\|_2^2 = 0$ i $t_2 = 0$.
  - $t_2 t_2^* + T_2^* T_2 = T_2 T_2^*$, odnosno zbog prethodnog zaključka je $T_2^* T_2 = T_2 T_2^*$.
  - Kako je $T_2 \in \mathbb{C}^{(n-1)\times(n-1)}$ po pretpostavci indukcije ona je dijagonalna $T_2 = \mathrm{diag}(t_{22}, \ldots, t_{nn})$, pa napokon imamo

Dokaz (nastavak).

$$T = \begin{bmatrix} t_{11} & 0 \\ 0 & T_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & t_{22} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & t_{33} & \cdots & 0 \\ & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & t_{nn} \end{bmatrix}.$$

$\square$

Napomena

Višestruke svojstvene vrijednosti su višestruko problematične:

- *Svojstveni vektor jednostruke svojstvene vrijednosti je određen do na množenje netrivijalnim skalarom — pripadni svojstveni potprostor je jednodimenzionalan*
- *Svojstvenoj vrijednosti algebarske kratnosti 2*
  - *pripada jedan takav svojstveni vektor ako je njena geometrijska kratnost jedan,*
  - *ili je svaki netrivijalni vektor iz dvodimenzionalnog potprostora svojstveni vektor — geometrijska kratnost te svojstvene vrijednosti je onda jednaka dva.*
- *Višestrukost svojstvene vrijednosti je osjetljivo svojstvo i lako ga je izgubiti.*

Primjer

Neka je

$$A = \begin{bmatrix} a & c \\ d & b \end{bmatrix}, \quad \det(\lambda I - A) = \lambda^2 - (a+b)\lambda + ab - cd$$

sa svojstvenim vrijednostima

$$\lambda_{1,2} = \frac{a + b \pm \sqrt{(a+b)^2 - 4(ab - cd)}}{2}.$$

- *Matrica A će imati dvostruku svojstvenu vrijednost* $\lambda_1 = \lambda_2 = (a+b)/2$ *ako i samo ako je* $\Delta = (a+b)^2 - 4(ab - cd) = 0$, *tj. ako je diskriminanta svojstvenog polinoma jednaka nuli.*

Primjer (nastavak)

- *Jasno je da se proizvoljno malim promjenama koeficijenata a, b, c, d diskriminantu Δ može iz trivijalne $\Delta = 0$ pretvoriti u netrivijalnu vrijednost, uslijed npr. grešaka zaokruživanja u aritmetici konačne preciznosti.*
- *Znamo da je u slučaju kada su sve svojstvene vrijednosti različite matrica dijagonalizabilna.*

Napomena

MATLAB-ova funkcija `eig()` za svaku matricu A vraća regularnu matricu V i dijagonalnu matricu D takve da je $AV \approx VD$, tj. $A \approx VDV^{-1}$ iako matrica A ne mora biti dijagonalizibilna. Kako je to moguće? Odgovor na ovo pitanje daje sljedeći korolar.

Korolar

- *Matrice sa jednostrukim svojstvenim vrijednostima su gust podskup u $\mathbb{C}^{n\times n}$. U proizvoljnoj ε okolini svake matrice A nalazi se matrica $\tilde{A}$ sa jednostrukim svojstvenim vrijednostima.*
- *Specijalno su dijagonalizabilne matrice gust podskup u $\mathbb{C}^{n\times n}$.*
- *Pri tome, ako je A normalna, hermitska, antihermitska, ili unitarna, matrica $\tilde{A}$ može se odabrati tako da bude redom, normalna, hermitska, antihermitska, ili unitarna.*

Dokaz.

- Neka A ima s različitih svojstvenih vrijednosti $\lambda_1, \ldots, \lambda_s$ sa algebarskim kratnostima $n_1, \ldots, n_s$, i neka je

$$\gamma = \min_{i \neq j} |\lambda_i - \lambda_j|.$$

- Zanima nas netrivijalan slučaj kada je $s < n$.
- Neka je $\varepsilon > 0$ proizvoljan.
- U Schurovoj dekompoziciji $A = UTU^*$ svih n_i dijagonalnih elemenata matrice $T = [t_{ij}]$ za koje je $t_{jj} = \lambda_i$, malim promjenama:

$$\tilde{t}_{jj} = t_{jj} + \delta_j, \quad |\delta_j| < \min\left\{\frac{\varepsilon}{\sqrt{n}}, \frac{\gamma}{2}\right\}$$

možemo pretvoriti u n_i različitih elemenata $\tilde{t}_{jj}$.

Dokaz (nastavak).

- Odabirom $|\delta_j| < \gamma/2$ garantiramo da perturbirana svojstvena vrijednost neće pogoditi neku drugu različitu svojstvenu vrijednost.
- Ovim postupkom za sve λ_i $i = 1, \ldots, s$ dobit ćemo n međusobno različitih vrijednosti $\tilde{t}_{jj}$ $j = 1, \ldots, n$.
- Neka je $\tilde{T}$ matrica dobivena iz T zamjenom t_{ii} s $\tilde{t}_{ii}$, $i = 1, \ldots, n$.
- Tada vrijedi

$$\begin{aligned} \|T - \tilde{T}\|_F =& \|\mathrm{diag}(\delta_1, \ldots, \delta_n)\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} |\delta_i|^2} \\ <& \sqrt{n}\frac{\varepsilon}{\sqrt{n}} = \varepsilon \end{aligned}$$

Dokaz (nastavak).

- Ako definiramo $\tilde{A} = U\tilde{T}U^*$, onda $\tilde{A}$ ima n međusobno različitih svojstvenih vrijednosti i $\|A - \tilde{A}\|_F = \|T - \tilde{T}\|_F < \varepsilon$.
- Postoji beskonačno mnogo matrica $\tilde{A}$ koje zadovoljavaju ovu konstrukciju.
- Ako je A normalna, onda su T i $\tilde{T}$ dijagonalne, pa je i $\tilde{A}$ normalna.
- Ako je A hermitska (antihermitska), onda je T dijagonalna sa dijagonalnim elementima na realnoj (imaginarnoj) osi i opisana varijacija dijagonalnih elemenata se očito može provesti tako da $\tilde{T}$ bude dijagonalna hermitska (antihermitska) sa dijagonalnim elementima na realnoj (imaginarnoj) osi i $\tilde{A}$ hermitska (antihermitska).

Dokaz (nastavak).

- U tom slučaju biramo realne (imaginarne) δ_j.
- Ako je A unitarna, onda, zaključujući na isti način, vidimo da $\tilde{A}$ može biti odabrana da bude unitarna.
  - U tom slučaju je $|t_{jj}| = 1$ tj. $t_{jj} = e^{i\phi_j}$, $j = i, \ldots, n$ i biramo $\delta_j = t_{jj}(e^{i\theta_j} - 1)$ za neke kuteve θ_j.
  - Tada vrijedi

$$\tilde{t}_{jj} = t_{jj} + t_{jj}(e^{i\theta_j} - 1) = t_{jj}e^{i\theta_j} = e^{i(\phi_j+\theta_j)},$$

pa je $|\tilde{t}_{jj}| = 1$.

$\square$

- U primjenama se vrlo često koriste realne matrice koje općenito imaju kompleksne svojstvene vrijednosti, ali se često očekuje da svojstvene vrijednosti i svojstveni vektori budu realni.
- Zbog toga je poželjno da sve operacije kao i sama dekompozicija budu realne, jer su kompleksne operaciju puno "skuplje" od realnih.
- Kako kompleksne svojstvene vrijednosti realne matrice dolaze u parovima kompleksno–konjugiranih brojeva, onda svaki kompleksno–konjugirani par možemo prikazati kao spektar realne 2×2 matrice na dijagonali od T.

- Provjerimo spektar realne 2×2 matrice

$$B_2 = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{bmatrix}.$$

- Vrijedi

$$\det(B_2 - \lambda I_2) = (\alpha - \lambda)^2 + \beta^2 = \lambda^2 - 2\alpha\lambda + \alpha^2 + \beta^2,$$

pa su svojstvene vrijednosti matrice B_2

$$\lambda_{1,2} = \frac{2\alpha \pm \sqrt{4\alpha^2 - 4(\alpha^2 + \beta^2)}}{2} = \alpha \pm i\beta,$$

par konjugirano kompleksnih brojeva.

Teorem (Realna Schurova dekompozicija)

Neka je $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Neka A ima r realnih svojstvenih vrijednosti i k kompleksno konjugiranih parova. Tada postoji realna ortogonalna matrica U i blok gornje trokutasta matrica T, blok dimenzije $(r+k) \times (r+k)$, tako da je

$$U^T A U = \begin{bmatrix} T_{[11]} & T_{[12]} & T_{[13]} & \cdots & \cdots & T_{[1,r+k]} \\ & T_{[22]} & T_{[23]} & \cdots & \cdots & T_{[2,r+k]} \\ & & \ddots & \ddots & & \vdots \\ & & & T_{[ii]} & \cdots & T_{[i,r+k]} \\ & & & & \ddots & \vdots \\ & & & & & T_{[r+k,r+k]} \end{bmatrix}.$$

Pri tome r dijagonalnih blokova $T_{[ii]}$ ima dimenzije 1×1, a k dijagonalnih blokova ima dimenzije 2×2.

Teorem (nastavak)

- 1×1 *blokovi su realne svojstvene vrijednosti od* A*,*
- *a svojstvene vrijednosti svakog* 2×2 *bloka su jedan par kompleksno konjugiranih svojstvenih vrijednosti od* A*.*

Dokaz.

Dokaz ide matematičkom indukcijom po k.

Baza Za $k = 0$ sve svojstvene vrijednosti su relane, matrica T je trokutasta i dokaz je analogan kao kod kompleksne Schurove dekompozicije.

Korak Neka A ima $k > 0$ parova konjugirano kompleksnih svojstvenih vrijednosti i pretpostavimo da postoji realna Schurova dekompozicija za $j < k$ parova.

□

Dokaz (nastavak).

- Neka je $\lambda = \alpha + i\beta$ kompleksna svojstvena vrijednost od A, tada postoje vektori $y, z \in \mathbb{R}^n$ takvi da je

$$\begin{aligned} A(y + iz) &= (\alpha + i\beta)(y + iz) \\ &= (\alpha y - \beta z) + i(\beta y + \alpha z) \end{aligned}$$

  odakle slijedi

$$Ay = \alpha y - \beta z, \qquad Az = \beta y + \alpha z,$$

  što skraćeno možemo napisati

$$A[\ y \quad z\ ] = [\ y \quad z\ ] \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{bmatrix}.$$

- Dakle, $\operatorname{span}\{y, z\}$ predstavlja dvodimenzionalni realni invarijantni potprostor od A.

Dokaz (nastavak).

- Neka je
$$\left[\begin{array}{cc} y & z \end{array} \right] = U_1 \left[\begin{array}{c} R \\ 0 \end{array} \right], \quad U_1 \in \mathbb{R}^{n\times n}, R \in \mathbb{R}^{2\times 2}$$
QR faktorizacija matrice $\left[\begin{array}{cc} y & z \end{array} \right]$.
- Tada vrijedi
$$AU_1 \left[\begin{array}{c} R \\ 0 \end{array} \right] = U_1 \left[\begin{array}{c} R \\ 0 \end{array} \right] \left[\begin{array}{cc} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{array} \right],$$
odnosno
$$U_1^T AU_1 \left[\begin{array}{c} R \\ 0 \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} R \left[\begin{array}{cc} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{array} \right] \\ 0 \end{array} \right].$$

Dokaz (nastavak).

- Za particiju

$$U_1^T A U_1 = \begin{array}{cc} \left[\begin{array}{cc} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{array}\right] & \begin{array}{c} 2 \\ n-2 \end{array} \\ \begin{array}{cc} 2 & n-2 \end{array} & \end{array}$$

iz prethodne jednakosti slijedi

$$\left[\begin{array}{c} T_{11}R \\ T_{21}R \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c} R\left[\begin{array}{cc} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{array}\right] \\ 0 \end{array}\right].$$

- Kako je $T_{21}R = 0$, zbog regularnosti matrice R je $T_{21} = 0$. (y i z ne smiju biti kolinearni jer se može pokazati da bi u protivnom bio $\beta = 0$, i imali bismo realnu svojstvenu vrijednost.)

Dokaz (nastavak).

- Dakle, možemo zaključiti

$$U_1^T A U_1 = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ 0 & T_{22} \end{bmatrix},$$

pri čemu je $\sigma(T_{11}) = \{\alpha + i\beta, \alpha - i\beta\}$.

- Zbog toga što T_{22} ima $k-1$ parova konjugirano kompleksnih svojstvenih vrijednosti, po pretpostavci indukcije postoji unitarna matrica $U_2 \in \mathbb{R}^{(n-2)\times(n-2)}$ i blok gornje trokutasta matrica $\tilde{T}_{22} \in \mathbb{R}^{(n-2)\times(n-2)}$ sa dijagonalnim blokovima dimenzija 1×1 ili 2×2, takve da je

$$T_{22} = U_2 \tilde{T}_{22} U_2^T.$$

$\square$

Dokaz (nastavak).

- Definirajmo sada

$$U = U_1 \cdot \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & U_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n},$$

za koju vrijedi sljedeće

$$U^T U = \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & U_2^T \end{bmatrix} U_1^T U_1 \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & U_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & U_2^T U_2 \end{bmatrix} = I_n,$$

pa je U ortogonalna matrica.

$\square$

Dokaz (nastavak).

- U još ima svojstvo

$$
\begin{aligned}
U^T A U &= \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & U_2^T \end{bmatrix} U_1^T A U_1 \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & U_2 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & U_2^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ 0 & T_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & U_2 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} U_2 \\ 0 & U_2^T T_{22} U_2 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} U_2 \\ 0 & \tilde{T}_{22} \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

čime je $U^T A U$ blok gornje trokutasta matrica sa dijagonalnim blokovima dimenzija 1×1 ili 2×2.

$\square$

Korolar

Matrica $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ je normalna ako i samo ako postoji realna ortogonalna matrica U i blok dijagonalna matrica T tako da je

$$U^T AU = \begin{bmatrix} T_{[11]} & & \\ & \ddots & \\ & & T_{[r+k,r+k]} \end{bmatrix}.$$

Pri tome r dijagonalnih blokova $T_{[ii]}$ ima dimenzije 1×1, a k dijagonalnih blokova ima dimenzije 2×2.

- *A je simetrična, $A = A^T$, ako i samo ako su svi dijagonalni blokovi 1×1, tj. $A = U\Lambda U^T$, gdje $\Lambda = diag(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$ sadrži svojstvene vrijednosti, a odgovarajući stupci od U su svojstveni vektori.*

Korolar

U proizvoljnoj ε okolini svake realne matrice A nalazi se realna matrica $\tilde{A}$ sa jednostrukim svojstvenim vrijednostima. Pri tome, ako je A normalna, simetrična, antisimetrična, ili ortogonalna, matrica $\tilde{A}$ može se odabrati tako da bude redom normalna, simetrična, antisimetrična, ili ortogonalna.

Numeričko računanje Schurove dekompozicije

- Numerički algoritam za računanje Schurove forme matrice A, o kojoj nemamo nikakvu spektralnu informaciju, mora biti potpuno konstruktivan i svaki njegov korak mora biti jednostavan za implementaciju na računalu.
- Kako je računanje svojstvenih vrijednosti nužno iterativna procedura koja tek u limesu otkriva spektar, jasno je da će u praksi te iteracije biti zaustavljene nakon nekog dovoljno velikog konačnog broja.
- Pri tome je važno da se iterativni dio izvršava na matricama koje imaju strukturu pogodnu za jednostavan pristup.

Zato se algoritam sastoji od 2 koraka:

1. Nekom jednostavnom transformacijom unitarne sličnosti baziranom na konačno elementarnih koraka, prebacujemo proizvoljnu matricu A u matricu $H = Q^* AQ$ koja je jednostavnije strukture i pogodna za računanje Schurove forme.
2. Primjena iteratvne metode za računanje Schurove forme matrice H.

Hessenbergova forma i tridijagonalizacija

Definicija

Kažemo da je $n \times n$ matrica H u Hessenbergovoj formi *ili da je* Hessenbergova matrica *ako je $H_{ij} = 0$ za $i > j + 1$.*

$$\begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \end{bmatrix}$$

Definicija

Za $n \times n$ Hessenbergovu matricu H kažemo da je strogo Hessenbergova *ako je $H_{j+1,j} \neq 0$ za sve $j = 1, \ldots, n - 1$.*

Teorem

- *Neka je $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$.*
  - *Postoje $n \times n$ unitarna matrica Q i Hessenbergova matrica H, tako da je $A = QHQ^*$.*
- *Ako je A realna matrica,*
  - *onda Q možemo odabrati da bude realna ortogonalna,*
  - *a H realna Hessenbergova.*
- *Ako je u dekompoziciji $A = QHQ^*$ matrica H strogo Hessenbergova, onda je ta dekompozicija jedinstveno određena u sljedećem smislu:*
  - *Ako je $A = \tilde{Q}\tilde{H}\tilde{Q}^*$ također dekompozicija s unitarnom $\tilde{Q}$ i Hessenbergovom $\tilde{H}$, te ako je $Q = \begin{bmatrix} q_1 & \cdots & q_n \end{bmatrix}$ i $\tilde{Q} = \begin{bmatrix} \tilde{q}_1 & \cdots & \tilde{q}_n \end{bmatrix}$, onda $\tilde{q}_1 = e^{i\phi_1} q_1$ povlači $\tilde{Q} = Q\Phi$,*
  - *gdje je $\Phi = \mathrm{diag}(e^{i\phi_1}, \ldots, e^{i\phi_n})$.*
  - *U slučaju realne dekompozicije realne matrice A svi su $e^{i\phi_1} \in \{-1, 1\}$.*

Dokaz.

- Matricu A svodimo na Hessenbergovu formu tako da pomoću pogodno odabranih unitarnih transformacijama sličnosti sustavno poništavamo elemente na pozicijama (i,j) za $i > j+1$.
- Te unitarne transformacije su Householderovi reflektori.
- Ovu konstrukciju ilustrirat ćemo na primjeru 5×5:

$$A = A_1 = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ \times & * & * & * & * \\ \times & * & * & * & * \\ \times & * & * & * & * \\ \times & * & * & * & * \end{bmatrix},$$

pri čemu su elementi označeni sa $\times$ $(A_1(2:n,1))$ važni za određivanje prve unitarne transformacije.

Dokaz (nastavak).

- Konstruirajmo $(n-1) \times (n-1)$ Householderov reflektor $\hat{Q}_1$ takav da je

$$\hat{Q}_1 A_1(2:n,1) = \pm \|A_1(2:n,1)\|_2 e_1 = \begin{bmatrix} * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

- $n \times n$ unitarnu transformaciju definiramo kao

$$Q_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \hat{Q}_1 \end{bmatrix}.$$

- Vezano uz Q_1 uočimo sada dvije stvari:

Dokaz (nastavak).

1. transformacija sličnosti $A_2 = Q_1^* A Q_1$ djeluje na sljedeće elemente matrice A

$$A_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \hat{Q}_1^* \end{bmatrix} A_1 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \hat{Q}_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * & {\color{blue}*} & {\color{blue}*} & {\color{blue}*} & {\color{blue}*} \\ {\color{red}*} & {\color{magenta}*} & {\color{magenta}*} & {\color{magenta}*} & {\color{magenta}*} \\ {\color{red}*} & {\color{magenta}*} & {\color{magenta}*} & {\color{magenta}*} & {\color{magenta}*} \\ {\color{red}*} & {\color{magenta}*} & {\color{magenta}*} & {\color{magenta}*} & {\color{magenta}*} \\ {\color{red}*} & {\color{magenta}*} & {\color{magenta}*} & {\color{magenta}*} & {\color{magenta}*} \end{bmatrix},$$

pri čemu

- primjena Q_1^* slijeva mijenja elemente ${\color{red}*}$,
- primjena Q_1 zdesna mijenja elemente ${\color{blue}*}$,
- dok primjena obiju transformacija mijenja elemente ${\color{magenta}*}$.

$\square$

Dokaz (nastavak).

2. S druge strane, zbog izbora Householderovog reflektora $\hat{Q}_1$ i činjenice da primjena Q_1 zdesna ne mijenja 1. stupac, imamo situaciju

$$A_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \hat{Q}_1^* \end{bmatrix} A_1 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \hat{Q}_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ 0 & \times & * & * & * \\ 0 & \times & * & * & * \\ 0 & \times & * & * & * \end{bmatrix},$$

pri čemu su elementi označeni sa $\times$ ($A_2(3:n,2)$) važni za određivanje druge unitarne transformacije.

- Konstruirajmo $(n-2)\times(n-2)$ Householderov reflektor $\hat{Q}_2$ takav da je

$$\hat{Q}_2 A_2(3:n,2) = \pm\|A_2(3:n,2)\|_2 e_1.$$

Dokaz (nastavak).

- $n \times n$ unitarnu transformaciju definiramo kao

$$Q_2 = \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & \hat{Q}_2 \end{bmatrix}.$$

- Nova transformacija sličnosti $A_3 = Q_2^* A_2 Q_2$ je sada oblika

$$A_3 = \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & \hat{Q}_2^* \end{bmatrix} A_2 \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & \hat{Q}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & \times & * & * \\ 0 & 0 & \times & * & * \end{bmatrix},$$

pri čemu su elementi označeni sa $\times$ $(A_3(4:n,3))$ važni za određivanje treće unitarne transformacije.

Dokaz (nastavak).

- Konstruirajmo još zadnji $(n-3) \times (n-3)$ Householderov reflektor $\hat{Q}_3$ takav da je

$$\hat{Q}_3 A_3(4:n,3) = \pm \|A_3(4:n,3)\|_2 e_1 .$$

- $n \times n$ unitarnu transformaciju definiramo kao

$$Q_3 = \begin{bmatrix} I_3 & 0 \\ 0 & \hat{Q}_3 \end{bmatrix} .$$

- Transformacija sličnosti $A_4 = Q_3^* A_3 Q_3$ je sada oblika

$$A_4 = \begin{bmatrix} I_3 & 0 \\ 0 & \hat{Q}_3^* \end{bmatrix} A_3 \begin{bmatrix} I_3 & 0 \\ 0 & \hat{Q}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \end{bmatrix} .$$

Dokaz (nastavak).

- Dakle, matrica $A_4 = Q_3^* Q_2^* Q_1^* A Q_1 Q_2 Q_3$ je u željenoj Hessenbergovoj formi.
- Općenito, postigli smo to u $n-2$ koraka generirajući $n-2$ Householderova reflektora $\hat{Q}_i$, od kojih $\hat{Q}_i$ poništava $A_{i+1}(i+2:n,i) = 0$.
- Ovime je završena konstrukcija Hessenbergove forme: matrica $Q = Q_1 Q_2 \cdots Q_{n-2}$ ima svojstvo da je $H = Q^* A Q$ gornje Hessenbergova.
- Dokažimo još da je Hessenbergova forma esencijalno jedinstvena.
- Pretpostavka je: $H = Q^* A Q$, $\tilde{H} = \tilde{Q}^* A \tilde{Q}$ i $\tilde{q}_1 = e^{i\phi_1} q_1$.
- Jer je
$$h_{11} = q_1^* A q_1, \quad \tilde{h}_{11} = \tilde{q}_1^* A \tilde{q}_1 = e^{i(-\phi_1+\phi_1)} q_1^* A q_1 = q_1^* A q_1,$$
slijedi da je $\tilde{h}_{11} = h_{11}$.

Dokaz (nastavak).

- U jednakostima $AQ = QH$ i $A\tilde{Q} = \tilde{Q}\tilde{H}$ promatramo samo prve stupce:

$$Aq_1 = h_{11}q_1 + h_{21}q_2, \quad e^{i\phi_1}Aq_1 = e^{i\phi_1}h_{11}q_1 + \tilde{h}_{21}\tilde{q}_2.$$

- Ako prvu jednakost u prethodnom izrazu pomnožim s $e^{i\phi_1}$ dobivamo

$$\tilde{h}_{21}\tilde{q}_2 = e^{i\phi_1}h_{21}q_2.$$

- Kako je po pretpostavci H strogo Hessenbergova matrica tj. $h_{21} \neq 0$, zaključujemo da je $|\tilde{h}_{21}| = |h_{21}|$, i

$$\tilde{q}_2 = e^{i\phi_1}\frac{h_{21}}{\tilde{h}_{21}}q_2 = e^{i\phi_2}q_2.$$

Dokaz (nastavak).

- Naposljetku još vrijedi

$$\begin{aligned}\tilde{h}_{22} &= \tilde{q}_2^* A \tilde{q}_2 = e^{i(-\phi_2+\phi_2)} q_2^* A q_2 = q_2^* A q_2 = h_{22} \\ \tilde{h}_{21} &= \tilde{q}_2^* A \tilde{q}_1 = e^{i(-\phi_2+\phi_1)} q_2^* A q_1 = e^{i(\phi_1-\phi_2)} h_{21} \\ \tilde{h}_{12} &= \tilde{q}_1^* A \tilde{q}_2 = e^{i(-\phi_1+\phi_2)} q_1^* A q_1 = e^{i(\phi_2-\phi_1)} h_{12}\end{aligned}$$

- Nastavljamo dalje induktivno: pretpostavimo da smo za $m < n$ vektora dobili $\tilde{q}_j = q_j e^{i\phi_j}$, $j = 1, \ldots, m$.
- Promatrajući m-te stupce u jednakostima $AQ = QH$ i $A\tilde{Q} = \tilde{Q}\tilde{H}$, dobivamo relacije

$$Aq_m = \sum_{j=1}^{m} h_{jm} q_m + h_{m+1,m} q_{m+1}$$

$$e^{i\phi_m} Aq_m = \sum_{j=1}^{m} e^{i(\phi_m-\phi_j)} h_{jm} e^{i\phi_j} q_j + \tilde{h}_{m+1,m} \tilde{q}_{m+1}$$

Dokaz (nastavak).

- Na isti način kao za $m = 1$ zaključujemo da je

$$\tilde{h}_{m+1,m}\tilde{q}_{m+1} = e^{i\phi_m} h_{m+1,m} q_{m+1}.$$

- Kako je $h_{m+1,m} \neq 0$, i $|\tilde{h}_{m+1,n}| = |h_{m+1,m}|$, vrijedi

$$\tilde{q}_{m+1} = e^{i\phi_m} \frac{h_{m+1,m}}{\tilde{h}_{m+1,m}} q_{m+1} = e^{i\phi_{m+1}} q_{m+1}.$$

$\square$

Propozicija

Svojstvene vrijednosti strogo Hessenbergove matrice H imaju geometrijsku kratnost jedan.

Razmislite zašto je to tako. Vidljivo je iz same strukture matrice H.

Napomena

- *U kontekstu računanja Schurove dekompozicije, numerički algoritmi uvijek rade na strogo Hessenbergovim matricama.*
- *Jer, ako je neki* $h_{j+1,j} = 0$ *onda se problem razbija na dva problema manje dimenzije:*

$$H = \left[\begin{array}{ccc|ccc} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * & * \\ \hline 0 & 0 & \mathbf{0} & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * & * \end{array}\right] = \begin{bmatrix} H_{[11]} & H_{[12]} \\ 0 & H_{[22]} \end{bmatrix}.$$

- *Nakon računanja Schurovih dekompozicija matrica od* $H_{[11]}$ *i* $H_{[22]}$ *Schurova dekompozicija od* H *može se jednostavno sastaviti.*

Napomena

- *Ako je matrica A hermitska, $A = A^*$, onda je i Hessenbergova forma $H = Q^*AQ$ hermitska.*
- *Kako je H Hessenbergova i hermitska, onda je nužno tridijagonalna.*

Definicija

Kažemo da je $n \times n$ matrica T tridijagonalna ako je $T_{ij} = 0$ za $|i - j| > 1$.

$$\begin{bmatrix} * & * & 0 & 0 & 0 \\ * & * & * & 0 & 0 \\ 0 & * & * & * & 0 \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \end{bmatrix}$$

QR metoda

- Preostalo nam je definirati iterativnu metodu koja će na jednostavan način računati Schurovu dekompoziciju Hessenbergove matrice.

Algoritam (QR metoda)

$A^{(1)} = A$;
$k = 1$;
while $\sim$*kriterij_zaustavljanja*
  izračunaj QR faktorizaciju $A^{(k)} = Q^{(k)} R^{(k)}$;
  $A^{(k+1)} = R^{(k)} Q^{(k)}$;
  $k = k + 1$;
end

Teorem

Matrice izračunate QR metodom imaju sljedeća svojstva:

- *Za svaki k je*
$$A^{(k+1)} = (Q^{(k)})^* A^{(k)} Q^{(k)},$$
tj. algoritam generira niz unitarno sličnih matrica.
- *Za svaki k je*
$$A^{(k+1)} = (Q^{(1)} \cdots Q^{(k)})^* A (Q^{(1)} \cdots Q^{(k)}).$$
- *Ako definiramo*
$$Q^{[1:k]} = Q^{(1)} \cdots Q^{(k)}, \qquad R^{[1:k]} = R^{(k)} \cdots R^{(1)},$$
onda je
$$A^k = Q^{[1:k]} R^{[1:k]}$$
QR faktorizacija potencije A^k.

Dokaz.

- Vrijedi

$$
\begin{aligned}
A^{(k+1)} &= R^{(k)} Q^{(k)} = \left((Q^{(k)})^* \underbrace{Q^{(k)} \Big) R^{(k)}}_{A^{(k)}} Q^{(k)} \\
&= (Q^{(k)})^* A^{(k)} Q^{(k)}.
\end{aligned}
$$

- Induktivno, koristeći prethodnu tvrdnju, imamo:

$$
\begin{aligned}
A^{(k+1)} &= (Q^{(k)})^* A^{(k)} Q^{(k)} \\
&= (Q^{(k)})^* (Q^{(k-1)})^* A^{(k-1)} Q^{(k-1)} Q^{(k)} = \cdots
\end{aligned}
$$

- Razmotrimo prvih nekoliko potencija:

$$
A^2 = Q^{(1)} \underbrace{R^{(1)} Q^{(1)}}_{A^{(2)} = Q^{(2)} R^{(2)}} R^{(1)} = Q^{(1)} Q^{(2)} R^{(2)} R^{(1)}
$$

Dokaz (nastavak).

$$
\begin{aligned}
A^3 &= A \cdot A^2 = Q^{(1)} \underbrace{R^{(1)} Q^{(1)}}_{A^{(2)} = Q^{(2)} R^{(2)}} Q^{(2)} R^{(2)} R^{(1)} = \\
&= Q^{(1)} Q^{(2)} \underbrace{R^{(2)} Q^{(2)}}_{A^{(3)} = Q^{(3)} R^{(3)}} R^{(2)} R^{(1)} = \\
&= Q^{(1)} Q^{(2)} Q^{(3)} R^{(3)} R^{(2)} R^{(1)}
\end{aligned}
$$

$\square$

Konvergencija QR metode

Teorem

Neka je $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ regularna matrica sa svojstvenim vrijednostima

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_{n-1}| > |\lambda_n| > 0.$$

Tada niz matrica $A^{(k)}$ izračunat QR metodom konvergira u sljedećem smislu: Postoje dijagonalne unitarne matrice $\Phi^{(k)}$ takve da je

$$\lim_{k\to\infty} (\Phi^{(k)})^* A^{(k+1)} \Phi^{(k)} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & * & * & \cdots & * \\ 0 & \lambda_2 & * & \cdots & * \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_{n-1} & * \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{bmatrix} = Q^* AQ,$$

gdje je $Q = \lim_{k\to\infty} Q^{(1)} \cdots Q^{(k)} \Phi^{(k)}$.

QR metoda s Hessenbergovim matricama

- U prethodnom teoremu pretpostavka je bila da je matrica A regularna.
- S druge strane bilo bi poželjno imati algoritam za računanje Schurove dekompozicije i za singularne matrice.
- Kako nam je cilj naći dekompoziciju $T = U^*AU$, T je gornje trokutasta i U unitarna, tada su najpogodnije transformacije unitarne sličnosti:
  1. ako je $H = (U^{(0)})^*AU^{(0)}$ unitarna sličnost
  2. ako je $T = (U^{(1)})^*HU^{(1)}$ Schurova dekompozicija

  onda $U = U^{(0)}U^{(1)}$ daje Schurovu formu $T = U^*AU$ matrice A.
- Pri tome 1. transformacija se provodi u konačno mnogo koraka, a matrica H je takve strukture da je svaki korak QR metode u 2. transformaciji puno efikasniji nego kad je primijenjen na matricu A.

Propozicija

Neka je $H = QR$ QR faktorizacija Hessenbergove matrice H. Vrijedi:

- *Matrice Q i RQ su takoder Hessenbergove.*
- *Ako je H strogo Hessenbergova i singularna, onda je $R_{nn} = 0$ i $R_{jj} \neq 0$ za $j = 1, \ldots, n-1$.*
- *Ako je H strogo Hessenbergova, onda su Q i R esencijalno jedinstvene (neovisno o rangu od H).*

Dokaz.

Dokaz ćemo ilustrirati na 5×5 matrici

$$H = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \end{bmatrix}$$

u kojoj treba poništiti elemente označene s $*$.

- Za poništavanje elementa na poziciji $(2, 1)$ koristimo givensovu rotaciju $G^{(1)}$, i definiramo $H^{(1)} = (G^{(1)})^* H$

$$\begin{bmatrix} c_1 & s_1 & 0 & 0 & 0 \\ -\bar{s}_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \end{bmatrix} = H^{(1)}.$$

Dokaz (nastavak).

- Za poništavanje elementa na poziciji $(3,2)$ u $H^{(1)}$ koristimo givensovu rotaciju $G^{(2)}$, i definiramo $H^{(2)} = (G^{(2)})^* H^{(1)}$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_2 & s_2 & 0 & 0 \\ 0 & -\bar{s}_2 & c_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & \circledast & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \end{bmatrix} = H^{(2)}.$$

- Za poništavanje elementa na poziciji $(4,3)$ u $H^{(2)}$ koristimo givensovu rotaciju $G^{(3)}$, i definiramo $H^{(3)} = (G^{(3)})^* H^{(2)}$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_3 & s_3 & 0 \\ 0 & 0 & -\bar{s}_3 & c_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & \circledast & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \end{bmatrix} = H^{(3)}.$$

Dokaz (nastavak).

- Za poništavanje elementa na poziciji $(5,4)$ u $H^{(3)}$ koristimo givensovu rotaciju $G^{(4)}$, i definiramo $R = H^{(4)} = (G^{(4)})^* H^{(3)}$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_4 & s_4 \\ 0 & 0 & 0 & -\bar{s}_4 & c_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & \circledast & * \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * \end{bmatrix} = H^{(4)}.$$

- Općenito trebamo $n-1$ rotaciju, i QR faktorizacija je oblika

$$H = \underbrace{G^{(1)} \cdots G^{(n-1)}}_{Q} R.$$

$\square$

Dokaz (nastavak).

- Dalje, u našem 5×5 primjeru je

$$
Q = \begin{bmatrix} c_1 & -s_1 & 0 & 0 & 0 \\ \bar{s}_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_2 & -s_2 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{s}_2 & c_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot
$$

$$
\cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_3 & -s_3 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{s}_3 & c_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_4 & -s_4 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{s}_4 & c_4 \end{bmatrix}
$$

$$
= \begin{bmatrix} \bar{c}_1 & -s_1 \bar{c}_2 & s_1 s_2 \bar{c}_3 & -s_1 s_2 s_3 \bar{c}_4 & s_1 s_2 s_3 s_4 \\ \bar{s}_1 & \bar{c}_1 \bar{c}_2 & -s_2 \bar{c}_1 \bar{c}_3 & s_2 s_3 \bar{c}_1 \bar{c}_4 & -s_2 s_3 s_4 \bar{c}_1 \\ 0 & \bar{s}_2 & \bar{c}_2 \bar{c}_3 & -s_3 \bar{c}_2 \bar{c}_4 & s_3 s_4 \bar{c}_2 \\ 0 & 0 & \bar{s}_3 & \bar{c}_3 \bar{c}_4 & -s_4 \bar{c}_3 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{s}_4 & \bar{c}_4 \end{bmatrix},
$$

odavde se lako vidi da je za svaki $n > 2$ matrica Q Hessenbergova.

Dokaz (nastavak).

- Lako se provjeri da je produkt RQ gornje trokutaste i Hessenbergove matrice nužno Hessenbergova matrica.
- U slučaju strogo Hessenbergove matrice mora biti $R_{jj} \neq 0$ za $j = 1, \ldots, n-1$.
  - R_{jj} može biti 0 ako i samo ako je u j-tom stupcu matrice $H^{(j-1)}$ i dijagonalni i ispoddijagonalni element jednak 0.
- Ako je matrica još i singularna, onda je nužno i R singularna, pa je $R_{nn} = 0$.
- Iz prethodno dokazanih tvrdnji znamo da su prvih $n-1$ stupaca u H linearno nezavisni, pa teorem o jedinstvenosti QR faktorizacije jedinstveno (do na množenje brojevima modula jedan) određuje prvih $n-1$ stupaca matrice Q.

$\square$

Dokaz (nastavak).

- Kako je Q unitarna, onda se njen n-ti stupac nalazi u jednodimenzionalnom potprostoru koji je ortogonalan na linearnu ljusku prvih $n-1$ stupaca, pa je određen do na množenje skalarom modula jedan.

$\square$

Korolar

Ako QR iteracije $H^{(k)} = Q^{(k)} R^{(k)}$; $H^{(k+1)} = R^{(k)} Q^{(k)}$ primijenimo na Hessenbergovu matricu H, onda su sve matrice $H^{(k)}$, $Q^{(k)}$ Hessenbergove.

- Razmotrimo još sada složenost ovakvog algoritma.
- Početna redukcija matrice A na Hessenbergovu formu H zahtijeva $O(n^3)$ operacija.
- Kako QR iteracije čuvaju Hessenbergovu formu, svaka QR faktorizacija $H^{(k)} = Q^{(k)}R^{(k)}$ se računa sa $O(n^2)$ operacija.
- To je bitno brže od QR faktorizacije $A^{(k)} = Q^{(k)}R^{(k)}$ općenite kvadratne matrice za koju je potrebno $O(n^3)$ operacija.
- Kako je $Q^{(k)} = G^{(k,1)} \cdots G^{(k,n-1)}$ produkt od $n-1$ Givensovih rotacija, a svaku od njih se može primijeniti s $O(n)$ operacija, onda

$$H^{(k+1)} = R^{(k)}G^{(k,1)} \cdots G^{(k,n-1)}$$

pokazuje da je prijelaz sa $H^{(k)}$ na $H^{(k+1)}$ moguć sa samo $O(n^2)$ aritmetičkih operacija.

Zadaci

Zadatak

U MATLAB-u napišite M-file funkciju `hessenberg()` *koja realnu matricu A transformacijama unitarne sličnosti svodi na Hessenbergovu formu. Funkcija neka ima ulazni parametar*

- *matricu A*

izlazne parametre

- *Hessenbergovu matricu H,*
- *ortogonalnu matricu Q takvu da je $A = QHQ^T$.*

Za generiranje Householderovih reflektora koristite MATLAB-ovu funkciju `gallery('house',...)`.

Podsjetnik na Householderove reflektore

- Za zadani vektor $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$, tražimo ortogonalnu matricu $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$ takvu da je

$$Hx = \alpha e, \text{ gdje je } e \in \mathbb{R}^n, \ \|e\|_2 = 1 \text{ zadani vektor.}$$

- Za $x = 0$ je $H = I$ i nužno je $\alpha = 0$.
- Za H zahtijevamo da je oblika

$$H = I_n - \beta v v^T, \qquad \text{gdje je } \beta > 0, \ v \neq 0.$$

- Matrica H je **Householderov reflektor.**

Svojstva Householderovog reflektora:

- H je simetrična matrica, tj. $H^T = H$.
- Za $\beta = \frac{2}{\|v\|_2^2}$ je H ortogonalna matrica.
- Zbog ortogonalnosti od H mora biti $\|x\|_2 = |\alpha|$, pa definiramo

$$\alpha = \begin{cases} -\|x\|_2, & e^T x \geq 0 \\ \|x\|_2, & e^T x < 0 \end{cases}$$

  Predznak se bira zbog stabilnosti metode, da izbjegnemo katastrofalno kraćenje.
- Da bi vrijedila tražena svojstva matrice H, moramo definirati sljedeće:

$$\begin{aligned} v &= x - \alpha e \\ \beta &= \frac{1}{\|x\|_2(\|x\|_2 + |e^T x|)} \end{aligned}$$

Napomena

- *Da bismo računali sa Householderovim reflektorom H uopće ga ne trebamo posebno računati kako bismo dobili njegov matrični oblik.*
- *Štoviše H se* ***apsolutno nikada ne generira kao matrica****, samo se spremaju v i β.*
- *Za $y \in \mathbb{R}^n$ je:*

$$Hy = \left(I - \beta v v^T\right) y = y - (\beta v^T y) v.$$

- *Dakle, potrebno je izračunati samo skalarni produkt $v^T y$ i $\mu = \beta v^T y \in \mathbb{R}$, odakle je*

$$Hy = y - \mu v,$$

što je manje operacija nego generirati matricu H i množiti je vektorom. Isto vrijedi za HC gdje je C matrica: $HC = C - \beta v(v^T C)$.

Zadatak

U MATLAB-u napišite M-file funkciju `schur_qr()` *koja za realnu Hessenbergovu matricu H računa realnu Schurovu dekompoziciju pomoću QR metode. Funkcija neka ima ulazne parametre*

- $n \times n$ *Hessenbergovu matricu* H,
- *toleranciju* tol *na apsolutne vrijednosti ispoddijagonalnih elemenata.*

i izlazne parametre

- *blok gornje trokutastu matricu* T *s dijagonalnim blokovima dimenzija* 1×1 *ili* 2×2,
- *ortogonalnu matricu* U *takvu da je* $H = UTU^T$,

Zadatak (nastavak)

- *jednodimenziono polje ind2, čiji element* $ind2(i) = j$ *označavaju početni indeks* 2×2 *bloka na dijagonali od* T
$$\begin{bmatrix} t_{jj} & t_{j,j+1} \\ t_{j+1,j} & t_{j+1,j+1} \end{bmatrix};$$
ind2 ima onoliko elemenata koliko ima 2×2 *blokova na dijagonali od* T*,*
- *broj iteracija* k *QR metode potrebnih za postizanje danog kriterija zaustavljanja.*

Detalji:

- *Prije svake iteracije QR metode funkcija mora provjeriti da li je neki ispoddijagonalni element jednak 0, tj da li je* H *strogo Hessenbergova matrica.*

Zadatak (nastavak)

- *Ispoddijagonalni element $h_{i+1,i}$ postavljamo na 0 ako vrijedi*
$$|h_{i+1,i}| \leq tol(|h_{i,i}| + |h_{i+1,i+1}|).$$
- *Ako takvog elementa $h_{i+1,i}$ nema normalno se izvodi iteracija metode.*
- *Ako se pojavi barem jedan element za kojeg možemo staviti $h_{i+1,i} = 0$, tada polazni problem razbijamo na podprobleme manjih dimenzija.*
- *Ako na primjer postoje takva 2 ispodijagonalna elementa $h_{i_1+1,i_1} = 0$ i $h_{i_2+1,i_2} = 0$, onda imamo sljedeću situaciju*
$$H = \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} \\ 0 & H_{22} & H_{23} \\ 0 & 0 & H_{33} \end{bmatrix},$$

Zadatak (nastavak)

pri čemu su $H_{11} = H(1:i_1, 1:i_1)$, $H_{22} = H(i_1+1:i_2, i_1+1:i_2)$ *i* $H_{33} = H(i_2+1:n, i_2+1:n)$ *strogo Hessenbergove matrice.*

- *Sada se računaju Schurove dekompozicije matrica* $H_{11} = U_{11}T_{11}U_{11}^T$, $H_{22} = U_{22}T_{22}U_{22}^T$ *i* $H_{33} = U_{33}T_{33}U_{33}^T$ *rekurzivnim pozivom funkcije* `schur_qr()`.
- *Nakon svake Schurove dekompozicije blok dijagonalnog elementa potrebno je ažurirati matricu* H:

$$H = \begin{bmatrix} U_{11}^T & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} \\ 0 & H_{22} & H_{23} \\ 0 & 0 & H_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{11} & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} T_{11} & U_{11}^T H_{12} & U_{11}^T H_{13} \\ 0 & H_{22} & H_{23} \\ 0 & 0 & H_{33} \end{bmatrix}$$

Zadatak (nastavak)

$$
\begin{aligned}
H &= \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & U_{22}^T & 0 \\ 0 & 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} \\ 0 & H_{22} & H_{23} \\ 0 & 0 & H_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & U_{22} & 0 \\ 0 & 0 & I \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12}U_{22} & H_{13} \\ 0 & T_{22} & U_{22}^T H_{23} \\ 0 & 0 & H_{33} \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
H &= \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & U_{33}^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} \\ 0 & H_{22} & H_{23} \\ 0 & 0 & H_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & U_{33} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13}U_{33} \\ 0 & H_{22} & H_{23}U_{33} \\ 0 & 0 & T_{33} \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

Zadatak (nastavak)

- *Nakon toga smo gotovi.*
- *Smanjivanje dimenzija radi se tako dugo dok ne dobijemo $m \times m$ matricu sa $m \leq 2$.*
- *U tom slučaju ne radi se ništa već se samo vrate odgovarajući izlazni parametri.*

Podsjetnik na Givensove rotacije

- **Givensove rotacije** su kvadratne matrice koje su dobivene ulaganjem dvodimenzionalnih rotacija u veću jediničnu matricu.

$$
G(p,q;\phi) = \begin{array}{c@{\quad}c}
\left[\begin{array}{ccccccccccc}
1 & & & \vdots & & & & \vdots & & & \\
 & \ddots & & \vdots & & & & \vdots & & 0 & \\
 & & 1 & \vdots & & & & \vdots & & & \\
\cdots & \cdots & \cdots & c & \cdots & \cdots & \cdots & -s & \cdots & \cdots & \cdots \\
 & & & \vdots & 1 & & & \vdots & & & \\
 & & & \vdots & & \ddots & \vdots & & & & \\
 & & & \vdots & & & 1 & \vdots & & & \\
\cdots & \cdots & \cdots & s & \cdots & \cdots & \cdots & c & \cdots & \cdots & \cdots \\
 & & & \vdots & & & & \vdots & 1 & & \\
 & 0 & & \vdots & & & & \vdots & & \ddots & \\
 & & & \vdots & & & & \vdots & & & 1
\end{array}\right]
&
\begin{array}{c}
\\ \\ \\ p \\ \\ \\ \\ q \\ \\ \\ \\
\end{array}
\\
\begin{array}{ccccccccccc}
 & & & p & & & & q & & &
\end{array}
&
\end{array}
$$

gdje su

$$\begin{aligned} G(p,q) = G(p,q;\phi) &\in \mathbb{R}^{n\times n} \\ c &= \cos\phi \\ s &= \sin\phi \\ \phi &\in [0, 2\pi\rangle, \end{aligned}$$

a p i q su pivotni indeksi i smatramo da je $p < q$.

- Matrica $G(p,q;\phi)$ je očito ortogonalna i vrijedi

$$G(p,q;\phi)^{-1} = G(p,q;\phi)^T = G(p,q;-\phi).$$

- Pomnožimo li matricu $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ slijeva sa $G(p,q;\phi)^T$, u A se promijeni samo p-ti i q-ti redak, a sve ostalo ostaje isto.

- Zato umjesto velike matrice možemo gledati pripadnu ravninsku rotaciju

$$\bar{G} = \bar{G}(p, q; \phi) = \begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix}$$

  i samo p-ti i q-ti redak od A.
- Neka su

$$[a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_n] \quad i \quad [b_1 \ b_2 \ \cdots \ b_n]$$

  p-ti i q-ti redak od A i neka je $\bar{A} = \bar{G}^T A$.
- Zapravo mijenjamo samo ovo:

$$\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{a}_1 & \bar{a}_2 & \cdots & \bar{a}_n \\ \bar{b}_1 & \bar{b}_2 & \cdots & \bar{b}_n \end{bmatrix}.$$

- ϕ ćemo odabrati tako da se u A poništi element na mjestu (q, r), tj. tako da je $\bar{b}_r = 0$.

- Imamo:

$$\begin{aligned} ca_i + sb_i =& \bar{a}_i \\ -sa_i + cb_i =& \bar{b}_i, \qquad i = 1, \ldots, n \end{aligned}$$

- Iz uvjeta $\bar{b}_r = 0$, je

$$cb_r = sa_r,$$

$$\bar{G}^T \begin{bmatrix} a_r \\ b_r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{a}_r \\ 0 \end{bmatrix}.$$

- Budući da je $\bar{G}$ ortogonalna vrijedi

$$|\bar{a}_r| = \left\| \begin{bmatrix} \bar{a}_r \\ 0 \end{bmatrix} \right\|_2 = \left\| \bar{G}^T \begin{bmatrix} a_r \\ b_r \end{bmatrix} \right\|_2 = \left\| \begin{bmatrix} a_r \\ b_r \end{bmatrix} \right\|_2 = \sqrt{a_r^2 + b_r^2}.$$

- $\bar{a}_r$ biramo tako da bude pozitivan:

$$\bar{a}_r = \sqrt{a_r^2 + b_r^2} > 0.$$

- Ako je $a_r = b_r = 0$ tada $\bar{G} = I$.
- Napokon, dobivamo

$$c = \frac{a_r}{\bar{a}_r}, \qquad s = \frac{b_r}{\bar{a}_r}.$$

Napomena

Zbog točnijeg računanja u aritmetici konačne preciznosti, c i s se često računaju kao

- $|b_r| > |a_r|$

$$\tau = \frac{a_r}{b_r}, \quad s = \frac{sign(b_r)}{\sqrt{1+\tau^2}}, \quad c = s\tau,$$

- $|b_r| \le |a_r|$

$$\tau = \frac{b_r}{a_r}, \quad c = \frac{sign(a_r)}{\sqrt{1+\tau^2}}, \quad s = c\tau.$$

Domaća zadaća

1. ***SOR metoda i metoda potencija***
   Generirajte dvije $n \times n$ matrice A_1 i A_2 za $n \geq 10$, takve da za A_1 SOR metoda s optimalnim parametrom sporo konvergira, a za A_2 konvergira brzo.
   - *Iskoristite svoju MATLAB funkciju* `metoda_potencija()` *za računanje spektralnog radijusa matrice iteracija i određivanje optimalnog parametra* ω.
   - *Optimalni parametar očitajte s grafa dobivenog MATLAB funkcijom* `sor_konvergencija()`.
   - *Iskoristite svoju MATLAB funkciju* `sor()` *za rješavanje sustava* $A_1x = b_1$ *i* $A_2x = b_2$, *gdje su* b_1 *i* b_2 *određeni tako da je egzaktno rješenje u oba slučaja jednako* $\begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}^T$. *Uzmite optimalne parametre i istu toleranciju* $tol = 10^{-8}$ *za oba sustava.*
   - *Nacrtajte grafove grešaka i relativnih normi reziduala za oba sustava, pravilno označite osi i legendu.*

Domaća zadaća (nastavak)

2. ***Metoda konjugiranih gradijenata i Schurova dekompozicija***
   Generirajte dvije $n \times n$ matrice A_3 i A_4 za $n \geq 10$, takve da za A_3 metoda konjugiranih gradijenata sporo konvergira, a za A_4 konvergira brzo.
   - *Iskoristite svoje MATLAB funkcije* `hessenberg()` *i* `schur_qr()` *za računanje spektra matrica A_3 i A_4. Za* `schur_qr()` *uzmite tol $= 10^{-8}$. Svojstvene vrijednosti očitajte iz njihovih Schurovih formi, pri čemu svojstvene vrijednosti 2×2 blokova na dijagonali izračunajte kao rješenja kvadratne jednadžbe.*
   - *Iskoristite svoju MATLAB funkciju* `cg()` *za rješavanje sustava $A_3x = b_3$ i $A_4x = b_4$, gdje su b_3 i b_4 određeni tako da je egzaktno rješenje u oba slučaja jednako $\begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}^T$. Uzmite istu toleranciju tol $= 10^{-8}$ za oba sustava.*

Domaća zadaća (nastavak)

- *Nacrtajte grafove grešaka i relativnih normi reziduala za oba sustava, pravilno označite osi i legendu.*

3. ***Programski dio zadaće***
   Svaki student mora sam napisati sve gore navedene funkcije i matrice, i mora ih znati objasniti nastavniku. Ukoliko se utvrdi da student nije sam napravio svoje zadatke neće dobiti minimani broj bodova iz zadaće!
4. ***Pismeni dio zadaće***
   Svaki student će predati nastavniku pismeni opis rezultata svoje zadaće. Potrebno je:
   - *za svaku matricu A_i $i = 1, 2, 3, 4$ napisati dimenziju, broj uvjetovanosti i karakteristiku matrice koja bi mogla biti važna za danu iterativnu metodu za rješavanje sustava linearnih jedadžbi (dijagonalna dominantnost, simetričnost, pozitivna definitnost,...),*

Domaća zadaća (nastavak)

- *za svaku matricu* A_i $i = 1, 2, 3, 4$ *navesti svojstvo zbog kojeg dana iterativna metoda za rješavanje sustava linearnih jedadžbi sporo ili brzo konvergira, uz objašnjenje zašto je to tako (odgovarajući teorem),*
- *za svaki sustav* $A_i x = b_i$ $i = 1, 2, 3, 4$ *napisati dobivenu aproksimaciju rješenja u* `long` *formatu,*
- *za svaki sustav* $A_i x = b_i$ $i = 1, 2, 3, 4$ *nacrtati prethodno opisane grafove konvergencije,*
- *za svaki sustav* $A_i x = b_i$ $i = 1, 2, 3, 4$ *navesti komentar o tome da li se dobiveni rezultati poklapaju sa gore opisanim svojstvom matrice.*

Sve matrice i vektore spremite u datoteku naredbom `save`*.*

Napomena

Kod 1. dijela zadatka metoda potencija može vrlo sporo konvergirati za neke matrice iteracija T, kod kojih je ω blizu 0 ili 2. Ovaj problem možete popraviti na sljedeći način. Metodi potencija dodajte još jedan izlazni parametar `flag` *koji će biti jednak*

- *1, ako je metoda izkonvergirala u manje ili jednako 100 koraka,*
- *0, ako metoda nije izkonvergirala u 100 koraka; u tom slučaju metoda prekida sa izvršavanjem.*

Ukoliko je metoda vratila `flag`$=0$ *spektralni radijus izračunajte pomoću MATLAB-ove funkcije* `eig()`.

Dekompozicija singularnih vrijednosti (SVD)

- Vidjet ćemo da množenjem različitim unitarnim matricama s lijeva i desna možemo **proizvoljnu pravokutnu matricu** svesti na dijagonalni oblik.
- Ova dekompozicija ima veze sa svojstvenim problemom i sprektralnim dekompozicijama matrica A^*A i AA^*.
- SVD ima široku primjenu:
  - računanje inverza regularne kvadratne matrice
  - računanje generaliziranog inverza pravokutne matrice
  - računanje uvjetovanosti matrice
  - rješavanje ortogonalnog Procrustes problema
  - nalaženje presjeka jezgara dvaju linearnih operatora
  - nalaženje kuteva između dva potprostora
  - nalaženje presjeka potprostora
  - rješavanje linearnog problema najmanjih kvadrata
  - rješavanje linearnog problema totalnih najmanjih kvadrata
  - rješavanje integralnih jednadžbi
  - procesiranje slika

Teorem (Dekompozicija singularnih vrijednosti (SVD))

Neka je $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ matrica ranga r. Tada postoje unitarne matrice $U \in \mathbb{C}^{m\times m}$ i $V \in \mathbb{C}^{n\times n}$ takve da je na jedinstven način određena dijagonalna matrica

$$U^* A V = \Sigma = \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} \Sigma_+ & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{array}{l} r \\ m-r \end{array} \\ \begin{array}{cc} r & n-r \end{array} & \end{array}$$

gdje je $\Sigma_+ = diag(\sigma_1, \ldots, \sigma_r)$, uz $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$. Kažemo da je $A = U\Sigma V^*$ ***dekompozicija singularnih vrijednosti (SVD)*** *matrice A.*

Napomena

Ako je $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ realna matrica tada postoje ortogonalne matrice $U \in \mathbb{R}^{m\times m}$ i $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ takve da je $A = U\Sigma V^T$ SVD matrice A.

Dokaz.

- Primjetimo da je $A^*A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ hermitska pozitivno semidefinitna matrica:

$$x^*A^*Ax = (Ax)^*Ax = \|Ax\|_2^2 \geq 0, \quad \text{za } \forall x \in \mathbb{C}^n.$$

  i da ima realne nenegativne svojstvene vrijednosti:

$$\text{za } \lambda \in \sigma(A^*A) \ \exists x \in \mathbb{C}^n, \ x \neq 0 \text{ takav da je } A^*Ax = \lambda x,$$

$$\text{vrijedi: } x^*A^*Ax = \lambda x^*x \ \Rightarrow \ \lambda = \frac{\|Ax\|_2^2}{\|x\|_2^2} \geq 0.$$

- Definiramo svojstvene vrijednosti od A^*A:

$$\sigma(A^*A) = \{\sigma_1^2, \sigma_2^2, \ldots, \sigma_s^2, \sigma_{s+1}^2, \ldots, \sigma_n^2\},$$

  takve da je

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_s > 0 = \sigma_{s+1} = \cdots = \sigma_n.$$

Dokaz (nastavak).

- Sada definiramo regularnu dijagonalnu matricu $\Sigma_+ = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_s) \in \mathbb{C}^{s\times s}$.
- Kako je A^*A hermitska znamo da je njena Schurova forma upravo dijagonalna matrica

$$\begin{array}{cc} \left[\begin{array}{cc} \Sigma_+^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{array}\right] & \begin{array}{c} s \\ n-s \end{array} \\ \begin{array}{cc} s & n-s \end{array} & \end{array}$$

  što znači da postoji unitarna matrica $V \in \mathbb{C}^{n\times n}$ takva da

$$V^*A^*AV = \left[\begin{array}{cc} \Sigma_+^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{array}\right].$$

- Particionirajmo sada matricu $V = [\begin{array}{cc} V_1 & V_2 \end{array}]$, gdje su $V_1 \in \mathbb{C}^{n\times s}$ i $V_2 \in \mathbb{C}^{n\times(n-s)}$.

Dokaz (nastavak).

- Odavde slijedi da je

$$\begin{bmatrix} \Sigma_+^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} V_1^* \\ V_2^* \end{bmatrix} A^*A[\ V_1 \quad V_2\ ] = \begin{bmatrix} V_1^*A^*AV_1 & V_1^*A^*AV_2 \\ V_2^*A^*AV_1 & V_2^*A^*AV_2 \end{bmatrix},$$

  pa vidimo da mora biti

$$V_1^*A^*AV_1 = \Sigma_+^2,$$

  i

$$V_2^*A^*AV_2 = (AV_2)^*AV_2 = 0 \quad \Rightarrow \quad AV_2 = 0.$$

- Sada definiramo matricu

$$U_1 = AV_1\Sigma_+^{-1} \in \mathbb{C}^{m\times s},$$

  za koju vrijedi

Dokaz (nastavak).

$$\begin{aligned} U_1^* U_1 &= (AV_1\Sigma_+^{-1})^* AV_1\Sigma_+^{-1} = \Sigma_+^{-1} V_1^* A^* AV_1 \Sigma_+^{-1} \\ &= \Sigma_+^{-1}\Sigma_+^2\Sigma_+^{-1} = I \end{aligned}$$

dakle, matrica U_1 je ortonormalna.

- Neka su stupci matrice $U_2 \in \mathbb{C}^{m\times(m-s)}$ nadopuna za stupce iz U_1 do ortonormirane baze prostora $\mathbb{C}^m$.
- Tada je $U = \begin{bmatrix} U_1 & U_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{m\times m}$ unitarna matrica, za koju zbog jednakosti

$$U_1 = AV_1\Sigma_+^{-1}, \; V_1^* A^* AV_1 = \Sigma_+^2, \; AV_2 = 0$$

vrijedi

$\square$

Dokaz (nastavak).

$$
\begin{aligned}
U^* A V &= \begin{bmatrix} U_1^* \\ U_2^* \end{bmatrix} A \begin{bmatrix} V_1 & V_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_1^* A V_1 & U_1^* A V_2 \\ U_2^* A V_1 & U_2^* A V_2 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \Sigma_+^{-1} V_1^* A^* A V_1 & U_1^* 0 \\ U_2^* U_1 \Sigma_+ & U_2^* 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_+ & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \Sigma.
\end{aligned}
$$

- Dakle, našli smo unitarne matrice U i V takve da je $U^* A V = \Sigma$, gdje je Σ dijagonalna matrica ranga s.
- Još vrijedi

$$
s = \operatorname{rang}(\Sigma) = \operatorname{rang}(A) = r
$$

$\square$

Definicija

- *Nenegativni elementi na dijagonali matrice* Σ

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_p \geq 0, \quad p = \min\{m, n\}$$

zovu se singularne vrijednosti matrice A,

- *prvih p stupaca matrice* $U = \begin{bmatrix} u_1 & \cdots & u_m \end{bmatrix}$ *zovu se lijevi singularni vektori matrice A,*
- *a prvih p stupaca matrice* $V = \begin{bmatrix} v_1 & \cdots & v_n \end{bmatrix}$ *zovu se desni singularni vektori matrice A.*
- *Ako uspoređujemo stupce u jednakostima* $AV = U\Sigma$ *i* $A^*U = V\Sigma^*$ *dobit ćemo da za singularne vrijednosti i singularne vektore vrijedi*

$$\begin{aligned} Av_i &= \sigma_i u_i \\ A^* u_i &= \sigma_i v_i, \qquad i = 1, \ldots, p. \end{aligned}$$

Napomena

- *Ako izvršimo particiju matrica*

$$U = \begin{array}{c} [\, U_1 \quad U_2 \,] \\ \quad r \quad m-r \end{array} \qquad V = \begin{array}{c} [\, V_1 \quad V_2 \,] \\ \quad r \quad n-r \end{array}$$

onda iz prethodnog teorema slijedi:

1. $Im(A) = span\{u_1, \dots, u_r\}$
2. $Ker(A) = span\{v_{r+1}, \dots, v_n\}$
3. *Imamo*

$$\begin{bmatrix} \Sigma_+ & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_1^* \\ U_2^* \end{bmatrix} A [\, V_1 \quad V_2 \,],$$

odnosno

$$\Sigma_+ = U_1^* A V_1 .$$

Napomena (nastavak)

Dakle, dekompoziciju singularnih vrijednosti možemo napisati u skraćenom obliku

$$A = U_1 \Sigma_+ V_1^* = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i u_i v_i^*,$$

pri čemu su $U_1 \in \mathbb{C}^{m \times r}$ *i* $V_1 \in \mathbb{C}^{n \times r}$ *ortonormalne matrice.*

Napomena

Za matricu $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ ranga $r \leq \min(m,n)$, matrice $A^*A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ i $AA^* \in \mathbb{C}^{m\times m}$ su hermitske i pozitivno semidefinitne. Vrijedi:

- $$V^*A^*AV = diag(\sigma_1^2,\ldots,\sigma_r^2,\underbrace{0,\ldots,0}_{n-r}), \quad \sigma_1\geq\sigma_2\geq\cdots\geq\sigma_r>0$$

  tj, kvadrati singularnih vrijednosti matrice A su svojstvene vrijednosti matrice A^*A, samo što se među njima nalazi $n-r$ nula, a stupci matrice V su njeni svojstveni vektori.

Napomena (nastavak)

- $$U^* AA^* U = diag(\sigma_1^2, \ldots, \sigma_r^2, \underbrace{0, \ldots, 0}_{m-r}), \quad \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$$

  tj, kvadrati singularnih vrijednosti matrice A su svojstvene vrijednosti matrice AA^*, samo što se među njima nalazi $m - r$ nula, a stupci matrice U su njeni svojstveni vektori.

Teorem

Neka je $A = U\Sigma V^*$ SVD matrice $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ ranga r. Za $k \in \{1,\dots,r-1\}$ definiramo matricu

$$A_k = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i v_i^*.$$

Tada je

$$\min_{rang(B)=k} \|A - B\|_2 = \|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1}$$

$$\min_{rang(B)=k} \|A - B\|_F = \|A - A_k\|_F = \sqrt{\sum_{i=k+1}^{\min\{m,n\}} \sigma_i^2}.$$

Dakle, od svih $m \times n$ matrica ranga k matrica A_k je najbliža matrici A u spektralnoj i u Frobeniusovoj normi.

Numeričko računanje SVD-a

Kao i kod računanja Schurove dekompozicije, računanje SVD-a možemo izvesti u dva koraka:

1. Unitarnim transformacijama svesti matricu $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ (BSOMP $m \geq n$) na **bidijagonalnu formu**

$$A = U \begin{bmatrix} B \\ 0 \end{bmatrix} V^*, \qquad U \in \mathbb{C}^{m\times m},\ B, V \in \mathbb{C}^{n\times n},$$

gdje su U i V unitarne, a B je bidijagonalna

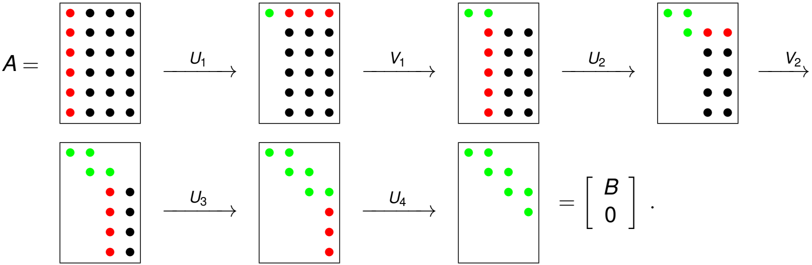
$$B = \begin{bmatrix} \psi_1 & \phi_2 & & & \\ & \psi_2 & \phi_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \psi_{n-1} & \phi_n \\ & & & & \psi_n \end{bmatrix}.$$

2. Primjena efikasne iteratvne metode za računanje SVD-a matrice B.

Bidijagonalizacija

- Bidijagonalizacija je bazirana na množenju matrice s lijeva i s desna Householderovim reflektorima, takvima da na kraju postupka dobijemo sljedeću relaciju
$$\begin{bmatrix} B \\ 0 \end{bmatrix} = U_n \cdots U_1 A V_1 \cdots V_{n-2}, \quad U=U_1 \cdots U_n, \; V=V_1 \cdots V_{n-2},$$
gdje su U_k i V_k Householderovi reflektori.
- Householderovi reflektori U_k biraju se tako da ponište elemente matrice A ispod dijagonale.
- Householderovi reflektori V_k biraju se tako da ponište elemente matrice A iznad 1. gornje sporedne dijagonale.
- Računanje i primjena Householderovih reflektora U_k i V_k međusobno se izmjenjuju:
    - u k-tom koraku U_k će poništiti sve elemente ispod dijagonale u k-tom stupcu,
    - a V_k će poništiti sve elemente desno od 1. gornje sporedne dijagonale u k-tom retku.

Bidijagonalizacija je prikazana na sljedećoj slici.



- Elementi označeni sa • su važni za određivanje Householderovog reflektora u sljedećem koraku.
- Elementi označeni sa • su izračunate vrijednosti nakon primjene Householderovog reflektora.

Bidijagonalni SVD

- Nakon bidijagonalizacije, računa se SVD bidijagonalne matrice:
$$B = U_B \Sigma V_B^*.$$
- Konačni SVD matrice A dobiva se kao
$$A = \left(U \begin{bmatrix} U_B & 0 \\ 0 & I_{m-n} \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} (VV_B)^*.$$
- Iterativna metoda za računanje SVD-a bidijagonalne matrice pretpostavlja da je bidijagonalna matrica B nereducirana, tj. da su svi elementi 1. gornje sporedne dijagonale različiti od nule, $\phi_i \neq 0$ za $i = 2, \ldots, n$.
- Ako je npr. $\phi_{k+1} = 0$ za neki k, tada je
$$B = \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} B_1 & 0 \\ 0 & B_2 \end{bmatrix} & \begin{array}{l} k \\ n-k \end{array} \\ \begin{array}{cc} k & n-k \end{array} & \end{array}$$
pa je originalni problem nalaženja SVD-a sveden na dva manja problema sa matricama B_1 i B_2.

- Metoda za računanje bidijagonalnog SVD-a bazira se na QR metodi primijenjenoj na pozitivno semidefinitnu tridijagonalnu matricu $T = B^*B$.
- Ako je $T^{(0)} = T$, tada će iteracije

$$\begin{aligned} T^{(k)} &= UR \quad \text{(QR faktorizacija)} \\ T^{(k+1)} &= RU, \quad k = 0, 1, \ldots \end{aligned}$$

  dati novu tridijagonalnu matricu $T^{(k+1)} = U^* T^{(k)} U$.
- Ponovo možemo napisati da je $T^{(k+1)} = (B^{(k+1)})^* B^{(k+1)}$, gdje je $B^{(k+1)}$ bidijagonalna.
- U metodi se $T^{(k+1)}$ zapravo nikada neće generirati jer se transformacije direktno primijenjuju na $B^{(k)}$.

- k-ta iteracija se sastoji od sljedećih koraka.
  1. Izračunaj Givensovu rotaciju V_1 takvu da je
  $$V_1^* T^{(k)} \begin{bmatrix} t_{11}^{(k)} \\ t_{21}^{(k)} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$
  2. Izračunaj Givensove rotacije $V_2, \ldots, V_{n-1}$ tako da za $V^{(k)} = V_1 \cdots V_{n-1}$ vrijedi da je $T^{(k+1)} = (V^{(k)})^* T^{(k)} V^{(k)}$ tridijagonalna i $V^{(k)} e_1 = V_1 e_1$.
- Ovaj postupak se naziva “naganjanje kvrge” u bidijagonalnoj matrici $B^{(k)}$.
- k-ti korak završava dobivanjem nove bidijagonalne matrice $B^{(k+1)}$.

- $B^{(k+1)}$ je sa $B^{(k)}$ povezana sljedećom relacijom

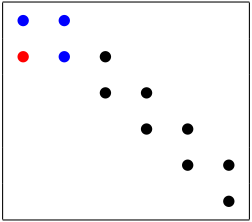
$$B^{(k+1)} = (U_{n-1}^* \cdots U_1^*) B^{(k)} (V_1 \cdots V_{n-1}) = (U^{(k)})^* B^{(k)} V^{(k)}.$$

- Može se pokazati da cijeli postupak konvergira ka dijagonalnoj matrici

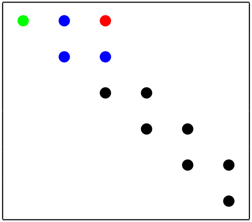
$$\lim_{k \to \infty} B^{(k)} = \Sigma.$$

- Cjeli postupak je ilustriran na 6×6 matrici.

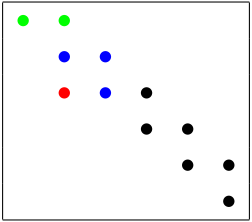
$$B_1^{(k)} \longleftarrow B^{(k)} V_1 =$$



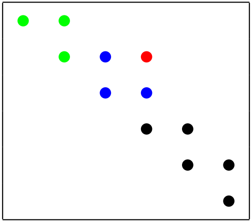
$$B_2^{(k)} \longleftarrow U_1^T B_1^{(k)} =$$



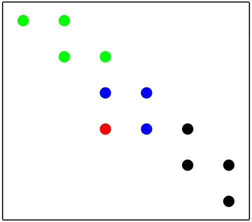
$$B_3^{(k)} \longleftarrow B_2^{(k)} V_2 =$$



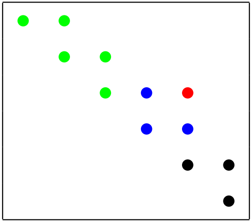
$$B_4^{(k)} \longleftarrow U_2^T B_3^{(k)} =$$



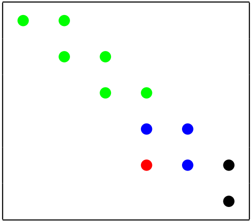
$$B_5^{(k)} \longleftarrow B_4^{(k)} V_3 =$$



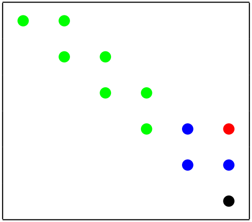
$$B_6^{(k)} \longleftarrow U_3^T B_5^{(k)} =$$



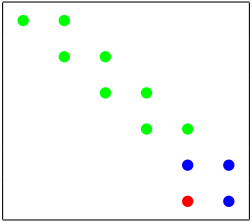
$$B_7^{(k)} \longleftarrow B_6^{(k)} V_4 =$$



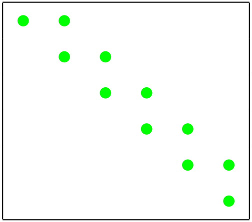
$$B_8^{(k)} \longleftarrow U_4^T B_7^{(k)} =$$



$$B_9^{(k)} \longleftarrow B_8^{(k)} V_5 =$$



$$B_{10}^{(k)} \longleftarrow U_5^T B_9^{(k)} =$$



$$= B^{(k+1)}$$